ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ II: ПРИМЕРЫ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург
11 апреля 2018 г.

Random facts:

- 10 апреля в США — день памяти коммодора Перри, который при помощи нескольких военных экспедиций сумел убедить японцев начать торговать с западными странами
- 10 апреля 1912 г. из Саутгемптона отплыл «Титаник»
- 10 апреля 1995 г. Минюст РФ зарегистрировал Партию любителей пива под руководством историка Константина Калачёва

Байесовский вывод для гауссиана

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Вспомним, как делать байесовский вывод для нормального распределения:

$$p(x_1, \dots, x_n \mid \mu, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (x_i - \mu)^2\right).$$

- Хотим: найти сопряжённое априорное распределение, подсчитать правдоподобие, решить задачу предсказания.
- Для начала зафиксируем σ^2 и будем в качестве параметра рассматривать только μ.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Сопряжённое априорное распределение для μ при фиксированном σ^2 тоже нормальное и выглядит как

$$p(\mu \mid \mu_0, \sigma_0^2) \propto \frac{1}{\sigma_0^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\mu - \mu_0)^2\right).$$

- Обычно выбирают $\mu_0 = 0$, $\sigma_0^2 \to \infty$ (порой буквально).
- Давайте рассмотрим сначала случай ровно одного наблюдения x и найдём $p(\mu \mid x)$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- При нашем априорном распределении у μ и x совместное нормальное распределение:

$$x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

Упражнение. Пусть (z_1, z_2) – случайные величины с совместным нормальным распределением. Докажите, что случайная величина $z_1 \mid z_2$ распределена нормально с параметрами

$$E(z_1 \mid z_2) = E(z_1) + \frac{Cov(z_1, z_2)}{Var(z_2)}\left(z_2 - E(z_2)\right),$$

$$Var(z_1 \mid z_2) = Var(z_1) - \frac{Cov^2(z_1, z_2)}{Var(z_2)}$$

$(Var(x) = E\left[(x - Ex)^2\right], Cov(x, y) = E\left[(x - Ex)(y - Ey)\right])$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- В нашем случае:

$$
\begin{aligned}
x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0,1),\\
E(x) = \mu_0,\\
Var(x) = E(Var(x \mid \mu)) + Var(E(x \mid \mu)) = \sigma^2 + \sigma_0^2,\\
Cov(x, \mu) = E\left[(x - \mu_0)(\mu - \mu_0)\right] = \sigma_0^2.
\end{aligned}
$$

- Применив упражнение, получаем:

$$
\begin{aligned}
E(\mu \mid x) = \mu_0 + \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}(x - \mu_0) = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0,\\
Var(\mu \mid x) = \frac{\sigma^2\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}}.
\end{aligned}
$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Итого:

$$p(\mu \mid x) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}\right)^{-1}\right).$$

- Опять же, сложные вычисления можно забыть и пользоваться этими формулами.
- Замечание: часто используют $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ как параметр нормального распределения (precision). Тогда

$$\tau_{\mu|x} = \tau_\mu + \tau.$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- А что, если данных больше, $x_1, \dots, x_n$?
- Тогда можно повторить всё то же самое, а можно заметить, что набор данных описывается своим средним.

Упражнение. Докажите, что если $p(x_i \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ и x_i независимы, то $p(\bar{x} \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Для апостериорной вероятности будет

$$p(\mu \mid x_1, \dots, x_n) \propto p(x_1, \dots, x_n \mid \mu) p(\mu) \propto p(\bar{x} \mid \mu) p(\mu) \propto p(\mu \mid \bar{x}).$$

- Подставляя в наш предыдущий результат, получим:

$$p(\mu \mid x_1, \dots, x_n) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} x + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2} \right)^{-1} \right).$$

Нормальное распределение: фиксируем μ

- Если зафиксировать μ и менять σ^2, то сопряжённым априорным распределением будет обратное гамма-распределение:

$$p(\sigma^2 \mid \alpha, \beta) \propto IG(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} z^{-\alpha-1} \exp\left(\frac{-\beta}{z}\right).$$

