

# Байесовский выбор моделей: EM-алгоритм

Александр Адуенко

9е октября 2019

## Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса:  $P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$ ;
- Формула полной вероятности:  $P(B) = P(B|A)P(A) + P(B|\bar{A})P(\bar{A})$ ;
- Определение априорных вероятностей и selection bias;
- (Множественное) тестирование гипотез
- Экспоненциальное семейства. Достаточные статистики.
- Наивный байесовский классификатор. Связь целевой функции и вероятностной модели.
- Линейная регрессия: связь МНК и  $w_{ML}$ , регуляризации и  $w_{MAP}$ .
- Свойство сопряженности априорного распределения правдоподобию.
- Прогноз для одиночной модели:  
$$p(\mathbf{y}_{test} | \mathbf{X}_{test}, \mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}) = \int p(\mathbf{y}_{test} | \mathbf{w}, \mathbf{X}_{test}) p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}) d\mathbf{w}.$$
- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности  
 $p(M_i | \mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}) \propto p(M_i) p_i(\mathbf{y}_{train} | \mathbf{X}_{train})$ .
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки  $\mathbf{w}$  и связь априорного распределения с отбором признаков.

# Апостериорное распределение в логистической регрессии

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) p(\mathbf{w} | \mathbf{A}), \text{ где } p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) = \prod_{j=1}^m \sigma(y_j \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_j).$$

$$p(\mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{A}) = \frac{p(\mathbf{y}, \mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{A})}{p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{A})} = \frac{\prod_{j=1}^m \sigma(y_j \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_j) N(\mathbf{w} | \mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})}{p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{A})}.$$

$$p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{w}, \mathbf{X}_{\text{test}}) p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) d\mathbf{w}.$$

**Вопрос 1:** Как определить  $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$ ? Единственное ли решение?

$$q(\mathbf{w}) = -\log p(\mathbf{y}, \mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{A}) = -\log p(\mathbf{w} | \mathbf{A}) - \log p(\mathbf{y} | \mathbf{X}, \mathbf{w}) =$$
$$q(\mathbf{w}_{\text{MAP}}) + \frac{1}{2} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}})^\top \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}}) + O(\|\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}}\|^3), \text{ где}$$
$$\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{A} + \mathbf{X}^\top \mathbf{R} \mathbf{X}, \text{ где } \mathbf{R} = \text{diag}(\sigma(\mathbf{w}_{\text{MAP}}^\top \mathbf{x}_j) \sigma(-\mathbf{w}_{\text{MAP}}^\top \mathbf{x}_j)).$$

**Нормальная аппроксимация:**  $p(\mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{A}) \approx N(\mathbf{w} | \mathbf{w}_{\text{MAP}}, \mathbf{H}^{-1})$ .

**Пример.** Пусть  $n = 1$ ,  $\mathbf{w}_{\text{MAP}} = 1$ .

**Вопрос 2:** Что можно сказать про принадлежность объектов с  $x = 0; 1; -1; 5; -5$  к классу 1?

**Вопрос 3:** Как результат зависит от неопределенности  $h^{-1}$ ? Что происходит при  $h \rightarrow 0$  и при  $h \rightarrow \infty$ ?

# Нелинейная разделяющая поверхность

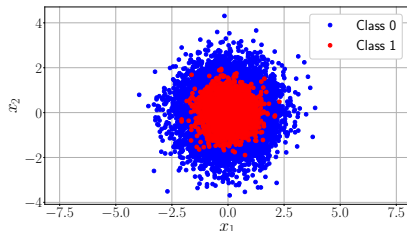
$$p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{w}, \mathbf{X}_{\text{test}}) p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) d\mathbf{w}.$$

$$p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = N(\mathbf{w} | \mathbf{1}, h^{-1}).$$

Прогноз вероятности класса 1 в зависимости от неопределенности  $h^{-1}$

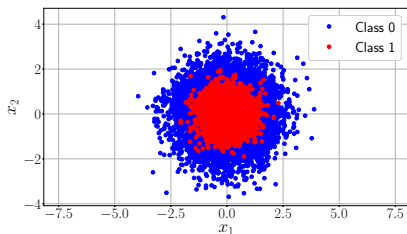
	$x = 5$	$x = 1$	$x = 0$	$x = -1$	$x = -5$
$h = \infty$	0.0067	0.269	0.5	0.731	0.9933
$h = 1$	0.169	0.301	0.5	0.699	0.831
$h = 0$	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5

