Байесовский выбор моделей: вариационный EM-алгоритм

Александр Адуенко

7е ноября 2018

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 $\mathbf{w}_{\text{ML}}$, регуляризации и $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$.
- 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 $\mathbf{w}$ и связь априорного распределения с отбором признаков.
- EM-алгоритм. Использование EM-алгоритма для отбора признаков в байесовской линейной регрессии.

EM-алгоритм

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

Вопрос 1: как решить задачу $p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) = \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\mathbf{\Theta})d\mathbf{Z} \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$?

EM-алгоритм

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

$-\int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \mathbf{\Theta})d\mathbf{Z} + \int \log p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta})q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} =$

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

Идея 1: $p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$ заменим на $F(q, \mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{q,\, \mathbf{\Theta}}$.

Идея 2: Пошагово оптимизируем по $\mathbf{\Theta}$ и q, то есть

1. E-шаг: $q^s = F(q, \mathbf{\Theta}^{s-1}) \to \max\limits_{q \in Q}$;
2. M-шаг: $\mathbf{\Theta}^s = F(q^s, \mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$.

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

Вариационный EM-алгоритм. E-шаг

$$F(q,\ \boldsymbol{\Theta}^{s-1}) \to \max_{q\in Q} \Longleftrightarrow D_{\mathrm{KL}}(q\|p(\mathbf{Z}|\mathbf{D},\ \boldsymbol{\Theta})) \to \min_{q\in Q}.$$

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

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

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

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

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

$$C \int q(\mathbf{Z}_k) \log \frac{C q(\mathbf{Z}_k)}{e^{\mathsf{E}_{q\setminus k} \log p(\mathbf{D},\mathbf{Z}|\boldsymbol{\Theta})}} d\mathbf{Z}_k \to \min_{q(\mathbf{Z}_k)}.$$

Вариационный EM-алгоритм

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

E-шаг. $C \int q(\mathbf{Z}_k) \log \frac{C q(\mathbf{Z}_k)}{e^{\mathsf{E}_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D},\, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\Theta})}} d\mathbf{Z}_k \to \min\limits_{q(\mathbf{Z}_k)}.$

Полный алгоритм

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

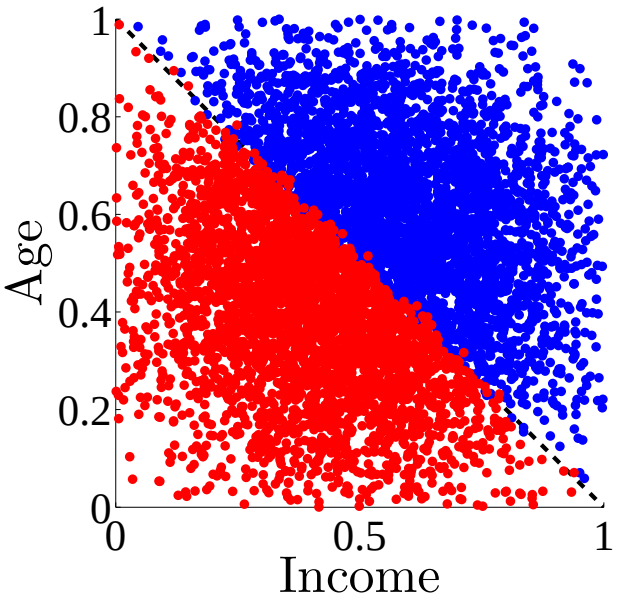
1. E-шаг: $\log q(\mathbf{Z}_k^s) \propto \mathsf{E}_{q \setminus k} \log p(\mathbf{D},\, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\Theta}^{s-1})$;
2. M-шаг: $\mathsf{E}_{q^s} \log p(\mathbf{D},\, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\Theta}) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta}}$.

