

# Байесовский выбор моделей: Вариационный EM-алгоритм (воспоминание)

Александр Адуенко

27е февраля 2024

- EM-алгоритм. Использование EM-алгоритма для отбора признаков в байесовской линейной регрессии.

## EM-алгоритм: воспоминание

Пусть  $\mathbf{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$  – наблюдаемые переменные,  $\mathbf{Z}$  – скрытые переменные.  
 $p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta) = p(\mathbf{D}|\mathbf{Z}, \Theta)p(\mathbf{Z}|\Theta)$ .

**Вопрос 1:** как решить задачу  $p(\mathbf{D}|\Theta) = \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} \rightarrow \max_{\Theta}$ ?

EM-алгоритм

$$\begin{aligned} \text{Введем } F(q, \Theta) &= - \int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} = \\ &= - \int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)d\mathbf{Z} + \int \log p(\mathbf{D}|\Theta)q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} = \\ &= \log p(\mathbf{D}|\Theta) - \int q(\mathbf{Z}) \log \frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)}d\mathbf{Z} = \log p(\mathbf{D}|\Theta) - D_{\text{KL}}(q||p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)). \end{aligned}$$

**Идея 1:**  $p(\mathbf{D}|\Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$  заменим на  $F(q, \Theta) \rightarrow \max_{q, \Theta}$ .

**Идея 2:** Пошагово оптимизируем по  $\Theta$  и  $q$ , то есть

**1** E-шаг:  $q^s = F(q, \Theta^{s-1}) \rightarrow \max_{q \in Q}$ ;

**2** M-шаг:  $\Theta^s = F(q^s, \Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$ .

**Вопрос:** Зачем  $q \in Q$ ? Как E-шаг был выполнен при максимизации обоснованности для модели линейной регрессии?

# Вариационный EM-алгоритм. E-шаг

$$F(q, \Theta^{s-1}) \rightarrow \max_{q \in Q} \iff D_{\text{KL}}(q \| p(\mathbf{Z} | \mathbf{D}, \Theta)) \rightarrow \min_{q \in Q}$$

$$D_{\text{KL}}(q \| p(\mathbf{Z} | \mathbf{D}, \Theta)) = \log p(\mathbf{D} | \Theta) + \int q(\mathbf{Z}) \log \frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \Theta)} d\mathbf{Z}.$$

Пусть  $Q = \left\{ q : q(\mathbf{Z}) = \prod_{k=1}^K q(\mathbf{Z}_k) \right\}$ , тогда

$$D_{\text{KL}}(q \| p(\mathbf{Z} | \mathbf{D}, \Theta)) \propto \int \prod_{k=1}^K q(\mathbf{Z}_k) \log \frac{\prod_{j=1}^K q(\mathbf{Z}_j)}{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_K | \Theta)} d\mathbf{Z}_1 \dots d\mathbf{Z}_K =$$

$$\int q(\mathbf{Z}_k) \log q(\mathbf{Z}_k) \underbrace{\left[ \prod_{j \neq k} \int q(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \right]}_{=1} d\mathbf{Z}_k - \sum_{j \neq k} C_j \underbrace{\int q(\mathbf{Z}_k) d\mathbf{Z}_k}_{=1}$$

$$\int q(\mathbf{Z}_k) \underbrace{\left[ \int \prod_{j \neq k} q(\mathbf{Z}_j) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_K | \Theta) d\mathbf{Z}_{j \neq k} \right]}_{\mathbb{E}_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \Theta)} d\mathbf{Z}_k \propto$$

$$\int q(\mathbf{Z}_k) \log \frac{q(\mathbf{Z}_k)}{\frac{1}{C} e^{\mathbb{E}_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \Theta)}} d\mathbf{Z}_k \rightarrow \min_{q(\mathbf{Z}_k)}$$

