Курс: Графические модели, 2013

Домашнее задание по вариационному выводу

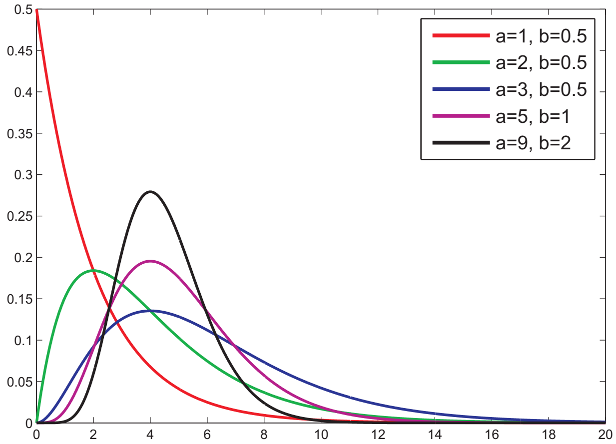
Дата: 5 мая 2013

Ликбез: гамма-распределение

Гамма-распределение является вероятностным распределением для действительной положительной переменной λ и имеет плотность:

$$\mathcal{G}(\lambda|a,b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)}\lambda^{a-1}\exp(-b\lambda),\ \ a,b>0.$$

Здесь $\Gamma(a)$ – гамма-функция. Различные виды гамма-распределения:



С помощью гамма-распределения можно задать широкий спектр унимодальных несимметричных распределений на положительной полуоси.

Статистики гамма-распределения:

$$\mathbb{E}\lambda = \frac{a}{b},$$
$$\mathbb{D}\lambda = \frac{a}{b^2},$$
$$\mathbb{E}\log\lambda = \Psi(a) - \log b.$$

Здесь $\Psi(a) = \frac{d}{da}\log\Gamma(a)$ – дигамма функция.

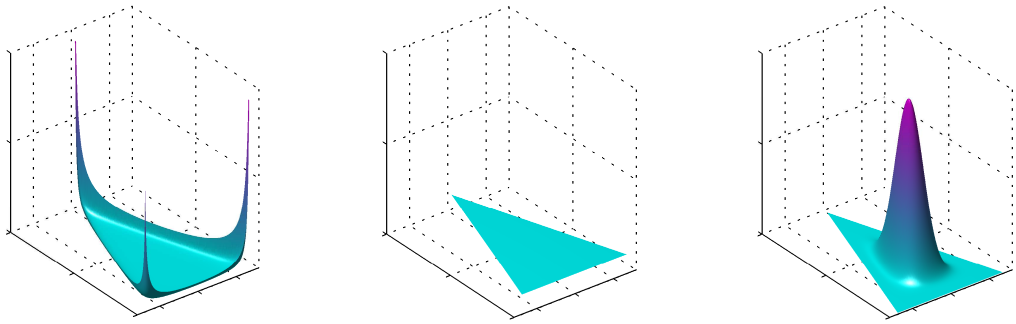
Можно показать, что при $a=b\to 0$ гамма-распределение переходит в равномерное распределение на параметр λ в логарифмической шкале.

Ликбез: распределение Дирихле

Случайная величина $\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^K$, определенная на симплексе $(\theta_k\ge 0, \sum_{k=1}^K\theta_k=1)$, имеет распределение Дирихле, если ее плотность определяется как

$$p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) = \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\Gamma(\sum_k\alpha_k)}{\prod_{k=1}^K\Gamma(\alpha_k)}\prod_{k=1}^K\theta_k^{\alpha_k-1},\ \ \alpha_k>0.$$

Здесь $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция, $\boldsymbol{\alpha}$ – набор параметров распределения. Различные виды распределения Дирихле для случая $K=3$ показаны на рис. 1. Заметим, что в случае $\alpha_1=\cdots=\alpha_K=1$ распределение Дирихле переходит в равномерное распределение на симплексе.