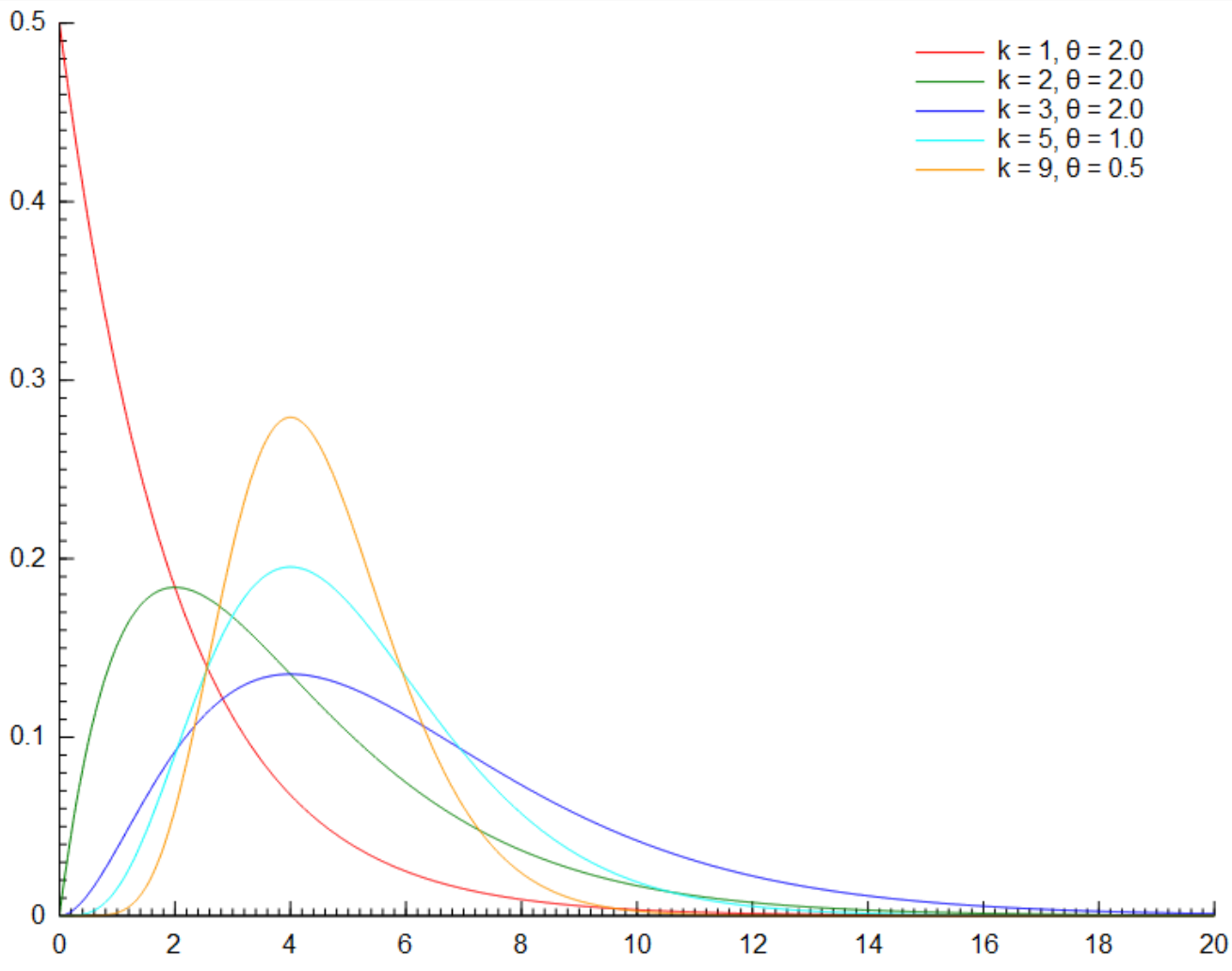
- Тогда в апостериорном распределении будет

$$p(\sigma^2 \mid x_1, \dots, x_n, \alpha, \beta) \propto IG\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum(x_i - \mu)\right).$$

- А в терминах $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ будет обычное гамма-распределение:

$$p(\tau \mid x_1, \dots, x_n, \alpha, \beta) \propto \text{Gamma}\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum(x_i - \mu)\right).$$

Гамма--распределение



Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?
- Потому что μ и σ^2 зависимы. :) Новая точка x вводит зависимость между ними.