**Вопрос 1:** как учесть в модели, что классы не сбалансированы?



**Вопрос 2:** что делать, если разделяющая поверхность нелинейна?

# Выбросы и пропуски в данных



**Вопрос 1:** что делать, если разделяющая поверхность нелинейна?

**Идея:**

$$\mathbf{x} \mapsto \varphi(\mathbf{x}) = [K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), i = 1, \dots, m].$$

**Вопрос 2:** Чему соответствует отбор признаков при замене  $\mathbf{x} \mapsto \varphi(\mathbf{x}) = [K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), i = 1, \dots, m]$ ?

**Вопрос 3:** Что если значения части признаков не заданы или некорректны? Что происходит при замене на среднее / медиану?

**Исходная модель:**  $p(y, \mathbf{w} | \mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(y | \mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w} | \mathbf{A})$ .

Пусть  $\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{X}} + \mathbf{Z}$ ,  $\tilde{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{Z} = \mathbf{0}$ , где  $\mathbf{Z}$  – матрица значений пропусков.

**Новая модель:**  $p(y, \mathbf{w}, \mathbf{Z} | \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) = p(y | \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{Z}, \mathbf{w})p(\mathbf{w} | \mathbf{A})p(\mathbf{Z} | \tilde{\mathbf{X}})$ .

$$p(\mathbf{w} | y, \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) \propto p(y, \mathbf{w} | \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) = \int p(y, \mathbf{w}, \mathbf{Z} | \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) d\mathbf{Z} =$$

$$\int p(y | \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{Z}, \mathbf{w}) p(\mathbf{w} | \mathbf{A}) \underbrace{p(\mathbf{Z} | \tilde{\mathbf{X}})}_{\text{векс}} d\mathbf{Z}.$$

# EM-алгоритм

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  $p(\mathbf{D}|\Theta) = \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} \rightarrow \max_{\Theta}$ ?

**Пример 1.**  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \varepsilon$ ,  $\mathbf{w} \sim N(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})$ ,  $\varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \beta^{-1}\mathbf{I})$

$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$ .

$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \underbrace{\mathbf{A}, \beta^{-1}}) \propto -\frac{1}{2} \log \det(\beta^{-1}\mathbf{I} + \mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^T) - \frac{1}{2}\mathbf{y}^T (\beta^{-1}\mathbf{I} + \mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^T)^{-1}\mathbf{y}$ .

EM-алгоритм<sup>Ⓟ</sup>

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

**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:  $q^s = F(q, \Theta^{s-1}) \rightarrow \max_q$ ;

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

# EM-алгоритм для максимизации обоснованности

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{w} \sim N(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1}), \boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \beta^{-1}\mathbf{I})$$

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) = .$$

$$\log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) \propto \frac{m}{2} \log \beta - \frac{\beta}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A} - \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{A} \mathbf{w}.$$

$$F(q, \mathbf{A}, \beta) = - \int q(\mathbf{w}) \log q(\mathbf{w}) d\mathbf{w} + \int q(\mathbf{w}) \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) d\mathbf{w} = \\ \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) - D_{\text{KL}}(q(\mathbf{w})||p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta)) \rightarrow \max_{q, \mathbf{A}, \beta}.$$

E-шаг (считаем  $\mathbf{A}, \beta$  фиксированными)

$$F(q, \mathbf{A}, \beta) \rightarrow \max_q \iff q(\mathbf{w}) = p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) = N(\mathbf{w}|\mathbf{w}_0, \boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}), \text{ где}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_0 = \mathbf{A} + \beta \mathbf{X}^T \mathbf{X}, \mathbf{w}_0 = \beta \boldsymbol{\Sigma}_0^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}.$$

M-шаг (считаем  $q(\mathbf{w})$  фиксированным)

$$E_{q(\mathbf{w})} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) = \int q(\mathbf{w}) \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) d\mathbf{w} \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \beta}.$$

$$\tilde{F}(\mathbf{A}, \beta) = \frac{m}{2} \log \beta - \frac{\beta}{2} \mathbb{E} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \log \alpha_j - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbb{E} w_j^2 \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \beta}.$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_j} = \frac{1}{2\alpha_j} - \frac{1}{2} \mathbb{E} w_j^2 = 0 \iff \alpha_j = \frac{1}{\mathbb{E} w_j^2}.$$

$$\text{Hint: } 1 = \alpha_j (\mathbb{E}^2 w_j + \mathbb{D} w_j) \implies \alpha_j^{\text{new}} = \frac{1 - \alpha_j^{\text{old}} \mathbb{D} w_j}{\mathbb{E}^2 w_j}.$$

$$\frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{m}{2\beta} - \frac{1}{2} \mathbb{E} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 = 0 \iff \beta = \frac{m}{\mathbb{E} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2}.$$