# Вариационный EM-алгоритм

$$F(q, \Theta) = \int q(\mathbf{Z}) \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)}{q(\mathbf{Z})} d\mathbf{Z} = \log p(\mathbf{D}|\Theta) - D_{\text{KL}}(q||p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)).$$

$$\text{E-шаг. } \int q(\mathbf{Z}_k) \log \frac{q(\mathbf{Z}_k)}{\frac{1}{C} e^{E_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)}} d\mathbf{Z}_k \rightarrow \min_{q(\mathbf{Z}_k)}.$$

## Полный алгоритм

Пошагово оптимизируем по  $\Theta$  и  $q(\mathbf{Z}_k)$ ,  $k = 1, \dots, K$ , то есть

1 E-шаг:  $\log q(\mathbf{Z}_k^s) \propto E_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta^{s-1})$ ;

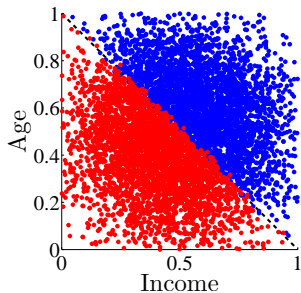
2 M-шаг:  $E_{q^s} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$ .

**Вопрос 1:** зачем нужна факторизация? Чем полученные итеративные формулы лучше формул полного EM-алгоритма?

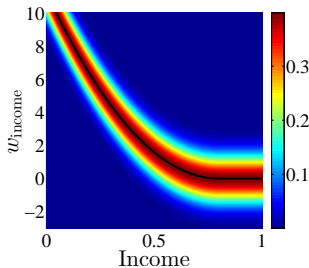
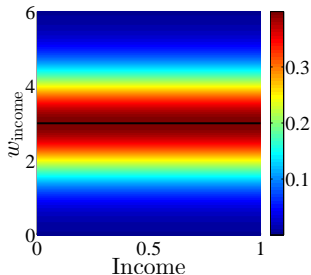
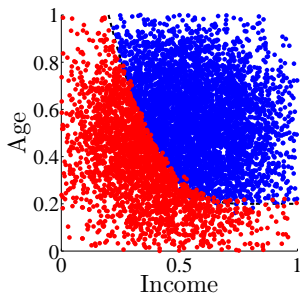
**Вопрос 2:** как понять, что в конкретной задаче формулы E и M-шагов выписаны верно?

# Нарушение свойства $p(\mathbf{w}|\mathbf{x}_i) = p(\mathbf{w})$

Предполагаемый результат



Реальные данные



Вопрос: как можно учесть указанную нелинейность в модели?

# Смесь моделей линейной регрессии

## Вероятностная модель генерации данных

- Веса моделей в смеси  $\pi$  получены из априорного распределения  $p(\pi|\mu)$ ;
- Векторы параметров моделей  $\mathbf{w}_k$  получены из нормального распределения  $p(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1})$ ,  $k = 1, \dots, K$ ;
- Для каждого объекта  $\mathbf{x}_i$  выбрана модель  $f_{k_i}$ , которой он описывается, причем  $p(k_i = k) = \pi_k$ ;
- Для каждого объекта  $\mathbf{x}_i$  целевая переменная  $y_i$  определена в соответствии с моделью  $f_{k_i}$ :  $y_i \sim \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_{k_i}^\top \mathbf{x}_i, \sigma_{k_i}^2)$ .

## Совместное правдоподобие модели

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \pi|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \sigma_1^2, \dots, \sigma_K^2, \mu) = p(\pi|\mu) \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^m \left( \sum_{l=1}^K \pi_l \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2) \right).$$

Введем матрицу скрытых переменных  $\mathbf{Z} = \|z_{ik}\|$ , где  $z_{ik} = 1 \iff k_i = k$ .

