

# Байесовский выбор моделей: Вариационный EM-алгоритм

Александр Адуенко

1е ноября 2022

## Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса и формула полной вероятности;
- 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:

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

- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки  $w$ ; связь априорного распределения с отбором признаков.
- Неопределенность в прогнозе и апостериорное распределение; учёт нелинейных зависимостей, пропусков и выбросов.
- 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**

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

**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

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

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

$$\int q(\mathbf{Z}_k) \underbrace{\left[ \int \prod_{j \neq k} q(\mathbf{Z}_j) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_K | \Theta) d\mathbf{Z}_{j \neq k} \right]}_{=1} d\mathbf{Z}_k \propto$$

$$\mathbb{E}_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \Theta)$$

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

# Вариационный EM-алгоритм

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

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

## Полный алгоритм

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

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

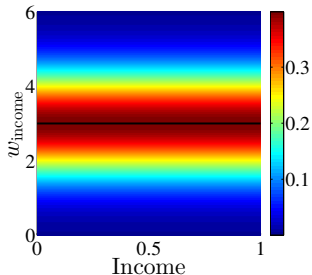
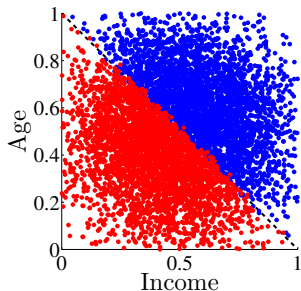
2 M-шаг:  $\mathbb{E}_{q^s} \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$ .

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

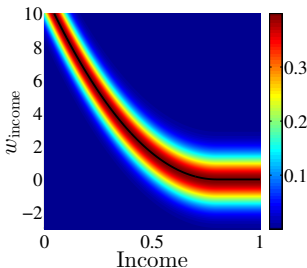
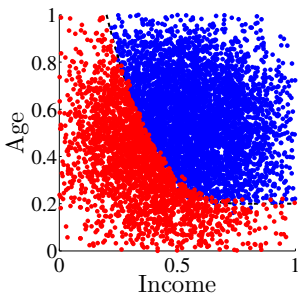
**Вопрос 2:** Как понять, что в конкретной задаче формулы E и M-шагов выписаны верно?

# 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 логистической 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  $\mathbf{x}_i$  класс  $y_i$  определен в соответствии с моделью  $f_{k_i}$ :  $y_i \sim \text{Be}(\sigma(\mathbf{w}_{k_i}^\top \mathbf{x}_i))$ .

## Совместное правдоподобие модели

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

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

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

# Получение MAP-оценки

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

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto \prod_{k=1}^K \pi_k^{\mu_k - 1} \prod_{k=1}^K \sqrt{\det \mathbf{A}_k} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k\right) \prod_{i=1}^m \prod_{l=1}^K \left(\pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i)\right)^{z_{il}}.$$

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

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

$$\gamma_{ik} = p(z_{ik} = 1) \propto \pi_k \sigma(y_i \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i).$$

$$\mathbf{M}\text{-шаг. } \mathbf{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K}.$$

$$\mathbf{w}_k^* = \arg \max_{\mathbf{w}_k} \left[ -\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k + \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \log \sigma(y_i \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) \right].$$

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



# Получение апостериорного распределения

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

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi} | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto \prod_{k=1}^K \pi_k^{\mu_k - 1} \prod_{k=1}^K \sqrt{\det \mathbf{A}_k} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k\right) \prod_{i=1}^m \left( \sum_{l=1}^K \pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i) \right).$$

**Идея:** 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  $p(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{y})$ .

$$\log q(\mathbf{Z}) \propto \mathbb{E}_{q_{\mathbf{Z}}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto$$

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

$$\implies p(z_{ik} = 1) \propto \exp \left( \mathbb{E} \log \pi_k + \mathbb{E} \log \sigma(y_i \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) \right).$$

$$\log q(\boldsymbol{\pi}) \propto \mathbb{E}_{q_{\boldsymbol{\pi}}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto$$

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

# Получение апостериорного распределения (продолжение)

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

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

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

**Варианты аппроксимации  $q(\mathbf{w}_k)$ :**

- Аппроксимация Лапласа:  $q(\mathbf{w}_k) \approx \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{w}_k^*, \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1})$ ;
- Ищем  $q(\mathbf{w}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{m}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1})$  такое, что  $D_{KL}(q \| C_k f_k(\mathbf{w}_k)) \rightarrow \min_q$ 
  - Численно (если число признаков  $n$  невелико);
  - С помощью VLB для сигмоиды и соответствующей верхней оценки для  $D_{KL}(q \| C_k f_k(\mathbf{w}_k))$ .

**Вопрос 3:** Как определить  $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}$  ?

# Определение гиперпараметров смеси моделей

## Максимизация обоснованности

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \{\boldsymbol{\mu}\}}$$

**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:**  $E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K}$ .

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

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

**Вопрос:** Как получить  $E w_{kj}$  и  $D w_{kj}$ ?

**Замечание:** можно сразу сделать использовать VLB для сигмоидной функции, чтобы получить нижнюю границу обоснованности

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \geq \tilde{p}(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu})$$

и тогда на E-шаге автоматически  $q(\mathbf{w}_k)$  будет нормальным.

# Литература

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 113-120, 161-171, 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.
- 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.