$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0.1$ $\qquad$ $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1$ $\qquad$ $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 10$

Рис. 1: Различные виды распределения Дирихле

Статистики распределения Дирихле:

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}_p\theta_i = \frac{\alpha_i}{\alpha_0},\\
&\mathrm{Cov}(\theta_i, \theta_j) = \frac{\alpha_i\alpha_0[i=j] - \alpha_i\alpha_j}{\alpha_0^2(\alpha_0+1)},\\
&\alpha_0 = \sum_k \alpha_k,\\
&\mathbb{E}_p \log\theta_i = \Psi(\alpha_i) - \Psi(\sum_k \alpha_k).
\end{aligned}$$

Здесь $\Psi(x) = \frac{d}{dx}\log\Gamma(x)$ – дигамма функция.

Распределение Дирихле часто используется в качестве априорного распределения для набора дискретных вероятностей. Рассмотрим дискретную случайную величину, принимающую K значений:

$$\begin{array}{cccc} 1 & 2 & \dots & K \\ \theta_1 & \theta_2 & \dots & \theta_K \end{array}$$

Рассмотрим задачу оценки параметров $\boldsymbol{\theta}$ этой случайной величины по выборке из нее объема N с помощью метода максимального правдоподобия:

$$p(X|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{n=1}^N p(x_n|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{n=1}^N \theta_{x_n} \to \max_{\boldsymbol{\theta}:\theta_k\geq 0, \sum_k \theta_k = 1}$$

Данная задача условной оптимизации может быть решена аналитически с помощью функции Лагранжа L:

$$L(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \log p(X|\boldsymbol{\theta}) + \lambda\left(\sum_k \theta_k - 1\right) = \sum_{n=1}^N \log\theta_{x_n} + \lambda\left(\sum_k \theta_k - 1\right) = \\ = \sum_{k=1}^K \log\theta_k\left(\sum_{n=1}^N [x_n = k]\right) + \lambda\left(\sum_{k=1}^K \theta_k - 1\right).$$

Приравнивая производные функции Лагранжа к нулю и суммируя по k, получаем:

$$\frac{\partial}{\partial\theta_k}L(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \frac{\sum_{n=1}^N [x_n = k]}{\theta_k} + \lambda = 0 \;\Rightarrow\; \theta_k = -\frac{1}{\lambda}\sum_{n=1}^N [x_n = k], \;\Rightarrow\; \lambda = -\sum_{k=1}^K\sum_{n=1}^N [x_n = k] = -N.$$

Таким образом, оценка максимального правдоподобия для параметров $\boldsymbol{\theta}$ определяется частотами:

$$\theta_k = \frac{\sum_{n=1}^N [x_n = k]}{N}. \tag{1}$$

Введем распределение Дирихле $\mathrm{Dir}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})$ в качестве априорного распределения для параметров $\boldsymbol{\theta}$ и рассмотрим оценку максимума апостериорного распределения:

$$p(\boldsymbol{\theta}|X, \boldsymbol{\alpha}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}} \;\Leftrightarrow\; p(X|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \to \max_{\boldsymbol{\theta}}. \tag{2}$$

Действуя аналогично случаю максимума правдоподобия, получаем следующее решение данной задачи оптимизации:

$$\theta_k = \frac{\alpha_k - 1 + \sum_{n=1}^{N}[x_n = k]}{\sum_{j=1}^{K}\alpha_j - K + N}. \tag{3}$$

Заметим, что в случае равномерного априорного распределения ($\alpha_1 = \ldots \alpha_K = 1$) данное решение переходит в оценку максимального правдоподобия (1). При всех $\alpha_k > 1$ решение (3) является менее контрастным, чем решение (1), и, в частности, задает ненулевую вероятность для исходов, ни разу не наблюдавшихся в обучающей выборке. В этом случае происходит сглаживание вероятностей. Напротив, при $\alpha_k < 1$ решение (3) является более контрастным по сравнению с (1), т.к. в этом случае априорное распределение имеет большой вес у границ симплекса. Например, в случае $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0.1$ и выборки из одной единицы, двух двоек и трех троек оценки максимального правдоподобия и максимального апостериорного распределения соответственно равны:

$$\theta_{ML,1} = \frac{1}{6},\; \theta_{ML,2} = \frac{1}{3},\; \theta_{ML,3} = \frac{1}{2},$$
$$\theta_{MP,1} = \frac{1}{33},\; \theta_{MP,2} = \frac{11}{33},\; \theta_{MP,3} = \frac{21}{33}.$$