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \pi, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \sigma_1^2, \dots, \sigma_K^2, \mu) = p(\pi|\mu) \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^m \prod_{l=1}^K \left( \pi_l \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2) \right)^{z_{il}}.$$

# Получение MAP-оценки

$$\text{Пусть } p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) = \text{Dir}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{\Gamma(\sum_k \mu_k)}{\prod_l \Gamma(\mu_l)} \prod_k \pi_k^{\mu_k - 1}.$$

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}) \propto \prod_{k=1}^K \pi_k^{\mu_k - 1} \prod_{k=1}^K \sqrt{\det \mathbf{A}_k} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k\right) \prod_{i=1}^m \prod_{l=1}^K \left(\pi_l \mathcal{N}(y_i | \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2)\right)^{z_{il}}.$$

$$(\boldsymbol{\pi}^*, \mathbf{w}_1^*, \dots, \mathbf{w}_K^*) = \arg \max_{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{W}} p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}).$$

$$\mathbf{E}\text{-шаг. } \log q(\mathbf{Z}) \propto \sum_{i=1}^m \sum_{l=1}^K z_{il} (\log \pi_l + \log \mathcal{N}(y_i | \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2)), \text{ откуда}$$

$$\gamma_{il} = p(z_{il} = 1) \propto \pi_l \mathcal{N}(y_i | \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2).$$

$$\mathbf{M}\text{-шаг. } \mathbf{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{W}}$$

$$\mathbf{w}_k^* = \left( \sigma_k^2 \mathbf{A}_k + \sum_{K^i=1}^m \gamma_{ik} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top \right)^{-1} \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} y_i \mathbf{x}_i.$$

$$\boldsymbol{\pi}^* = \arg \max_{\boldsymbol{\pi}} \sum_{k=1}^K \log \pi_k \left( \underbrace{\sum_{i=1}^m \gamma_{ik}}_{\gamma_k} + \mu_k - 1 \right) \implies \pi_k \propto \max(0, \gamma_k + \mu_k - 1).$$



# Получение апостериорного распределения

**Вопрос:** как получить  $p(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k, \boldsymbol{\pi} | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu})$ ?

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \propto \prod_{k=1}^K \pi_k^{\mu_k - 1} \prod_{k=1}^K \sqrt{\det \mathbf{A}_k} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k\right) \prod_{i=1}^m \left( \sum_{l=1}^K \pi_l \mathcal{N}(y_i | \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i, \sigma_l^2) \right).$$

**Идея:** найдем  $q(\mathbf{Z}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}) = q(\mathbf{Z})q(\mathbf{W})q(\boldsymbol{\pi})$ , наиболее близкое к  $p(\mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{y})$ .

$$\log q(\mathbf{Z}) \propto \mathbb{E}_{q_{\mathbf{Z}}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \propto$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^K z_{ik} \left( \mathbb{E} \log \pi_k + \mathbb{E} \log \mathcal{N}(y_i | \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i, \sigma_k^2) \right)$$

$$\implies p(z_{ik} = 1) \propto$$

$$\exp \left( \mathbb{E} \log \pi_k - \frac{1}{2\sigma_k^2} (y_i^2 - 2\mathbb{E} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) - \frac{1}{2} \log \sigma_k^2 \right).$$

$$\log q(\boldsymbol{\pi}) \propto \mathbb{E}_{q_{\boldsymbol{\pi}}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \propto$$

$$\sum_{k=1}^K \log \pi_k \left( \mu_k - 1 + \sum_{i=1}^m \mathbb{E} z_{ik} \right) \implies \boldsymbol{\pi} \sim \text{Dir}(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\gamma}).$$

# Получение апостериорного распределения (продолжение)

$$\log q(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) \propto E_{q_{\setminus \mathbf{w}}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}) \propto \sum_{k=1}^K \left( -\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k + \frac{1}{2\sigma_k^2} \sum_{i=1}^m E z_{ik} (y_i^2 - 2\mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i y_i + \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{w}_k) \right).$$

