# ALPHAZERO И ПОРОЖДАЮЩИЕ МОДЕЛИ

Сергей Николенко СПбГУ— Санкт-Петербург 16 мая 2024 г.

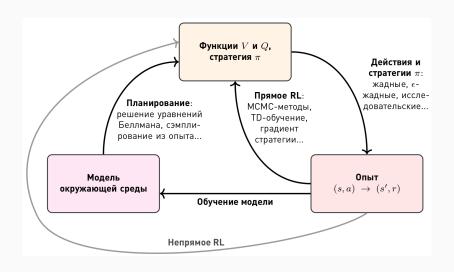




#### Random facts:

- 18 мая 1703 г. день основания Балтийского флота: 30 лодок под командованием Петра I захватили два крупных шведских корабля «Гедан» и «Астрильд»
- 18 мая 1756 г. Великобритания объявила войну Франции, и началась Семилетняя война;
   18 мая 1803 г. Великобритания объявила войну Франции (закончился Амьенский мир),
   и продолжились наполеоновские войны, а 18 мая 1804 г. Наполеон I был провозглашён императором французов
- 18 мая 1896 г. на Ходынском поле должна была пройти коронация Николая II, где должны были раздавать эмалированные кружки, колбасу, пряники и сласти; в 5 часов утра на Ходынке собрались уже более 500 тысяч человек, и в давке погибли почти 2000; в тот же день в доме №46 по Невскому проспекту был открыт первый в Петербурге кинотеатр
- 18 мая 1909 г. балетом «Князь Игорь» открылись первые Дягилевские вечера русского балета в Париже
- 18 мая 1985 г. в газете «Правда» появилась рубрика «Трезвость норма жизни»

# Обучение с подкреплением



# Обзор методов

	Функция	Обновление в ожидании	Обновление по выборке		
	-	Уравнение Беллмана	TD(0)		
	$V_{\pi}(S_t) :=$	$\sum_{a \in \mathcal{A}} \pi \left( a S_t \right) \sum_{s' \in \mathcal{S}} \sum_{r \in \mathcal{R}} p \left( s', r s, a \right) \left( r + \gamma V_{\pi}(s') \right)$	$V(S_t) + \alpha (R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1}) - V(S_t))$		
Оценка стратегии $\pi$		y	$S_{i}$ $A_{i}$ $S_{i+1}$ $O$		
15		Уравнение Беллмана	Sarsa, Sarsa с ожиданием		
нка	$Q_{\pi}(S_t, A_t) :=$	$\sum_{s' \in \mathcal{S}} \sum_{r \in \mathcal{R}} p\left(s', r \middle  S_t, A_t\right) \left(r + \gamma \sum_{a' \in \mathcal{A}} \pi\left(a' \middle  s'\right) Q_{\pi}(s', a')\right)$	$Q(S_t, A_t) + \alpha (R_{t+1} + \gamma Q(S_{t+1}, A_{t+1}) - Q(S_t, A_t))$		
Ιğ			$Q(S_t, A_t) + \alpha (R_{t+1} + \gamma \sum_a \pi (a S_{t+1}) Q(S_{t+1}, a) - Q(S_t, A_t))$		
		$s_{i}a$	$(S_t, A_t)$ $(S_t, A_t)$		
		p(s',r s,a)	l I		
			$S_{t+1}$ $S_{t+1}$		
		Λ Λπ	Aug		
		• • • • • a'	$A_{t+1} \bullet A_{t+1} \bullet \bullet$		
	*** (0.)	Уравнение Беллмана			
	$V_*(S_t) :=$	$\max_{a \in \mathcal{A}} \sum_{s' \in \mathcal{S}} \sum_{r \in \mathcal{R}} p\left(s', r   S_t, a\right) \left(r + \gamma V_*(s')\right)$			
Управление, поиск π <sub>∗</sub>		$\begin{array}{c} a \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\$			
Je H	Уравнение Беллмана		Q-обучение		
Управ	$Q_*(S_t,A_t) :=$	$\sum_{s' \in \mathcal{S}} \sum_{r \in \mathcal{R}} p\left(s', r   S_t, A_t\right) \left(r + \gamma \max_{a'} Q_*(s', a')\right)$	$Q(S_{t}, A_{t}) + \alpha (R_{t+1} + \gamma \max_{a} Q(S_{t+1}, a) - Q(S_{t}, A_{t}))$		
		s Q	$(S_t, A_t)$		
		$r = \sum_{s' \in S} \max_{a'} p(s', r s, a)$	Stat Court		

# ALPHAGO

#### WHAT HAPPENED

- 8-15 марта 2016 года прошёл исторический матч.
- AlphaGo (Google DeepMind) 4: 1 Ли Седоль 9р (Корея).



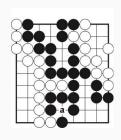
#### WHAT HAPPENED

- 8-15 марта 2016 года прошёл исторический матч.
- · AlphaGo (Google DeepMind) 4:1 Ли Седоль 9р (Корея).

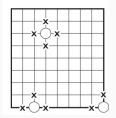


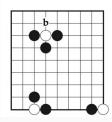
· ...but why do we care?

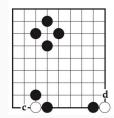
## Правила го



- $\cdot$  Вкратце о правилах: камни ставят на доску  $19 \times 19$   $(9 \times 9, 13 \times 13).$
- Камни снимаются, когда их окружают.
- Побеждает тот, кто занимает больше территории (плюс съеденные камни).





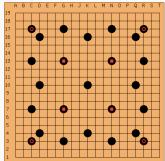


#### История компьютерного го

- 1968: Albert Zobrist первая программа, влияние камней, Zobrist hashing.
- Середина 1980х: появились РС, интерес к этому.
- Ing Prize: 40M тайваньских долларов, если компьютер сможет до 2000 года обыграть профессионала 1 дана.
- Программы 1990х: Goliath (1989-1991), Go Intellect, Handtalk, Goemate.
- (David Fotland, 1993): Many Faces of Go, долгое время одна из ведущих программ.
- · Они работали на pattern matching и базах знаний.
- И насколько же хорошо они играли?..

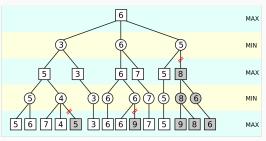
#### О силе игры

- ...да совсем никак.
- 1997: Janice Kim 1р победила HandTalk на 25 камнях форы.
- В том же году HandTalk выиграл часть Ing Prize, победив трёх 11-13-летних любителей 2-6d на 11 камнях форы.
- 2001: Many Faces выиграл y insei (1kyu pro) на 15 камнях.
- · Это те годы, когда DeepBlue уже давно победил Каспарова.
- В чём же дело? Почему так сложно?



#### Почему го -- это сложно

• В других играх (шахматы) отлично работает alpha-beta search: строим минимакс-дерево ходов, выкидываем ходы, которые заведомо хуже других, ищем в глубину.



• Почему не в го?