# EM-алгоритм для максимизации обоснованности

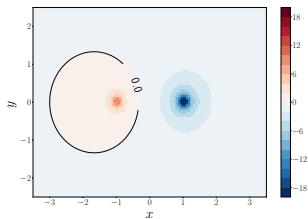
Потенциал поля точечного заряда:  $\varphi = k \frac{q}{r}$ .

Пусть имеется несколько зарядов  $q_1, \dots, q_l$  в точках  $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_l$ .

Тогда  $\varphi(\mathbf{x}) = k \sum_{i=1}^l \frac{q_i}{\|\mathbf{x} - \mathbf{z}_i\|}$ . По набору точек  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m$  и измеренным

$$y_i = \varphi(\mathbf{x}_i) - \underbrace{\varphi(\infty)}_{=0} + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(\varepsilon_i | 0, \beta^{-1})$$

требуется оценить  $\varphi(\mathbf{x})$  для  $\mathbf{x}$  из тестовой выборки.



$\mathbf{y} = \Phi \mathbf{w} + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(\varepsilon | \mathbf{0}, \beta^{-1} \mathbf{I}),$  где

$$\Phi = \left\| \frac{1}{\delta + \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right\|, \quad i, j = \overline{1, m};$$

$$\mathbf{w} \sim p(\mathbf{w} | \mathbf{A}) = N(\mathbf{w} | \mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1}).$$

**Шаг 1:**  $p(\mathbf{y}_{\text{train}} | \Phi_{\text{train}}, \mathbf{A}, \beta) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \beta}$  позволит отобрать признаки.

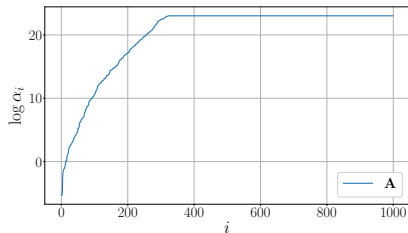
**Шаг 2:** Прогноз для тестовой выборки:

$$p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \Phi_{\text{test}}, \Phi_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{w}, \Phi_{\text{test}}) p(\mathbf{w} | \Phi_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) d\mathbf{w}$$

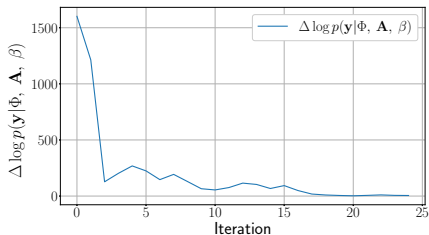


# Результаты для задачи восстановления потенциала

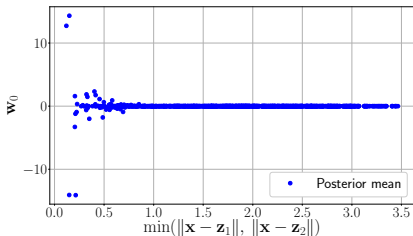
## Оптимальный $\alpha$



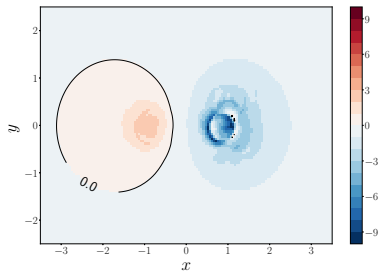
## Обоснованность по итерациям



## Среднее апостериорного распределения $w_0$



## Восстановленный потенциал



# Литература

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 113-120, 161-171.
- 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.
- 7 Fahrmeir, Ludwig, and Heinz Kaufmann. "Consistency and asymptotic normality of the maximum likelihood estimator in generalized linear models." *The Annals of Statistics* (1985): 342-368.
- 8 Baghishani, Hossein, and Mohsen Mohammadzadeh. "Asymptotic normality of posterior distributions for generalized linear mixed models." *Journal of Multivariate Analysis* 111 (2012): 66-77.