Пусть для некоторых $k \in \{1, \ldots, K\}$ значение $\alpha_k - 1 + \sum_n [x_n = k] \le 0$. Обозначим множество таких индексов через $K_{\le 0}$, а множество оставшихся индексов — через $K_{>0}$. Тогда можно показать, что решение задачи (2) вместо (3) становится следующим:

$$\theta_{MP,k} = \begin{cases} 0, & \text{если } k \in K_{\le 0}, \\ \frac{\alpha_k - 1 + \sum_n [x_n = k]}{\sum_{j \in K_{>0}} (\alpha_j - 1 + \sum_n [x_n = j])}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Задача 1

Рассматривается стандартная задача регрессии. Имеется обучающая выборка $(\boldsymbol{t}, X) = \{t_n, \boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^N$, где $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^d$ – вектор признаков n-го объекта, а $t_n \in \mathbb{R}$ – его целевая переменная. Необходимо на основе этих данных найти прогноз значения t_{new} для нового объекта, представленного только своим вектором признаков $\boldsymbol{x}_{new}$.

Рассмотрим решение этой задачи с помощью модели байесовской линейной регрессии:

$$\begin{aligned}
&p(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{w}, \alpha, \beta|X) = p(\boldsymbol{t}|X, \boldsymbol{w}, \beta)p(\boldsymbol{w}|\alpha)p(\alpha)p(\beta),\\
&p(\boldsymbol{t}|X, \boldsymbol{w}, \beta) = \mathcal{N}(\boldsymbol{t}|X\boldsymbol{w}, \beta^{-1}I),\\
&p(\boldsymbol{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\boldsymbol{w}|\mathbf{0}, \alpha^{-1}I),\\
&p(\alpha) = \mathcal{G}(\alpha|a, b),\\
&p(\beta) = \mathcal{G}(\beta|c, d).
\end{aligned}$$

Здесь $\boldsymbol{t} \in \mathbb{R}^N, X \in \mathbb{R}^{N\times d}$ – обучающие данные, $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^d, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$ – скрытые переменные, $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ – параметры модели. Заметим, что данная модель представляет собой стандартную модель линейной регрессии $\hat{t}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$ с весами $\boldsymbol{w}$ в предположении нормального шума с дисперсией β^{-1}, а также с добавлением априорных распределений на веса и на дисперсию шума в виде гамма-распределений.

Необходимо с помощью вариационного вывода найти факторизованное приближение для апостериорного распределения на скрытые переменные:

$$p(\boldsymbol{w}, \alpha, \beta|\boldsymbol{t}, X) \approx q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w})q_\alpha(\alpha)q_\beta(\beta).$$

Требуется выписать формулы пересчета для всех компонент факторизованного приближения $q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w})$, $q_\alpha(\alpha)$, $q_\beta(\beta)$, а также вид оптимизируемого функционала $\mathcal{L}\{q\}$.

Задача 2

Рассмотрим модель смеси из K нормальных распределений, в которой добавляется априорное распределение Дирихле на веса компонент смеси:

$$
\begin{aligned}
&p(X, T, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K) = \prod_{n=1}^N p(\boldsymbol{x}_n|t_n, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K) p(t_n|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}),\\
&p(\boldsymbol{x}_n|t_n, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_{t_n}, \Sigma_{t_n}),\\
&p(t_n|\boldsymbol{\theta}) = \theta_{t_n},\\
&p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) = \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}).
\end{aligned}
$$

Здесь $X = \{\boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^N$, $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^d$ – наблюдаемые данные, $T = \{t_n\}_{n=1}^N$, $t_n \in \{1, \ldots, K\}$ – номера компонент смеси для каждого объекта, $\boldsymbol{\alpha}, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K$ – параметры модели.

Требуется записать формулы вариационного EM-алгоритма для решения задачи обучения

$$p(X|\boldsymbol{\alpha}, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K) \to \max_{\{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K}.$$

Здесь, в частности, необходимо рассмотреть факторизованное приближение для апостериорного распределения вида

$$p(T, \boldsymbol{\theta}|X, \boldsymbol{\alpha}, \{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K) \approx q_T(T) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}).$$

Требуется выписать формулы пересчета для компонент факторизованного приближения на E-шаге $q_T(T)$, $q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})$, формулы пересчета для параметров $\{\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K$ на M-шаге, а также вид оптимизируемого в итерациях функционала $\mathcal{L}\{q\}$.