#### Почему го -- это сложно

- Почему го сложнее, чем шахматы?
- Очень большая ширина дерева (branching factor):
  - в шахматах 30-40 возможных ходов, из них многие сразу приводят к потерям и их можно обрезать;
  - в го около 250 возможных ходов, и из них «вполне разумных» тоже около сотни.

#### • Оценка позиции:

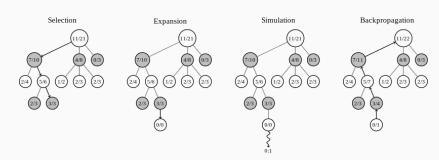
- в шахматах можно посчитать материал и какие-то простые эвристики, и если разрыв большой, скорее всего оценка очевидна;
- в го тоже может упасть большая группа, но это редкость, обычно потери территориальные, труднооцениваемые;
- очень сложная для автоматизации задача даже просто оценить конечную позицию в го (когда люди уже согласились, кто выиграл).

#### Почему го -- это сложно

- Тактика life and death problems:
  - казалось бы, компьютеры считают варианты быстро;
  - но в го на решение локальных проблем влияют далеко расположенные камни и вся позиция; редко можно обрезать часть доски и сделать полный перебор;
  - а статус групп может измениться под влиянием глобальных эффектов и взаимодействовать с ними;
  - кроме того, человеку в го считать проще, чем в шахматах.
- Стратегия: нужно понимать взаимодействие камней на всей доске и очень тонко оценивать возникающую позицию, досчитать большинство веток до «явного преимущества», как в шахматах, невозможно.
- Ко-борьба: программы всегда отвратительно играли ко, бездарно тратили ко-угрозы, не замечали, что ко может возникнуть.

## MONTE-CARLO TREE SEARCH

- 2006 (Remi Coulom, затем MoGo, затем все): революция компьютерного го Monte-Carlo tree search (MCTS).
- Запускаем *случайные симуляции* с текущей позиции, смотрим, в каких ветках больше выигрышей, повторяем.



#### MONTE-CARLO TREE SEARCH

- Основная часть MCTS формула, по которой выбирают узел для дальнейшего анализа:
  - это всё основано на тех же многоруких бандитах;
  - UCT (upper confidence bound UCB1 applied to trees) выбираем узел с максимальным

$$\frac{w_i}{n_i} + c\sqrt{\frac{\ln t}{n_i}},$$

где  $w_i$  – число побед,  $n_i$  – число симуляций, c – параметр (часто  $\sqrt{2}$ ),  $t=\sum_i n_i$  – общее число симуляций.

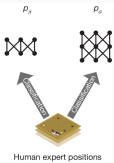
## MONTE-CARLO TREE SEARCH

- И пошли более разумные результаты:
  - 2006: CrazyStone выиграл ICGA Computer Olympiad на доске  $9 \times 9$ ;
  - · 2007: CadiaPlayer чемпион по General Game Playing;
  - 2008: МоGо достиг уровня дана на доске  $9 \times 9$ ;
  - 2009: Fuego побеждает одного из топ-игроков на доске  $9 \times 9$ ;
  - $\cdot$  2009: Zen достигает уровня 1d на сервере KGS на доске  $19 \times 19$ ;
  - $\cdot$  2012: Zen выиграл 3:1 матч у 2d любителя на доске  $19 \times 19$ ;
  - · 2013: CrazyStone выиграл у Yoshio Ishida 9р на четырёх камнях;
  - около 2015-2016 CrazyStone и Zen, основанные на MCTS, достигали уровня 6-7d на KGS (но это совсем не то же, что профессиональные даны).
- MCTS работал и в других играх (Hex, Arimaa, MtG, Settlers).
- Но в 2016-м «внезапно» появилась AlphaGo. Что же она делает?

## ALPHAGO: ИСТОРИЯ

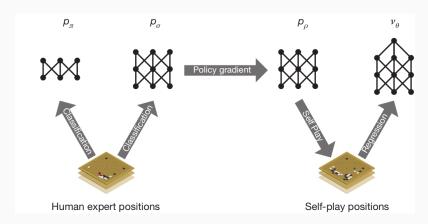
- AlphaGo разработана в 2014-2015гг. в Google DeepMind: David Silver, Aja Huang и другие.
- В октябре 2015 года распределённая версия AlphaGo (1202 CPUs + 176 GPUs) победила Fan Hui 2p, чемпиона Европы, со счётом 5:0 (и 3:2 с укороченным контролем).
- Об этом рассказывает статья в *Nature* «Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search», основной источник об AlphaGo.
- В 2016 победа 4:1 над Lee Sedol 9р, одним из лучших профессионалов в мире.
- Что же изменилось в AlphaGo по сравнению с MCTS-программами?

- · SL policy network предсказывает ходы:
  - 13-слойная свёрточная сеть выделяет признаки по всей доске;
  - · обучается на профессиональных играх (30 млн позиций с KGS);
  - · на выходе распределение ходов  $p_{\sigma}(a \mid s)$ ;
  - получается 57.0% правильных предсказаний (очень много);
  - $\cdot$  ещё обучаем быструю, но более плохую стратегию  $p_\pi$  (точность 24.2%, но оценка позиции за 2нс вместо 3мс).



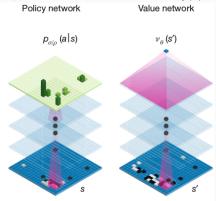
- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением:
  - та же структура (13-слойная свёрточная сеть);
  - · инициализируется с SL policy network;
  - затем играет сама с собой (с одной из предыдущих итераций обучения);
  - веса дообучаются так, чтобы максимизировать вероятность выигрыша;
  - RL policy network выигрывает 80% игр против SL, 85% игр против Pachi (одной из лучших MCTS-программ);
  - и это всё ещё без всякого счёта, просто глобальной оценкой позиции!

- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением.



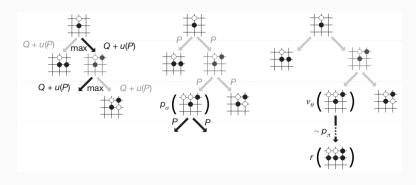
- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением.
- · Затем обучаем функцию оценки позиции  $v_{\theta}(s)$ :
  - предсказываем результат игры по позиции нейронной сетью;
  - структура сети похожа на policy networks, но теперь один выход;
  - если обучить на наборе профессиональных игр, будет просто overfitting, недостаточно данных;
  - поэтому обучаем на наборе self-play, порождённом RL policy network;
  - получается сеть для оценки позиции, которая работает очень быстро по сравнению с MCTS и даёт качество на уровне MCTS с RL policy (в 15К раз быстрее) и гораздо лучше, чем обычный MCTS.

- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением.
- Затем обучаем функцию оценки позиции  $v_{\theta}(s)$ .



- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением.
- Затем обучаем функцию оценки позиции  $v_{\theta}(s)$ .
- А теперь можно и деревья посчитать:
  - строим MCTS-подобное дерево;
  - · априорные вероятности инициализируются через SL policy network как  $p_{\sigma}(a\mid s)$ ;
  - · в листе L считаем значение value network  $v_{\theta}(s_L)$  и результат random rollout  $z_L$  при помощи стратегии  $p_{\pi}$ , объединяем результат;
  - любопытно, что SL policy работает лучше для построения дерева (видимо, более разнообразные варианты), но value function лучше строить на основе более сильной RL policy.

- · SL policy network предсказывает ходы.
- RL policy network улучшает policy network за счёт обучения с подкреплением.
- · Затем обучаем функцию оценки позиции  $v_{\theta}(s)$ .
- А теперь можно и деревья посчитать.



# МАТЧ С ЛИ СЕДОЛЕМ

- Перед началом матча Ли Седоль предсказывал свою победу со счётом 5:0 или 4:1.
- Практически все эксперты были согласны с таким прогнозом.



# Матч с Ли Седолем

• Первая партия: Ли Седоль необычно разыграл фусеки (дебют), желая, видимо, свернуть с «накатанных» для AlphaGo путей (примерно так играли против компьютера в шахматы, когда это было возможно).



# МАТЧ С ЛИ СЕДОЛЕМ

 Исход игры долго был неясен, AlphaGo, по мнению экспертов, делала ошибки, но около 120-130 хода белые (AlphaGo) получили преимущество и безупречно разыграли йосе (эндшпиль), без шансов для Ли Седоля.



# МАТЧ С ЛИ СЕДОЛЕМ

- Во второй партии AlphaGo сделала ход, которого комментаторы совершенно не ожидали, и снова безупречно удержала небольшое преимущество в йосе.
- Ли Седоль после второй партии: «AlphaGo played a near perfect game».



# Матч с Ли Седолем

 Исход третьей партии решился в первой части игры: AlphaGo блестяще провела сложную тактическую борьбу (слабое место других программ) и точными ходами захватила преимущество.

• Счёт стал 3:0, матч был проигран, казалось, что победа

роботов будет абсолютной...



# МАТЧ С ЛИ СЕДОЛЕМ

• ...но в четвёртой партии уже Ли Седоль сделал несколько великолепных ходов, успешно использовал недочёты в игре AlphaGo и выиграл!



# Матч с Ли Седолем

• Пятая партия была отчасти экспериментальной, Ли Седоль попросил чёрный цвет (которым играть сложнее) и думал, что понимает, как обыграть AlphaGo... но, по своим собственным словам, пожадничал и проиграл.

· «The week with AlphaGo felt like a bamboo clapper».



## **ALPHAGO MASTER**

• В конце мая 2017 г. AlphaGo Master (новая версия) обыграла Ке Jie (#1 рейтинга), без шансов, 3:0...

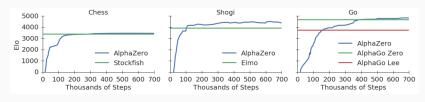


• ...и сейчас AlphaGo ушла из большого спорта, оставив небольшое, но очень важное наследие.

# AlphaZero

## ALPHAGO ZERO И ALPHAZERO

- Следующие супер-новости от DeepMind: AlphaGo Zero (Silver et al., 2017a) и особенно AlphaZero (Silver et al., 2017b).
- AlphaZero обучается без всяких данных, только играя сама с собой.
- · И обыгрывает AlphaGo в го, Stockfish в шахматы, Elmo в сёги...



Как это?

## ALPHAGO ZERO и ALPHAZERO

- Обычно шахматные программы (тот же Stockfish) основаны на функции оценки позиции и, главное, альфа-бета поиске с отсечениями.
- Альфа-бета поиск обычно работает на основе минимакса. Но AlphaZero действует по-другому:
  - обучается с подкреплением исключительно на играх против самой себя;
  - оценивает позиции глубокой нейронной сетью (о признаках потом);
  - использует MCTS-поиск, оценивая всего 80К позиций в секунду для шахмат (y Stockfish 70M);
  - вместо минимакса усредняет оценку по поддереву; интуиция: ошибки в оценке позиции при этом усредняются и "взаимно сокращаются", а при минимаксе самая большая ошибка пропагируется в корень.

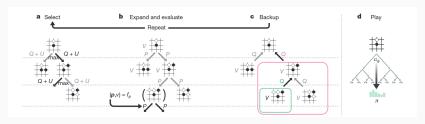
## ALPHAGO ZERO И ALPHAZERO

# • Признаки AlphaZero:

Go		Chess		Shogi	
Feature	Planes	Feature	Planes	Feature	Planes
P1 stone	1	P1 piece	6	P1 piece	14
P2 stone	1	P2 piece	6	P2 piece	14
		Repetitions	2	Repetitions	3
				P1 prisoner count	7
				P2 prisoner count	7
Colour	1	Colour	1	Colour	1
		Total move count	1	Total move count	1
		P1 castling	2		
		P2 castling	2		
		No-progress count	1		
Total	17	Total	119	Total	362

#### ALPHAGO ZERO и ALPHAZERO

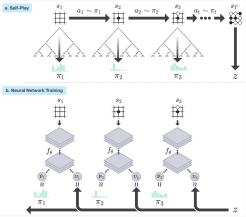
· Как мы делаем ход (картинка из AlphaGo Zero):



- · Сразу MCTS при обучении:
  - $\cdot$  оцениваем узлы по Q+U, где Q- среднее значение детей узла, U- добавка для оптимизма;
  - $\cdot$  дойдя до листа, оцениваем через сеть, записываем v в узел, создаём детей по распределению из сети p, больше для этой вершины сеть не запускаем.
- После такого цикла выбираем ход, где больше N, или с дополнительным exploration при обучении.

#### ALPHAGO ZERO и ALPHAZERO

· Обучение с подкреплением (картинка из AlphaGo Zero):



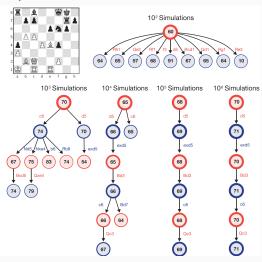
• Накапливаем опыт и минимизируем  $L=(z-v)^2+\pi^\top\log\mathbf{p}+c\|\theta\|^2, \text{ где }p-\text{ вероятности сети, }\pi-\text{ улучшенные через MCTS вероятности.}$ 

#### ALPHAGO ZERO И ALPHAZERO

- Более того, AlphaZero даже проще и прямолинейнее, чем AlphaGo Zero:
  - · AlphaGo Zero использовала симметрию го для аугментаций, а AlphaZero этого не делает;
  - AlphaGo Zero поддерживала текущего лучшего противника из предыдущих итераций, периодически его заменяя, а AlphaZero просто использует всегда текущую сеть;
  - свёрточная сеть хорошо приспособлена для го, а для шахмат/сёги интуитивно не очень, но на это тоже забили.
- И тем не менее, всё получилось очень хорошо.