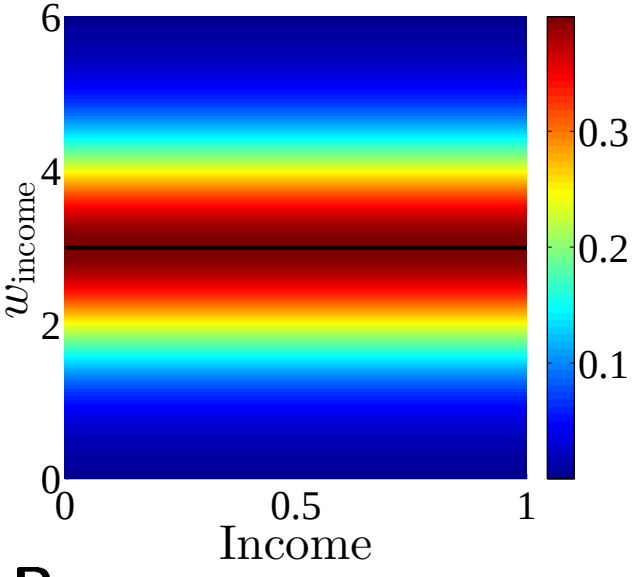
Вопрос 1: зачем нужна факторизация? Чем полученные итеративные формулы лучше формул полного EM-алгоритма?

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

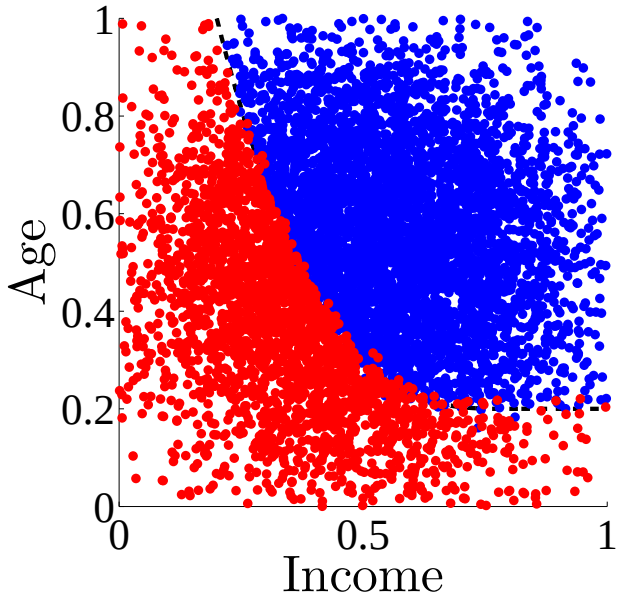
Нарушение свойства $p(\mathbf{w}|\mathbf{x}_i) = p(\mathbf{w})$

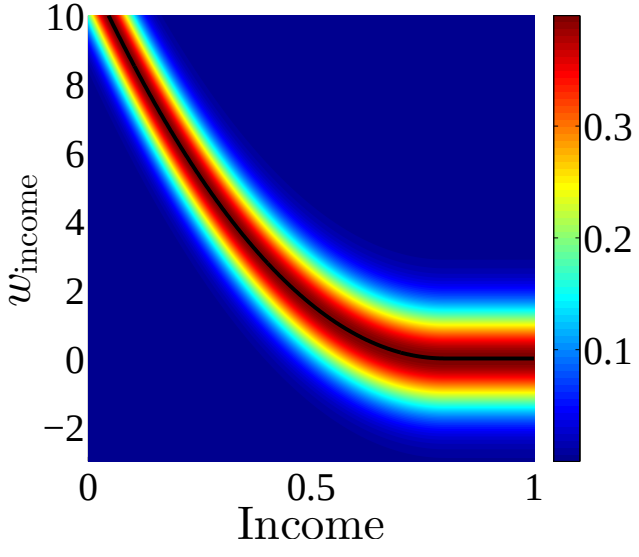
Предполагаемый результат





Реальные данные





Вопрос: как можно учесть указанную нелинейность в модели?