Когда и μ, и σ^2 меняются

- А настоящее сопряжённое априорное распределение – это

$$
\begin{aligned}
p(\mu, \tau) &= p(\mu \mid \tau) p(\tau), \\
p(\mu \mid \tau) &= \mathcal{N}(\mu \mid \mu_0, (\lambda_0 \tau)^{-1}), \\
p(\tau) &= \text{Gamma}(\tau \mid a_0, b_0).
\end{aligned}
$$

- В результате байесовского вывода получается распределение Стьюдента (непростое упражнение): `http://www.cs.ubc.ca/~murphyk/Papers/bayesGauss.pdf`

Экспоненциальное семейство

- Вообще говоря, всё, о чём мы говорили – частные случаи *экспоненциального семейства* распределений:

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = h(\mathbf{x})g(\eta)e^{\eta^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}.$$

- η называются *естественными параметрами* (natural parameters).

Экспоненциальное семейство

- Например, распределение Бернулли:

$$p(x \mid \mu) = \mu^x (1-\mu)^{1-x} = e^{x \ln \mu + (1-x)\ln(1-\mu)} = \\ = (1-\mu) e^{\ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right) x},$$

и естественный параметр получился $\eta = \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$:

$$p(x \mid \eta) = \sigma(-\eta) e^{-\eta x},$$

где $\sigma(y) = \frac{1}{1+e^{-y}}$ – *сигмоид-функция*.

Экспоненциальное семейство

- Для мультиномиального распределения с параметрами $\mu_1, \ldots, \mu_{M-1}$ получаются

$$\eta_k = \ln\left(\frac{\mu_k}{1 - \sum_j \mu_j}\right) \quad \text{и}$$

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = \left(1 + \sum_{k=1}^{M-1} e^{\eta_k}\right)^{-1} e^{\eta^\top \mathbf{x}}.$$

Упражнение. Проверьте!

Экспоненциальное семейство

- Так вот, для распределений из экспоненциального семейства

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = h(\mathbf{x})g(\eta)e^{\eta^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}$$

можно сразу оптом найти сопряжённые априорные распределения:

$$p(\eta \mid \chi, \nu) = f(\chi, \nu)g(\eta)^\nu e^{\nu\eta^\top \chi},$$

где χ – гиперпараметры, а g то же самое, что в исходном распределении.

Упражнение. Проверьте это и получите вышеописанные примеры как частные случаи.

Вариационное приближение для гауссиана

Одномерный гауссиан

- И ещё пример: давайте найдём параметры одномерного гауссиана по точкам $\mathbf{X} = \{x_1, \dots, x_N\}$. Правдоподобие:

$$p(\mathbf{X} \mid \mu, \tau) = \left(\frac{\tau}{2\pi}\right)^{N/2} e^{-\frac{\tau}{2}\sum_{n=1}^{N}(x_n-\mu)^2}.$$

- Вводим сопряжённые априорные распределения:

$$p(\mu \mid \tau) = \mathcal{N}(\mu \mid \mu_0, (\lambda_0\tau)^{-1}),$$
$$p(\tau) = \mathrm{Gamma}(\tau \mid a_0, b_0).$$

- Мы это только что подсчитали точно, но давайте приблизим теперь апостериорное распределение как

$$q(\mu, \tau) = q_\mu(\mu) q_\tau(\tau).$$

- На самом деле так не раскладывается!
- Это то, что мы делали для $q(\mathbf{Z}) = \prod_{i=1}^{M} q_i(\mathbf{Z}_i)$. Посчитаем...