#### ALPHAGO ZERO и ALPHAZERO

• Пример раздумий МСТS:



## ALPHAGO ZERO И ALPHAZERO

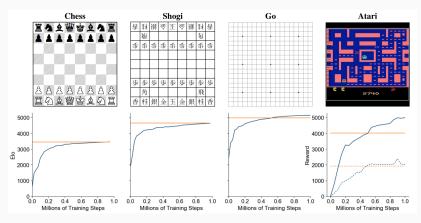
• И всё, да здравствует король!



• Но и это ещё не вся история...

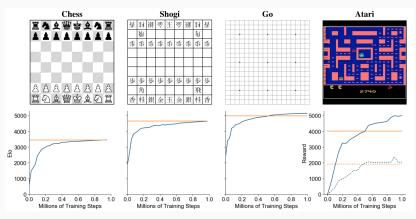


• В конце 2019 года появилась работа о MuZero, которая ещё лучше (Schrittwieser et al., 2019)!



• Как они смогли? Ключевое слово здесь...

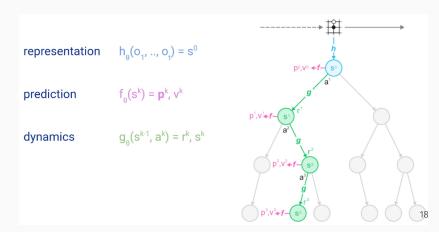
- ...планирование! Не зря мы его изучали.
- MuZero поддерживает модель динамики MDP, обучая её тоже по ходу дела



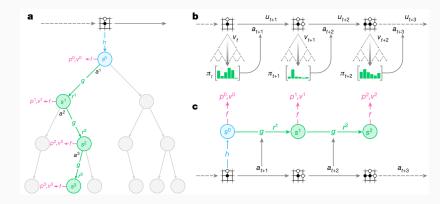
• Давайте посмотрим в подробностях...

- · MuZero предсказывает на каждом шаге t три вещи для каждого будущего шага  $k=1,\ldots,K$  на основе наблюдений  $o_1,\ldots,o_t$ :
  - стратегию  $\mathbf{p}_t^k pprox \pi\left(a_{t+k+1}|o_1,\dots,o_t,a_{t+1},\dots,a_{t+k}\right)$ ;
  - функцию  $v_t^k pprox \mathbb{E}\left[R_{t+k+1} + \gamma R_{t+k+2} + \dots \mid o_1,\dots,o_t,a_{t+1},\dots,a_{t+k}
    ight]$ ;
  - · награду  $r_t^k pprox R_{t+k}$ .

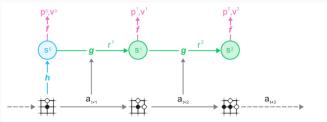
- Внутри это представлено тремя функциями:
  - $\cdot$  функция динамики процесса:  $r^k, s^k = g_{\theta}(s^{k-1}, a^k)$ , но здесь  $s^k$  не состояние среды, а внутреннее состояние модели;
  - $\cdot$  функция предсказания  $\mathbf{p}^k, v^k = f_{ heta}(s^k)$ , как в AlphaZero;
  - функция представления  $s^0 = h_{\theta}(o_1, \dots, o_t).$



• Когда есть такое представление, можно искать по гипотетическим будущим траекториям  $a^1, \dots, a^k$ .



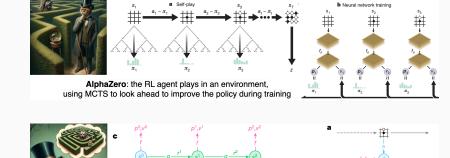
• При обучении разворачиваем на несколько шагов вперёд (чтобы динамику процесса тоже обучать) и используем или TD, или MC, сравнивая предсказанные и реальные значения, награды и действия



• Общая функция потерь

$$L_t(\theta) = \sum_{k=0}^K \left( L_r(u_{t+k}, r_t^k) + L_v(z_{t+k}, v_t^k) + L_p(\pi_{t+k}, \mathbf{p}_t^k) \right) + c \|\theta\|^2.$$

#### Итого:

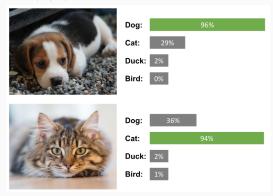


**MuZero**: the RL agent predicts future states by "dreaming" about possible transitions and bases its MCTS search on it

Порождающие и дискриминирующие модели в

машинном обучении

- Итак, мы уже видели глубокое обучение и с учителем, и без.
- Но можем ли мы породить что-то новое?
- · Модели бывают дискриминирующие (discriminative), которые моделируют  $p(y \mid \mathbf{x})$ :

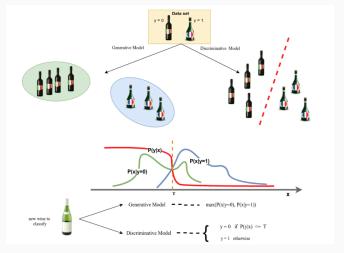


• А бывают порождающие (generative), которые моделируют  $p(\mathbf{x},y)$ , и из них тогда можно сэмплировать:

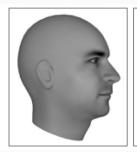


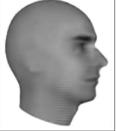
- Давайте чуть подробнее. Во-первых, зачем это надо?
- $p(\mathbf{x},y) = p(y \mid \mathbf{x})p(\mathbf{x})$ , конечно, но разница есть.

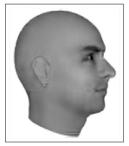
### • Иллюстрация:



- Порождающие модели:
  - проверяют, насколько мы поняли распределение;
  - могут обучаться с недостатком данных и без разметки semi-supervised learning (очень важно!);
  - могут обучаться мультимодальным выходам, когда есть несколько правильных ответов (см. ниже);
  - могут служить моделями окружающего мира в обучении с подкреплением (об этом позже);
  - ну и просто иногда действительно нужно именно порождать.







• Обычно порождающие модели максимизируют правдоподобие:

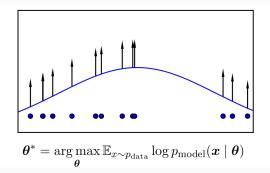
$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\max \prod_{\mathbf{x} \in D} p_{\text{model}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \arg\max \sum_{\mathbf{x} \in D} \log p_{\text{model}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}).$$

• Важный другой взгляд – это то же самое, что минимизировать KL между «распределением данных»  $p_{\mathrm{data}}$  и  $p_{\mathrm{model}}$ :

$$\theta^* = \arg\min \operatorname{KL}\left(p_{\text{data}} \| p_{\text{model}}\right) = \arg\min - \int p_{\text{data}}(x) \ln \frac{p_{\text{model}}(x)}{p_{\text{data}}(x)} \mathrm{d}x,$$

потому что  $p_{\mathrm{data}}$  для нас дано в ощущениях через D, и это всё равно что дискретное равномерное распределение.

