Algoritmos Bayesianos para clasificación y regresión

Curso de aprendizaje automático para el INE

Víctor Gallego y Roi Naveiro

2019-05-27

¿Por qué usar el enfoque Bayesiano?

- Previene el **overfitting**
- Aporta métodos automáticos para determinar la complejidad de los modelos, basados en datos.
- Permite **cuantificar la incertidumbre**, es decir, no solo nos da una predicción puntual, si no que podemos obtener un intervalo predictivo para saber cómo de confiado está el modelo.

Regresión Bayesiana

Modelo de Regresión

- Objetivo: predecir uno o más targets **contínuos** t a partir de un vector D-dimensional de inputs x.
- Modelo de ruido normal, $t = y(x, w) + \epsilon$, donde $y(x, w) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(x) = w^\top \phi(x)$.

$$p(t|x, w, \beta) = \mathcal{N}(t|y(x, w), \beta^{-1})$$

- Si tenemos datos $x_1, \ldots, x_N$, $t_1, \ldots, t_N$ y asumimos que son muestras iid de $p(t|x, w, \beta)$, la verosimilitud es

$$p(\boldsymbol{t}|X, w) = \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(t_n|w^\top \phi(x_n), \beta^{-1})$$

- Donde $\boldsymbol{t}$ es el vector de los N targets y X la matriz de datos.
- Maximizando la log-verosimilitud con respecto a w obtenemos la solución de mínimos cuadrados.

Enfoque Bayesiano (1)

- Tratamos los parámetros desconocidos como variables aleatorias.
- Empezaremos asumiendo que conocemos la precisión β.
- Ponemos distribuciones a priori sobre los pesos w.
- Como la verosimilitud es la exponencial de una función cuadrática de w, el prior conjugado es normal

$$p(w) = \mathcal{N}(w|m_0, S_0)$$

Enfoque Bayesiano (2)

- Podemos calcular la distribución a posteriori

$$p(w|\boldsymbol{t}, X) \propto p(t|X, w)p(w)$$

- Gracias a la conjugación, la distribución a posteriori será también Gaussiana.

$$p(w|\boldsymbol{t}, X) = \mathcal{N}(w|m_N, S_N)$$

- Donde

$$m_N = S_N(S_0^{-1}m_0 + \beta\Phi^\top \boldsymbol{t})$$
$$S_N^{-1} = S_0^{-1} + \beta\Phi^\top\Phi$$

- Φ es la matriz de diseño. La final i-ésima es el vector $[\phi_0(x_i), \ldots, \phi_{M-1}(x_i)]$.
- **Ojo**: no siempre podremos calcular analíticamente la distribución a posteriori...

Enfoque Bayesiano (3)

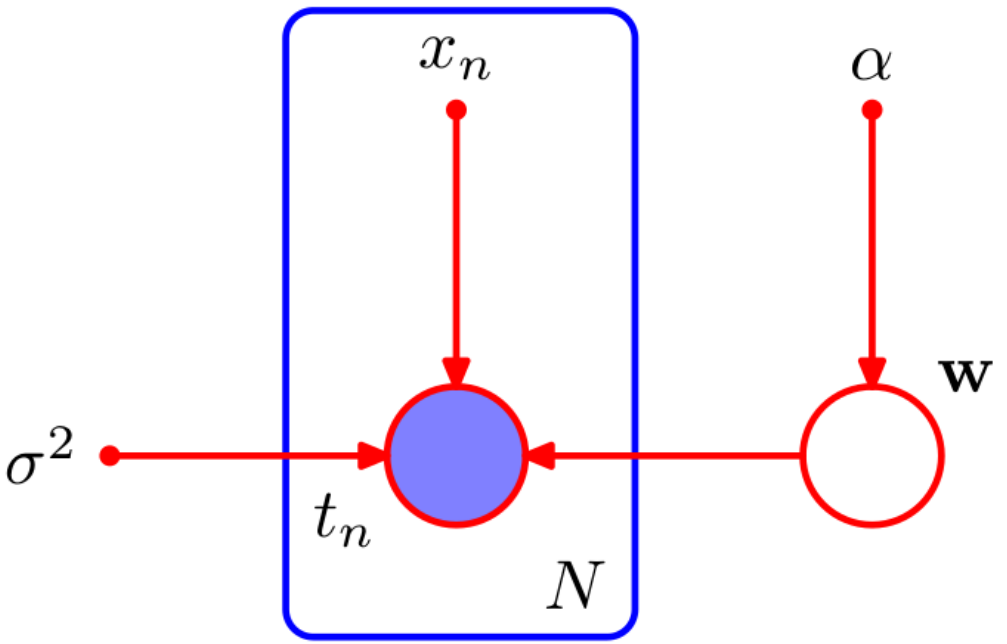
- **Ejercicio**: demostrar que si consideramos una distribución a priori infinitamente ancha, $(S_0 = \alpha^{-1} I, \alpha \to 0)$, la media (moda) de la distribución a posteriori converge a la solución de máxima verosimilitud dada por