Одномерный гауссиан

- ...$q_\mu(\mu)$ – гауссиан с параметрами

$$\mu_N = \frac{\lambda_0\mu_0 + N\bar{x}}{\lambda_0 + N}, \quad \lambda_N = (\lambda_0 + N)\mathrm{E}[\tau].$$

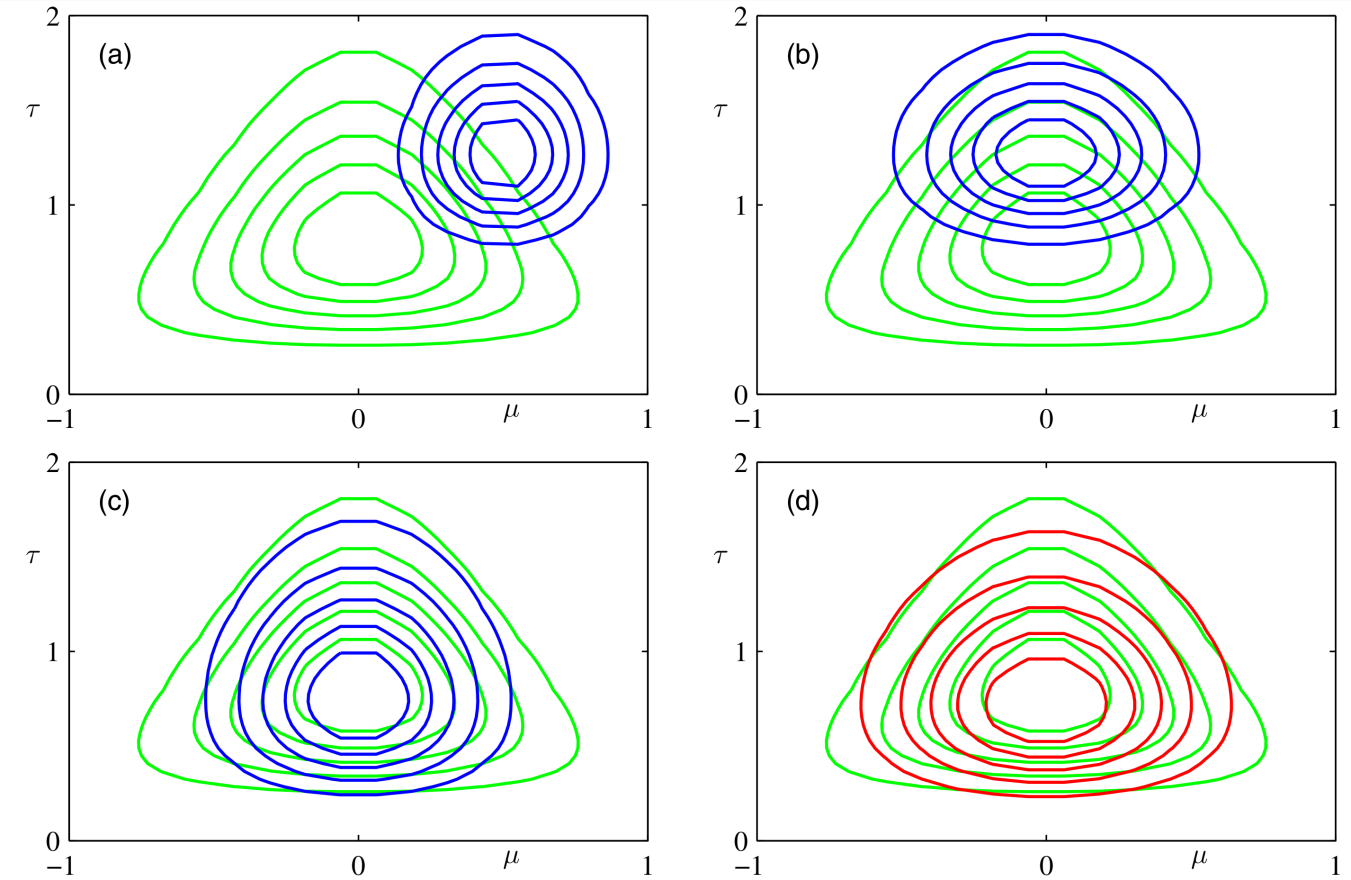
- А $q_\tau(\tau)$ – гамма-распределение с параметрами

$$a_N = a_0 + \frac{N}{2}, \quad b_N = b_0 + \frac{1}{2}\mathrm{E}_\mu\left[\sum_n (x_n - \mu)^2 + \lambda_0(\mu - \mu_0)^2\right].$$

- Всё получилось как надо, но без предположений о форме q_τ и q_μ.