· Иначе говоря, точки данных «тянут» вверх распределение  $p_{
m model}$ :



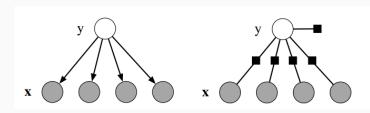
- Только в большой размерности и не просто с гауссианами всё куда сложнее...
- Большая разница в том, предполагаем ли мы, что можем явно определить и посчитать плотность  $p_{
  m model}$ .

- Давайте рассмотрим пару примеров, которые дают понимание разницы между порождающими и дискриминативными моделями.
- · Заодно расскажу вам, что такое CRF, всё польза. :)
- Неожиданный заход: в чём разница между наивным Байесом и логистической регрессией?..

• Наивный Байес – это порождающая модель:

$$p(y,\mathbf{x}) = p(y) \prod_{k=1}^K p(x_k \mid y).$$

• Предположение в том, что признаки независимы.



• В логистической регрессии предположение в том, что  $\log p(y\mid \mathbf{x})$  – это линейная функция от  $\mathbf{x}$ :

$$p(y\mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} e^{\theta_y + \sum_{k=1}^K \theta_{y,k} x_k},$$

где  $\theta$  – веса,  $\theta_y$  – свободный член (похож на p(y)),  $Z(\mathbf{x})$  – нормировочная константа.

• Можно, кстати, переписать в чуть более общем виде через признаки:

$$p(y \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} e^{\sum_{k=1}^{K} \theta_k f_k(y, \mathbf{x})},$$

где  $f_{k,j}(y,\mathbf{x})=[k=y]x_j$  для векторов весов признаков и  $f_k(y,\mathbf{x})=[k=y]$  для bias weights.

• Но из наивного Байеса тоже можно получить  $p(y\mid \mathbf{x})$ , ведь  $p(y,\mathbf{x})=p(\mathbf{x})p(y\mid \mathbf{x})...$ 

- Более того, действительно получится то же самое. У них одно и то же пространство гипотез, и одно можно перевести в другое:
  - если обучать наивного Байеса максимизировать условное правдоподобие, получится логистическая регрессия;
  - а если интерпретировать логистическую регрессию как порождающую модель с

$$p(y, \mathbf{x}) = \frac{\exp\left(\sum_{k=1}^K \theta_k f_k(y, \mathbf{x})\right)}{\sum_{y', \mathbf{x}'} \exp\left(\sum_{k=1}^K \theta_k f_k(y', \mathbf{x}')\right)},$$

то получится тот же классификатор, что из наивного Байеса.

• Наивный Байес и логистическая регрессия образуют generative-discriminative pair.

- Т.е. единственная разница в том, что наивный Байес порождающая модель, а логистическая регрессия дискриминативная.
- Если бы мы могли получить идеальную модель  $p^*(\mathbf{y},\mathbf{x})=p^*(\mathbf{y})p^*(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})$ , то не было бы никакой разницы.
- Но на практике есть разница, оценивать ли  $p(\mathbf{y})p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$ , а затем вычислять из этого  $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ , или сразу напрямую оценивать  $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ .
- Порождающие модели могут больше, но у дискриминативных больше свободы.

• Например, пусть есть порождающая модель с параметрами  $\theta$ :

$$p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta) = p_g(\mathbf{y}; \theta) p_g(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}; \theta).$$

- · Можно её переписать как  $p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta) = p_g(\mathbf{x}; \theta) p_g(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}; \theta)$ , где  $p_g(\mathbf{x}; \theta) = \sum_{\mathbf{y}} p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta)$ ,  $p_g(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}; \theta) = p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta) / p_g(\mathbf{x}; \theta)$ .
- · А соответствующая ей дискриминативная модель должна иметь априорное распределение  $p(\mathbf{x})$ , которое может получиться из неё, т.е.  $p(\mathbf{x}) = p_c(\mathbf{x}; \theta') = \sum_{\mathbf{y}} p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta')$ , и условное распределение, которое может получаться как  $p_c(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}; \theta) = p_g(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \theta)/p_g(\mathbf{x}; \theta)$ :

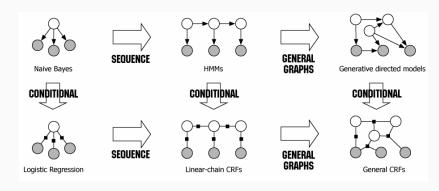
$$p_c(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = p_c(\mathbf{x}; \theta') p_c(\mathbf{y} \mid \mathbf{c}; \theta).$$

• Разница в том, что теперь не обязательно  $\theta = \theta'$ , и дискриминативная модель более выразительна.

- В результате мы будем хуже моделировать  $p(\mathbf{x})$  (на которое в классификации нам наплевать), и лучше подходить к  $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$  (но и риск оверфиттинга выше).
- Другой пример порождающей модели скрытая марковская модель: моделируем наблюдаемые  $X=\{x_t\}_{t=1}^T$ , предполагая, что есть скрытые состояния  $Y=\{y_t\}_{t=1}^T$ , и делаем предположения о независимости:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \prod_{t=1}^T p(y_t \mid y_{t-1}) p(x_t \mid y_t).$$

• Так вот, CRF – это дискриминативные модели, и линейная CRF – это дискриминативная модель, соответствующая HMM:



• Чтобы прийти к linear chain CRF, сначала перепишем HMM в другом виде:

$$\begin{split} p(\mathbf{y}, \mathbf{x}) &= \frac{1}{Z} \prod_{t=1}^T \exp \left( \sum_{i,j \in S} \theta_{i,j} [y_t = i] [y_{t-1} = j] + \right. \\ &\left. + \sum_{i \in S} \sum_{o \in O} \mu_{oi} [y_t = i] [x_t = o] \right), \end{split}$$

где S – множество скрытых состояний, O – множество наблюдаемых, а в терминах НММ

$$\begin{split} \theta_{ij} &= \log p(y_t = i \mid y_{t-1} = j), \\ \mu_{oi} &= \log p(x = o \mid y = i), \qquad Z = 1. \end{split}$$

• Более того, верно и обратное: если распределение раскладывается как выше написано, то это НММ.

· И здесь тоже, как в логистической регрессии, можно ввести функции признаков (feature functions)  $f_k(y_t,y_{t-1},x_t)$ :

$$f_{ij}(y,y',x)=[y=i][y'=j]$$
 для каждого перехода,  $f_{io}(y,y',x)=[y=i][x=o]$  для каждой наблюдаемой.

· И теперь (k бегает и по (i,j), и по (i,o))

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \prod_{t=1}^{T} \exp \left( \sum_{k=1}^{K} \theta_k f_k(y_t, y_{t-1}, x_t) \right).$$

 $\cdot$  Для выбранных  $f_k$  это в точности эквивалентно НММ.