$$w_{ML} = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \boldsymbol{t}$$

Enfoque Bayesiano (4)

- Consideremos el caso de distribución a priori isotrópica de media 0.

$$p(w|\alpha) = \mathcal{N}(w|0, \alpha^{-1}I)$$



Enfoque Bayesiano (4)

- **Ejercicio:** demostrar que maximizar el log-posterior con respecto a w, equivale a encontrar el estimador de máxima verosimilitud de los pesos del problema de regresión con regularización $L2$.

- En el caso bajo consideración, podemos escribir el log-posterior como la suma del log-prior y la log-verosimilitud.

$$-\frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{N}\left\{t_n - w^\top \phi(x_n)\right\}^2 - \frac{\alpha}{2}w^\top w + \text{cte}$$

- Maximizar este posterior es equivalente a encontrar la solución de regresión ridge con parámetro de regularización α/β.

Enfoque Bayesiano (5)

- En la práctica, estamos interesados en hacer predicciones del target t asociado a un nuevo input x.
- Esto requiere evaluar la **distribución predictiva a posteriori**

$$p(t|\boldsymbol{t}, \alpha, \beta) = \int p(t|w, \beta) p(w|\boldsymbol{t}, \alpha, \beta) dw$$

- Es fácil probrar que $p(t|\boldsymbol{t}, \alpha, \beta) = \mathcal{N}(t|m_N^\top \phi(x), \sigma_N^2(x))$, con

$$\sigma_N^2(x) = \frac{1}{\beta} + \phi(x)^\top S_N \phi(x)$$

- Dos fuentes de incertidumbre: la asociada al modelo y la asociada al desconocimiento de los w (en el límite de muchos datos esta última es cero).
- **Ojo**: la distribución predictiva a posteriori no siempre puede calcularse analíticamente...

Enfoque Bayesiano (6)

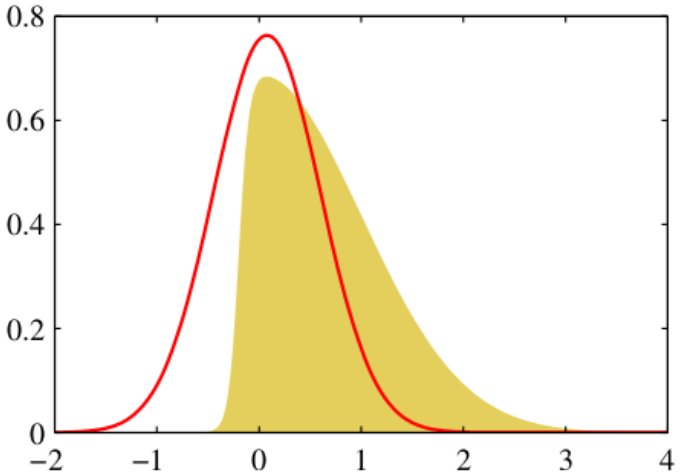
- En todos los casos hemos asumido conocido el valor de la precisión β.
- Si fuese desconocido, deberíamos poner un prior sobre w, β.
- Eligiendo una distribución Gaussiana-Gamma, se mantiene la conjugación.
- En este caso la distribución predictiva es una t de Student.
- Si también queremos asignar un prior al parámetro α (hiperprior), debemos recurrir a técnicas de inferencia aproximada.