Одномерный гауссиан

- Вот такой вывод в пространстве (μ, τ):



- А для $\mu_0 = a_0 = b_0 = \lambda_0 = 0$ (non-informative priors) можно и точно посчитать...

Одномерный гауссиан

- Получатся моменты для μ

$$\mathrm{E}[\mu] = \bar{x}, \quad \mathrm{E}[\mu^2] = \bar{x}^2 + \frac{1}{N\mathrm{E}[\tau]}.$$

- Это можно подставить и найти $\mathrm{E}[\tau]$:

$$\frac{1}{\mathrm{E}[\tau]} = \frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \bar{x})^2.$$

- Автоматически получили несмещённую оценку дисперсии!

Вариационное приближение для смеси гауссианов

Смесь гауссианов

- Смесь гауссианов: $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, $\mathbf{Z} = \{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n\}$,

$$p(\mathbf{Z} \mid \pi) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{z_{nk}},$$

$$p(\mathbf{X} \mid \mathbf{Z}, \mu, \Lambda) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}\left(\mathbf{x}_n \mid \mu_k, \Lambda_k^{-1}\right).$$

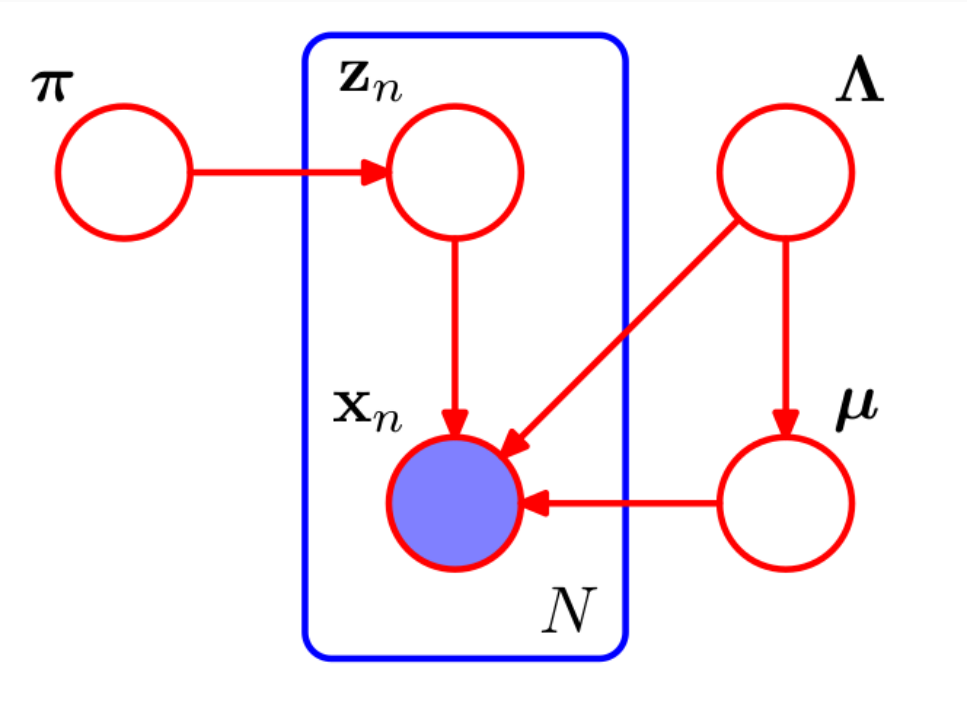
- Выберем сопряжённые априорные распределения:

$$p(\pi) = \mathrm{Dir}(\pi \mid \alpha_0) = C(\alpha_0) \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{\alpha_0 - 1},$$

$$\begin{aligned} p(\mu, \Lambda) &= p(\mu \mid \Lambda) p(\Lambda) \\ &= \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}\left(\mu_k \mid \mathbf{m}_0, (\beta_0 \Lambda_k)^{-1}\right) \mathcal{W}(\Lambda_k \mid \mathbf{W}_0, \nu_0). \end{aligned}$$

Смесь гауссианов

- Вот такая графическая модель:



- Распределение Дирихле пусть будет симметричное для простоты; часто ещё $\mathbf{m}_0 = 0$.
- Заметьте разницу между латентными переменными и параметрами модели.