• Можно теперь выразить условное распределение, и это уже будет linear chain CRF:

$$p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{\prod_{t=1}^{T} \exp\left(\sum_{k=1}^{K} \theta_k f_k(y_t, y_{t-1}, x_t)\right)}{\sum_{\mathbf{y}'} \prod_{t=1}^{T} \exp\left(\sum_{k=1}^{K} \theta_k f_k(y_t', y_{t-1}', x_t)\right)}.$$

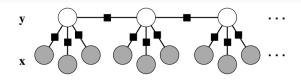
· В общем виде linear chain CRF именно так и определяется:

$$p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} \prod_{t=1}^{T} \exp\left(\sum_{k=1}^{K} \theta_{k} f_{k}(y_{t}, y_{t-1}, \mathbf{x}_{t})\right),$$

т.е. просто разрешим общий вид признаков и, может быть, несколько компонент у  $\mathbf{x}_t$ .

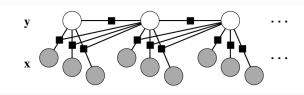
· Linear chain CRF:

$$p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} {\prod_{t=1}^T \exp\left(\sum_{k=1}^K \theta_k f_k(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t)\right)}.$$

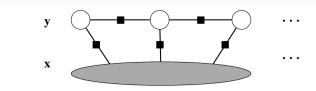


- Разложение  $p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x})=\frac{1}{Z(\mathbf{x})}\prod_{t=1}^T\Psi_t(y_t,y_{t-1},\mathbf{x}_t),$  со специальным видом  $\Psi_t.$
- $\cdot$  Задача оценить параметры heta из данных.
- Часто в NLP применяется: частеречная разметка, named entity recognition и т.п.

• Более общий случай, чем НММ; например, признак перехода может зависеть от наблюдаемой, просто добавим  $f = [y_t = j][y_{t-1} = i][x_t = o]$ :

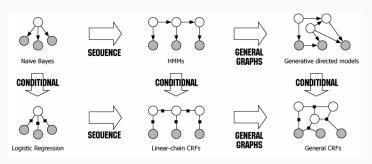


• А может зависеть от всех наблюдений сразу,  $f_k(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x})$ :



• А совсем общая CRF – это модель, в которой условное распределение  $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$  раскладывается по какому-то графу, не обязательно цепи:

$$p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} {\prod_{a=1}^A \Psi_a(\mathbf{y}_a, \mathbf{x}_a)}.$$



• В чём отличие от просто общей формы ненаправленной модели?..

- О форме факторов:
  - · обычно мы обучаем CRF с линейными весами:  $\log \Psi_a(\mathbf{y}_a,\mathbf{x}_a) = \exp\left(\sum_{k=1}^{K(A)} \theta_{ak} f_{ak}(\mathbf{y}_a,\mathbf{x}_a)\right)\!,$  у каждого фактора свои веса;
  - если  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{y}$  дискретные, то это вообще не ограничивает общности (возьмём  $f_{ak}$  по всем комбинациям);
  - часто параметры так или иначе связаны; например, в линейной цепи мы считаем, что  $\Psi_t(y_t,y_{t-1},\mathbf{x}_t)$  одинаковые по всем t;
  - · можно определить clique templates для этого:

$$p(\mathbf{y}\mid\mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} \prod_{C_p \in C} \prod_{\Psi_c \in C_p} \Psi_c(\mathbf{y}_c,\mathbf{x}_c;\theta_p), \; \mathrm{где}$$

$$\Psi_c(\mathbf{y}_c, \mathbf{x}_c; \boldsymbol{\theta}_p) = \exp\left(\sum_{k=1}^{K(p)} \theta_{pk} f_{pk}(\mathbf{x}_c, \mathbf{y}_c)\right);$$

• есть много расширений и вариантов с разными формами parameter tying.

- О признаках:
  - для дискретных наблюдаемых часто имеют смысл label-observation features:

$$f_{pk}(\mathbf{y}_c,\mathbf{x}_c) = [\mathbf{y}_c = \mathbf{y}_c']q_{pk}(\mathbf{x}_c);$$

этот признак не ноль только для конкретной конфигурации  $\mathbf{y}_c'$ , но для неё может быть любым; observation functions  $q_{pk}(\mathbf{x}_c)$  – например, «слово  $x_t$  начинается с большой буквы»;

· unsupported features: бывает, что признаки вообще не встречаются в данных, особенно когда их очень много (миллионы); например, « $x_t=$  "если" и  $y_t=$  "СІТҮNAME"»; но они всё равно могут быть полезны, если дают отрицательный вес неподходящему ответу;

#### • О признаках:

- edge-observation features: когда фактор перехода зависит от всех функций наблюдения: « $x_t=$  "Новый" и  $y_t=$  "СІТҮNАМЕ" и  $y_{t-1}=$  "СІТҮNАМЕ"»;
- $\cdot$  если это слишком много, можно заменить на node-observation features: отдельно « $x_t=$  "Новый" и  $y_t=$  "СІТҮNAME"», отдельно « $y_t=$  "СІТҮNAME" и  $y_{t-1}=$  "СІТҮNAME"»;

#### Edge-observation features:

$$\begin{split} f(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= q_m(\mathbf{x}_t) \mathbf{1}_{\{y_t = y\}} \mathbf{1}_{\{y_{t-1} = y'\}} & \forall y, y' \in \mathcal{Y}, \forall m \\ f(y_t, \mathbf{x}_t) &= q_m(\mathbf{x}_t) \mathbf{1}_{\{\mathbf{y}_t = y\}} & \forall y \in \mathcal{Y}, \forall m \end{split}$$

#### Node-observation features:

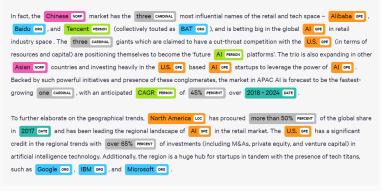
$$\begin{split} f(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= \mathbf{1}_{\{y_t = y\}} \mathbf{1}_{\left\{y_{t-1} = y'\right\}} & \forall y, y' \in \mathcal{Y} \\ f(y_t, \mathbf{x}_t) &= q_m(\mathbf{x}_t) \mathbf{1}_{\{y_t = y\}} & \forall y \in \mathcal{Y}, \forall m \end{split}$$

### Линейные CRF

### • О признаках:

- отдельные метки START/STOP для первых/последних элементов последовательности.
- $\cdot$  важно не забывать, что в  $f(y_t,y_{t-1},\mathbf{x}_t)$  среди  $\mathbf{x}_t$  могут быть разные x: « $x_{t+2}=$  "Уэльс" и  $y_t=$  "STATENAME"» (если есть такая фича, это, видимо, не Англия);
- · можно использовать менее общие признаки как регуляризатор (backoff): например, полезно включать и  $\Psi_t(y_t,y_{t-1},\mathbf{x}_t)$ , и  $\Psi_t(y_t,\mathbf{x}_t)$ , хотя формально уже вторые не нужны;
- можно добавлять как признаки результаты других моделей (более простых, или обученных на других датасетах и т.п.);
- $\cdot$  input-dependent structure: можно разрешать структуре графа зависеть от  $\mathbf{x}$ ; например, можно поощрять, чтобы одно и то же слово имело одну и ту же метку.