Clasificación Bayesiana

Regresión Logística Bayesiana (1)

- Más complicado que el caso de regresión debido a la no-linealidad de la sigmoide.
- Debemos utilizar algún tipo de aproximación del posterior: **aproximación de Laplace**.
  - Queremos aproximar cierta distribución $p(z) = \frac{1}{Z} f(z)$.
  - Aproximamos mediante una Normal $q(z)$ centrada en la moda de $p(z)$: buscamos z_0 tal que $\nabla_z f(z)|_{z=z_0} = 0$.
  - Desarrollamos en Taylor hasta orden 2 en z_0: $\log f(z) \approx \log f(z_0) - \frac{1}{2} A (z - z_0)^2$, donde $A = -\nabla_z \nabla_z \log f(z)|_{z=z_0}$.
  - Tomando exponenciales $f(z) \approx f(z_0) \exp\{-\frac{A}{2}(z - z_0)^2\}$
  - Normalizando, $q(z) = (\frac{A}{2\pi})^{1/2} \exp\{-\frac{A}{2}(z - z_0)^2\}$ resultando una Normal.

Ejemplo de Aproximación de Laplace



- **Problemas** de la aproximación:
  - Solo se puede aplicar directamente a **variables reales** (si no, hay que reparametrizar).
  - Falla al describir propiedades globales de la distribución aproximada.

Regresión Logística Bayesiana (2)

- Particularizándolo al caso de regresión logística,
- El prior es Gaussiano: $p(w) = \mathcal{N}(w|m_0, S_0)$.
- Para el posterior, $p(w|t) \propto p(w)p(t|w)$, y tomando logaritmos queda

$$\log p(w|t) = -\frac{1}{2}(w - m_0)^\intercal S_0^{-1}(w - m_0) + \sum_{n=1}^{N}\{t_n \log y_n + (1 - t_n)\log(1 - y_n)\} + C$$

- donde $y_n = \sigma(w^\intercal \phi_n)$
- Para usar Laplace, obtenemos el punto w_{MAP}, que será la media de la Gaussiana.
- La precisión será $S_N = -\nabla\nabla \log p(w|t) = S_0^{-1} + \sum_{n=1}^{N} y_n(1 - y_n)\phi_n\phi_n^\intercal$
- Con lo que $p(w|t) \approx q(w) = \mathcal{N}(w|w_{MAP}, S_N)$.

Distribución predictiva

- Dado un nuevo input $\phi = \phi(x)$, queremos predecir su clase:

$$p(C_1|\phi, t) = \int p(C_1|\phi, w)p(w|t)dw \approx \int \sigma(w^\intercal \phi)q(w)dw$$

- Esta integral no es analítica, luego tenemos dos opciones:
- **Aproximación por MC**: $p(C_1|\phi, t) \approx \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} p(C_1|\phi, w^{(k)}), \qquad w^{(k)} \sim q(w).$
- **Aproximación analítica**: en lugar de sigmoide usamos la función probit, ya que $\sigma(a) \approx \Phi(\lambda a)$ y su convolución respecto a la Gaussiana es analítica (otra probit)

$$\int \Phi(\lambda a)\mathcal{N}(a|\mu, \sigma)da = \Phi\left(\frac{\mu}{(\lambda^{-2} + \sigma^2)^{1/2}}\right)$$

- Tras unos ajustes, queda que

$$p(C_1|\phi, t) \approx \sigma(\kappa(\sigma^2)\mu)$$

- donde $\mu = w_{MAP}^\intercal \phi$, $\sigma = \phi^\intercal S_N \phi$ y $\kappa(\sigma^2) = (1 + \pi\sigma^2/8)^{-1/2}$.