**Вопрос 1:** Какую структуру имеет  $q(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K)$  ?

**Вопрос 2:** Какой вид имеет распределение  $q(\mathbf{w}_k)$ ?

$$q(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K) = \prod_k q_k(\mathbf{w}_k), \quad q_k(\mathbf{w}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{m}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}), \text{ где}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k = \mathbf{A}_k + \frac{1}{\sigma_k^2} \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top,$$

$$\mathbf{m}_k = \left( \sigma_k^2 \mathbf{A}_k + \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top \right)^{-1} \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} y_i \mathbf{x}_i.$$

**Вопрос 3:** Как распределение  $q_k(\mathbf{w}_k)$  соотносится с MAP-оценкой для  $\mathbf{w}_k$ , полученной ранее?

**Вопрос 4:** Как определить  $\mathbf{A}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}^2$ ?

# Определение гиперпараметров смеси моделей

## Максимизация обоснованности

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \sigma^2, \{\boldsymbol{\mu}\}}$$

Идея: воспользуемся вариационным EM-алгоритмом.

**E-шаг:** найдем  $q(\mathbf{Z}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}) = q(\mathbf{Z})q(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K)q(\boldsymbol{\pi})$ , наиболее близкое к  $p(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{y})$ .

**M-шаг:**  $E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \sigma^2}$

$$2E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \sigma^2, \boldsymbol{\mu}) \propto \sum_{k=1}^K \left[ \log \det \mathbf{A}_k - E_q \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k \right] +$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{l=1}^K E z_{il} \left( \log \frac{1}{\sigma_l^2} - \frac{1}{\sigma_l^2} (y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l + \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i) \right).$$

$$\sum_{k=1}^K \left[ \sum_{j=1}^n \log \alpha_{kj} - \alpha_{kj} E w_{kj}^2 \right] \rightarrow \max_{\alpha_{11}, \dots, \alpha_{Kn}}, \text{ где } \mathbf{A}_k = \text{diag}(\alpha_{k1}, \dots, \alpha_{kn}).$$

$$\alpha_{kj} = \frac{1}{E w_{kj}^2}. \text{ Hint: } \alpha_{kj} = \frac{1 - \alpha_{kj}^{\text{old}} D w_{kj}}{E^2 w_{kj}}$$

# Определение гиперпараметров смеси моделей

**M-шаг:**  $E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2}$

$$2E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}^2, \boldsymbol{\mu}) \propto \sum_{k=1}^K \left[ \log \det \mathbf{A}_k - E_q \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k \right] +$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{l=1}^K E z_{il} \left( \log \frac{1}{\sigma_l^2} - \frac{1}{\sigma_l^2} (y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l + \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i) \right).$$

$$\sum_{k=1}^K \left[ \sum_{j=1}^n \log \alpha_{kj} - \alpha_{kj} E w_{kj}^2 \right] \rightarrow \max_{\alpha_{11}, \dots, \alpha_{Kn}}, \text{ где } \mathbf{A}_k = \text{diag}(\alpha_{k1}, \dots, \alpha_{kn}).$$

$$\alpha_{kj} = \frac{1}{E w_{kj}^2}. \text{ Hint: } \alpha_{kj} = \frac{1 - \alpha_{kj}^{\text{old}} D w_{kj}}{E^2 w_{kj}}.$$

$$\sigma_l^2 = \frac{\sum_{i=1}^m E z_{il} (y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l + \mathbf{x}_i^\top E \mathbf{w}_l \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i)}{\sum_{i=1}^m E z_{il}}.$$

**Вопрос:** Как получить  $E w_{kj}$ ,  $D w_{kj}$ ,  $E \mathbf{w}_l \mathbf{w}_l^\top$ ,  $E z_{il}$ ?

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 113-120, 161-171, 481-489, 498-505.
- 2 MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
- 3 MacKay, David JC. "The evidence framework applied to classification networks." *Neural computation* 4.5 (1992): 720-736.
- 4 Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
- 5 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
- 6 Chen, Ming-Hui, and Joseph G. Ibrahim. "Conjugate priors for generalized linear models." *Statistica Sinica* (2003): 461-476.