Пример – named entity recognition (NER):



• Например, датасет CoNLL2003 – люди (PER), организации (ORG), места (LOC), другие (MISC), и никаких (O). Девять видов меток:

 $\mathcal{Y} = \{B\text{-Per}, I\text{-PER}, B\text{-Loc}, I\text{-Loc}, B\text{-Org}, I\text{-Org}, B\text{-Misc}, I\text{-Misc}, O\}$ 

• Можно построить модель так:

t	$y_t$	$\mathbf{x}_t$
0	B-ORG	U.N.
1	O	official
2	$\operatorname{B-PER}$	Ekeus
3	O	heads
4	O	$\mathbf{for}$
5	B-LOC	Baghdac

· И ввести признаки label-label и label-word:

$$\begin{split} f_{ij}^{LL}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i][y_{t-1} = j], \\ f_{iv}^{LW}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i][\mathbf{x}_t = v]. \end{split}$$

• Всего 81 label-label и  $9 \times 21249 = 191241$  label-word (в CoNLL2003), но большая часть бесполезны, конечно.

• Но в реальности надо добавить выразительности:

$\overline{t}$	$y_t$	$\mathbf{x}_t$
0	B-ORG	((START), U.N., official)
1	O	(U.N., official, Ekeus)
2	B-PER	(official, Ekeus, heads)
3	O	(Ekeus, heads, for)
4	O	(heads, for, Baghdad)
5	B-LOC	(for, Baghdad, $\langle END \rangle$ )

• Три вида label-word теперь, и ещё label-observation можно добавить:

$$\begin{split} f_{iv}^{LW0}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i][\mathbf{x}_{t0} = v], \\ f_{iv}^{LW1}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i][\mathbf{x}_{t1} = v], \\ f_{iv}^{LW2}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i][\mathbf{x}_{t2} = v], \\ f_{ib}^{LO}(y_t, y_{t-1}, \mathbf{x}_t) &= [y_t = i]q_b(\mathbf{x}_t). \end{split}$$

## ПРИМЕРЫ

• Например, в (McCallum, Li, 2003):

W=v	$w_t = v$	$\forall v \in \mathcal{V}$
T=j	part-of-speech tag for $w_t$ is $j$ (as determined by an	$\forall POS \text{ tags } j$
	automatic tagger)	
P=I-j	$w_t$ is part of a phrase with syntactic type $j$ (as	
	determined by an automatic chunker)	
Capitalized	$w_t$ matches [A-Z][a-z]+	
Allcaps	$w_t$ matches [A-Z][A-Z]+	
EndsInDot	$w_t$ matches [^\.]+.*\.	
	$w_t$ contains a dash	
	$w_t$ matches [A-Z]+[a-z]+[A-Z]+[a-z]	
Acro	$w_t$ matches [A-Z] [A-Z\\.]*\\.[A-Z\\.]*	
Stopword	$w_t$ appears in a hand-built list of stop words	
CountryCapital	$w_t$ appears in list of capitals of countries	
:	many other lexicons and regular expressions	
$q_k(\mathbf{x}, t + \delta)$ for a	ll $k$ and $\delta \in [-1,1]$	

## ПРИМЕРЫ

· Например, в (McCallum, Li, 2003):

t	$y_t$	Active observation functions
1	B-ORG	P=I-NP@1 W=(START)@-1 INITCAP P=I-NP T=NNP T=NN@1 ACRO ENDSINDOT W=official@1 W=U.N.
2	O	P=I-NP@1 INITCAP@1 P=I-NP T=JJ@1 CAPITALIZED@1 T=NNP@-1 P=I-NP@-1 INITCAP@-1 T=NN ENDSINDOT@-1 ACRO@-1 W=official W=U.N.@-1W=Ekeus@1
3	B-PER	P=I-NP@1 INITCAP P=I-NP P=I-NP@-1 CAPITALIZED T=JJ T=NN@-1 T=NNS@1 W=official@-1 W=heads@1 W=Ekeus
4	O	P=I-NP P=I-NP@-1 INITCAP@-1 STOPWORD@1 T=JJ@-1 CAPITALIZED@-1 T=IN@1 P=I-PP@1 T=NNS W=for@1 W=heads W=Ekeus@-1
5	O	T=NNP@1 P=I-NP@1 INITCAP@1 LOC@1 CAPITALIZED@1 P=I-NP@-1 STOPWORD COUNTRYCAPITAL@1 P=I-PP T=IN T=NNS@-1 W=for W=Baghdad@1 W=heads@-1
6	B-LOC	INITCAP P=I-NP T=NNP CAPITALIZED STOPWORD@-1 T=.@1 P=O@1 PUNC@1 W=⟨END⟩@1 COUNTRYCAPITAL T=IN@-1 P=I-PP@-1 W=for@-1 W=Baghdad

- Теперь к нашему основному примеру сегментации, т.е. разметке картинки на семантические части.
- Формально  $\mathbf{x}=(x_1,\dots,x_T)$ , картинка размера  $\sqrt{T}\times\sqrt{T}$ . Предсказываем  $\mathbf{y}=(y_1,\dots,y_T)$ , сегментацию.
- · Куча признаков в классическом СV:
  - гистограммы интенсивностей пикселей, например в окрестности  $5\times 5;$
  - градиенты картинки;
  - texton-признаки, SIFT-признаки и т.п. (может быть, позже).
- Как их всех в CRF добавить?

### ПРИМЕРЫ

• Базовая идея – по-прежнему MRF:

$$p(\mathbf{y}) = \frac{1}{Z} \prod_{(i,j) \in N} \Psi(y_i, y_j), \quad p(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = p(\mathbf{y}) \prod_{i=1}^T p(x_i \mid y_i).$$

- Но трудно добавить признаки по подмножествам пикселей с предыдущего слайда, потому что  $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{y})$  получается сложная.
- A в CRF всё с этим проще: мы разрешаем факторам зависеть от произвольных признаков (observation functions) всей картинки.

• Например, пусть  $q(x_i)$  – вектор признаков участка вокруг  $x_i$ ,  $\nu(x_i,x_j)$  – признаки пары участков (их похожесть-непохожесть), например набор элементов матрицы  $q(x_i)q(x_j)^{\sf T}$ , и из них определяем CRF с такими observation functions:

$$f_{m}(y_{i}, x_{i}) = \mathbf{1}_{\{y_{i} = m\}} q(x_{i}) \quad \forall m \in \{0, 1\}$$

$$g_{m,m'}(y_{i}, y_{j}, x_{i}, x_{j}) = \mathbf{1}_{\{y_{i} = m\}} \mathbf{1}_{\{y_{j} = m'\}} \nu(x_{i}, x_{j}) \quad \forall m, m' \in \{0, 1\}$$

$$f(y_{i}, x_{i}) = \begin{pmatrix} f_{0}(y_{i}, x_{i}) \\ f_{1}(y_{i}, x_{i}) \end{pmatrix}$$

$$g(y_{i}, y_{j}, x_{i}, x_{j}) = \begin{pmatrix} g_{00}(y_{i}, y_{j}, x_{i}, x_{j}) \\ g_{01}(y_{i}, y_{j}, x_{i}, x_{j}) \\ g_{10}(y_{i}, y_{j}, x_{i}, x_{j}) \end{pmatrix}$$