Вариационное приближение

- Теперь вариационное приближение. Сначала сама факторизация:

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \pi, \mu, \Lambda) = p(\mathbf{X} \mid \mathbf{Z}, \mu, \Lambda)p(\mathbf{Z} \mid \pi)p(\pi)p(\mu \mid \Lambda)p(\Lambda).$$

- Мы наблюдаем только $\mathbf{X}$, остальное всё надо как-то оценить.
- Интересно, что единственное предположение про наше вариационное приближение выглядит так:

$$q(\mathbf{Z}, \pi, \mu, \Lambda) = q(\mathbf{Z})q(\pi, \mu, \Lambda).$$

- И всё! Дальше всё само собой получится. Но не сразу...

Вариационное приближение

- Сначала $q^*(\mathbf{Z})$:

$$\begin{aligned}\ln q^*(\mathbf{Z}) &= \mathrm{E}_{\pi,\mu,\Lambda}\left[\ln p(\mathbf{X},\mathbf{Z},\pi,\mu,\Lambda)\right] + \text{const} \\ &= \mathrm{E}_{\pi,\mu,\Lambda}\left[\ln p(\mathbf{Z}\mid\pi)\right] + \mathrm{E}_{\mu,\Lambda}\left[\ln p(\mathbf{X}\mid\mathbf{Z},\mu,\Lambda)\right] + \text{const} \\ &= \ldots = \sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} z_{nk}\ln\rho_{nk} + \text{const},\end{aligned}$$

$$\text{где } \ln\rho_{nk} = \mathrm{E}[\ln\pi_k] + \frac{1}{2}\mathrm{E}[\ln|\Lambda_k|] - \frac{D}{2}\ln(2\pi) - \\ - \frac{1}{2}\mathrm{E}_{\mu_k,\Lambda_k}\left[(\mathbf{x}_n-\mu_k)^\top\Lambda_k(\mathbf{x}_n-\mu_k)\right].$$

- Нормируем:

$$q^*(\mathbf{Z}) = \prod_{n=1}^{N}\prod_{k=1}^{K} r_{nk}^{z_{nk}}, \text{ где } r_{nk} = \frac{\rho_{nk}}{\sum_{j=1}^{K}\rho_{nj}}.$$

Вариационное приближение

- Теперь $\mathrm{E}[z_{nk}] = r_{nk}$, т.е. r_{nk} – то, насколько точка $\mathbf{x}_n$ принадлежит кластеру k.
- Можно определить статистики с их учётом, как обычно:

$$N_k = \sum_{n=1}^{N} r_{nk},$$

$$\bar{\mathbf{x}}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} r_{nk} \mathbf{x}_n,$$

$$\mathbf{S}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^{N} r_{nk} (\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}_k)(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}_k)^\top.$$

- То же самое происходило и в EM-алгоритме.