Смесь моделей логистической регрессии

Вероятностная модель генерации данных

- Веса моделей в смеси $\boldsymbol{\pi}$ получены из априорного распределения $p(\boldsymbol{\pi}|\mu)$;
- Векторы параметров моделей $\mathbf{w}_k$ получены из нормального распределения $p(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}),\ k = 1, \ldots, K$;
- 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}: $y_i \sim \mathrm{Be}\big(\sigma(\mathbf{w}_{k_i}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i)\big)$.

Совместное правдоподобие модели

$$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}_1,\ \ldots,\ \mathbf{w}_K,\ \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}_1,\ \ldots,\ \mathbf{A}_K,\ \boldsymbol{\mu}) =$$

$$p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} N(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^{m} \left(\sum_{l=1}^{K} \pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right).$$

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

$$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}_1,\ \ldots,\ \mathbf{w}_K,\ \boldsymbol{\pi},\ \mathbf{Z}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}_1,\ \ldots,\ \mathbf{A}_K,\ \boldsymbol{\mu}) =$$

$$p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} N(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^{m} \prod_{l=1}^{K} \left(\pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right)^{z_{il}}.$$

Получение MAP-оценки

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

$$p(\mathbf{y},\, \mathbf{w}_1,\, \ldots,\, \mathbf{w}_K,\, \boldsymbol{\pi},\, \mathbf{Z}|\mathbf{X},\, \mathbf{A}_1,\, \ldots,\, \mathbf{A}_K,\, \boldsymbol{\mu}) \propto$$

$$\prod_{k=1}^{K} \pi_k^{\mu_k - 1} \prod_{k=1}^{K} \sqrt{\det \mathbf{A}_k} \exp(-\tfrac{1}{2}\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{w}) \prod_{i=1}^{m} \prod_{l=1}^{K} \Big(\pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)\Big)^{z_{il}}.$$

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

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

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

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

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

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

Получение апостериорного распределения

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

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

Идея: найдем $q(\mathbf{Z}, \mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}) = q(\mathbf{Z}) q(\mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_K) q(\boldsymbol{\pi})$, наиболее близкое к $p(\mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_k, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{y})$.

$$\log q(\mathbf{Z}) \propto \mathsf{E}_{q_{\setminus \mathbf{Z}}} p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto$$
$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{K} z_{ik} \left(\mathsf{E} \log \pi_k + \mathsf{E} \log \sigma(y_i \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right)$$
$$\Longrightarrow p(z_{ik} = 1) \propto \exp \left(\mathsf{E} \log \pi_k + \mathsf{E} \log \sigma(y_i \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right).$$

$$\log q(\boldsymbol{\pi}) \propto \mathsf{E}_{q_{\setminus \boldsymbol{\pi}}} p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \propto$$
$$\sum_{k=1}^{K} \log \pi_k \left(\mu_k - 1 + \sum_{i=1}^{m} \mathsf{E} z_{ik} \right) \Longrightarrow \boldsymbol{\pi} \sim \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\gamma}).$$

Получение апостериорного распределения (продолжение)

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

$$\sum_{k=1}^{K} \left(-\tfrac{1}{2} \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k + \sum_{i=1}^{m} \mathsf{E} z_{ik} \log \sigma(y_i \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right) = \sum_{k=1}^{K} f_k(\mathbf{w}_k).$$

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

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

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

- Аппроксимация Лапласа: $q(\mathbf{w}_k) \approx N(\mathbf{w}_k | \mathbf{w}_k^*, \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1})$;
- Ищем $q(\mathbf{w}_k) = N(\mathbf{w}_k | \mathbf{m}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1})$ такое, что $D_{KL}(q \| C_k f_k(\mathbf{w}_k)) \to \min\limits_q$
  - 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 $\mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}$?

Определение гиперпараметров смеси моделей

Максимизация обоснованности

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

Идея: воспользуемся вариационным EM-алгоритмом.

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

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

Замечание: можно сразу сделать использовать VLB для сигмоидной функции, чтобы получить нижнюю границу обоснованности $p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu}) \geq \tilde{p}(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \ldots, \mathbf{A}_K, \boldsymbol{\mu})$ 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.