• Конкретный пример функций:

$$\begin{split} \nu(x_i,x_j) &= \exp\left(-\beta (x_i-x_j)^2\right),\\ g(y_i,y_j,x_i,x_j) &= \left[y_i \neq y_j\right] \nu(x_i,x_j). \end{split}$$

· И получаем CRF

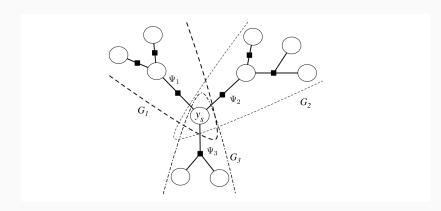
$$p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{Z(\mathbf{x})} \exp \left( \sum_{i=1}^T \boldsymbol{\theta}^\top f(y_i, x_i) + \alpha \sum_{(i,j) \in N} \boldsymbol{\lambda}^\top g(y_i, y_j, x_i, x_j) \right),$$

где lpha, heta,  $\lambda$  – параметры.

• Теперь встаёт вопрос: а как эту всю красоту обучить-то?

- Вывод в CRF состоит из двух похожих задач:
  - · применить CRF, т.е. найти метки  $\mathbf{y}^* = \arg \max_{\mathbf{v}} p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x})$ ;
  - · чтобы оценить параметры, надо найти маргиналы  $p(y_t \mid \mathbf{x})$  и  $p(y_t, y_{t-1} \mid \mathbf{x})$  (потом увидим почему).
- Всё это чертовски напоминает HMM для linear chain CRF и просто вывод в графических моделях для CRF общего вида.

- . Linear chain CRF те же forward-backward, Viterbi,  $\alpha_t(j)$ ,  $\beta_t(j)$ ,  $\gamma_t(j)$ ...
- В общем виде тот же belief propagation



- А когда так не получается, те же MCMC-методы, вариационные приближения...
- · Но с CRF надо иметь в виду, что:
  - есть обычно большая разреженность в признаках и значениях факторов, которую надо бы использовать;
  - второе замечание как справиться с underflow при выводе? можно считать в логарифмах:

$$\log \alpha_t(j) = \bigoplus_{i \in S} \left(\log \Psi_t(j,i,\mathbf{x}_t) + \log \alpha_{t-1}(i)\right),$$

но разве это проще? вроде бы при подсчёте  $a\oplus b=\log(e^a+e^b)$  всё равно тот же underflow? hint: нет.

- · А как оценивать параметры CRF  $\theta = \{\theta_k\}_{k=1}^K$ ?
- Максимальное правдоподобие: по данным  $D = \{\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}\}_{i=1}^N$  надо максимизировать условное правдоподобие

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log p(\mathbf{y}^{(i)} \mid \mathbf{x}^{(i)}; \theta).$$

· Для linear chain CRF, например,

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} \sum_{k=1}^{K} \theta_k f_k(y_t^{(i)}, y_{t-1}^{(i)}, \mathbf{x}_t^{(i)}) - \sum_{i=1}^{N} \log Z(\mathbf{x}^{(i)}).$$

- · Можно ещё добавить регуляризацию,  $L_2$  или  $L_1$  на heta.
- Как максимизировать?

• Возьмём производную:

$$\begin{split} \frac{\partial \ell}{\partial \theta_k} &= \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T f_k(y_t^{(i)}, y_{t-1}^{(i)}, \mathbf{x}_t^{(i)}) - \\ &- \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T \sum_{y,y'} f_k(y,y', \mathbf{x}_t^{(i)}) p(y,y' \mid \mathbf{x}^{(i)}) - \frac{\partial \Omega}{\partial \theta_k}. \end{split}$$

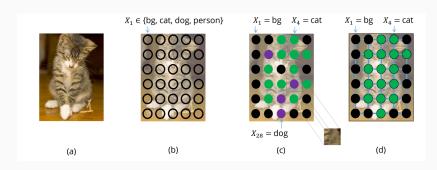
- Первое слагаемое ожидание  $f_k$  в эмпирическом распределении  $p_d(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[ \mathbf{y} = \mathbf{y}^{(i)} \right] \left[ \mathbf{x} = \mathbf{x}^{(i)} \right].$
- Второе слагаемое ожидание  $f_k$  в распределении модели  $p(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}; \theta) p_d(\mathbf{x}).$
- Если найдём максимум, они совпадут приятное свойство.
- Ещё приятно, что  $\ell(\theta)$  вогнута, т.к.  $g(\mathbf{x}) = \log \sum_i \exp x_i$  выпуклые функции; если ещё добавить строго выпуклый регуляризатор вроде  $L_2$ , у  $\ell$  будет единственный глобальный оптимум.

- Можно применять стандартные алгоритмы: метод Ньютона, его ускоренную версию L-BFGS...
- · И для CRF общего вида то же самое на самом деле:

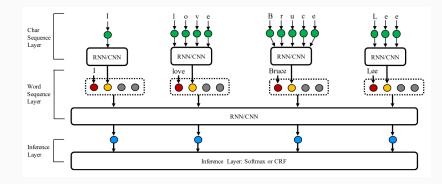
$$\ell(\theta) = \sum_{C_p \in C} \sum_{\Psi_c \in C_p} \sum_{k=1}^{K(p)} \theta_{pk} f_{pk}(\mathbf{x}_c, \mathbf{y}_c) - \log Z(\mathbf{x}).$$

- Тоже всё вогнутое, можно использовать методы второго порядка.
- Но проблема: для каждого шага надо считать  $p(y,y'\mid \mathbf{x}^{(i)})$ , т.е. делать вывод в СRF для каждого тренировочного примера.
- Если так не получается, то надо делать стохастический градиентный подъём.

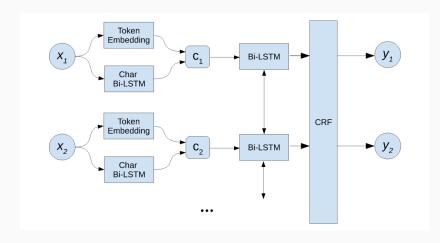
- И теперь можно пытаться вставлять в CRF признаки из глубоких сетей.
- Например, предскажем метку каждого пикселя классификатором (на основе всей картинки или близлежащей части), а потом вставим в CRF:



 Или вот NER – там RNN+CRF архитектуры до сих пор актуальны, в том числе в архитектурах вида «учитель-ученик», чтобы трансформеры не гонять:



· Вот, например, как NER от DeepPavlov работал (Anh et al., 2017):



- Structured prediction: более общий контекст, когда мы пытаемся сделать структурированные предсказания.
- CRF один вид, бывают ещё structured SVM, например, которые вообще не очень вероятностные.
- Одна из тех моделей, которые долго оставались актуальными после прихода DL.

# Спасибо за внимание!