Вариационное приближение

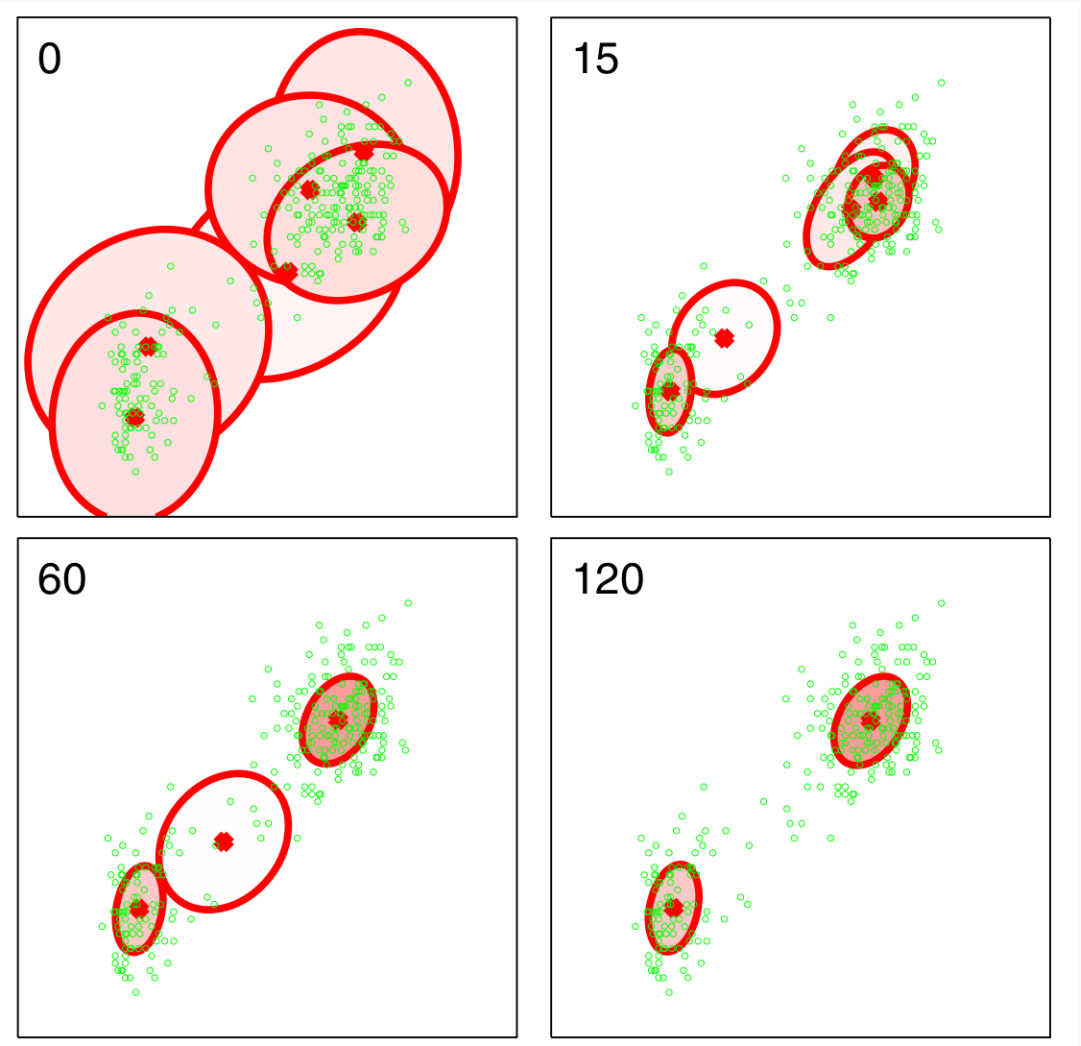
- Теперь $q^*(\pi, \mu, \Lambda)$:

$$\ln q^*(\pi, \mu, \Lambda) = \ln p(\pi) + \sum_{k=1}^{K} \ln p(\mu_k, \Lambda_k) + \mathrm{E}_{\mathbf{Z}}[\ln p(\mathbf{Z} \mid \pi)] + \sum_{k=1}^{K} \sum_{n=1}^{N} \mathrm{E}[z_{nk}] \ln \mathcal{N}(\mathbf{x}_n \mid \mu_k \Lambda_k^{-1}) + \mathrm{const}.$$

- Вот уже получилось, что $q^*(\pi, \mu, \Lambda)$ раскладывается в $q^*(\pi)q^*(\mu, \Lambda)$, опять же без предположений.
- Более того, $q^*(\mu, \Lambda) = \prod_{k=1}^{K} q(\mu_k, \Lambda_k)$.
- И теперь можно по отдельности посчитать (упражнение), получится типичный M-шаг.
- Причём распределения останутся той же формы (т.к. были сопряжённые).

Вариационное приближение

- Теперь даже model selection автоматически получается, просто у некоторых компонент $N_k \approx 0$:



- Никакого оверфиттинга или коллапса компонент.

Спасибо!

Спасибо за внимание!