Inferencia Aproximada

Introducción

- Un tarea central de la estadística Bayesiana es encontrar la distribución a posteriori $p(Z|X)$, así como valores esperados respecto a esta distribución.
- Z son variables latentes y X variables observadas.
- En muchos modelos, esta tarea es **inviable**:
    1. **Variables contínuas**: las integrales resultantes no tienen solución analítica. La alta dimensionalidad del espacio no permite el uso de muchas técnicas numéricas.
    2. **Variables discretas**: marginalizar requiere sumar sobre todas las posibles combinaciones de variables ocultas, que pueden crecer exponencialmente.

Introducción

- En estos casos debemos recurrir a **inferencia aproximada**
- Dos clases de inferencia aproximada.

    1. Técnicas **estocásticas** (MCMC). Asintóticamente **exactas**. La aproximación viene de no tener tiempo computacional infinito. **Costosas computacionalmente.**

    2. Técnicas **deterministas** (VI). Aproximaciones analíticas a la distribución a posteriori. **Nunca** son exactas. **Eficientes**.

Markov Chain Monte Carlo

Repaso de Monte Carlo

- El objetivo de los métodos Monte Carlo es el de calcular **esperanzas** con respecto a cierta distribución $p(z)$

$$\mathbb{E}\left[f(z)\right] = \int_{\mathcal{Z}} f(z)p(z)dz$$

- **Idea**: obtenemos una **muestra finita** $z^{(l)}, l = 1, \ldots, L$ de $p(z)$, por lo que podemos aproximar mediante

$$\mathbb{E}\left[f(z)\right] \approx \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} f(z^{(l)})$$

- ¿Qué hacer cuando no podemos muestrear directamente de $p(z)$?
  - Muestreo por rechazo (**rejection sampling**): no es muy general.
  - Muestreo por importancia (**importance sampling**): solo para calcular integrales, no permite obtener muestras directamente: con lo que si queremos cambiar la $f(z)$, hay que repetir todo desde 0 (costoso).
  - **Markov Chain Monte Carlo (MCMC)**: general y obtiene muestras directamente.

MCMC: fundamentos

- **Objetivo**: obtener muestras de $p(z)$.
- **Asumimos**: sabemos evaluar $p(z)$ salvo constante de proporcionalidad.
  - Es decir, basta con saber evaluar $\tilde{p}(z) = Zp(z)$.
- **Idea**: generar muestras de una cadena de Markov cuya distribución invariante (límite) sea $p(z)$.
- **Esquema general**:
  1. A partir de la muestra actual $z^{(\tau)}$, generar una muestra *candidata* mediane una distribución (**proposal**), $z^* \sim q(z|z^{(\tau)})$.
  2. Aceptamos la candidate mediante algún criterio.
  3. Si es aceptada, $z^{(\tau+1)} = z^*$. Si no, $z^{(\tau+1)} = z^{(\tau)}$, e iteramos.
  - Las muestras $z^{(1)}, z^{(2)}, \ldots$ forman una cadena de Markov.

Algoritmo de Metropolis

- El proposal tiene que ser simétrico: $q(z_A|z_B) = q(z_B|z_A)$.
- Aceptamos la muestra con probabilidad

$$A(z^*, z^{(\tau)}) = \min(1, \frac{\tilde{p}(z^*)}{\tilde{p}(z^{(\tau)})})$$

- Típicamente, $q(z|z^{(\tau)}) \sim \mathcal{N}(z|z^{(\tau)}, \sigma)$ (Random Walk Metropolis)
- Visualización interactiva en https://chi-feng.github.io/mcmc-demo/app.html#RandomWalkMH,banana.

¿Por qué funciona Metropolis?

- Un proceso estocástico $z^{(1)}, z^{(2)}, \ldots$ es una **cadena de Markov** si verifica

$$p(z^{(m+1)}|z^{(m)}, z^{(m-1)}, \ldots z^{(1)}) = p(z^{(m+1)}|z^{(m)})$$

- Una cadena de Markov homogénea viene especificada por la distribución inicial y las **probabilidades de transición** (T no cambia con m):

$$T(z^{(m)}, z^{(m+1)}) = p(z^{(m+1)}|z^{(m)})$$

- Una distribución $p^*(z)$ queda invariante bajo la cadena si

$$p^*(z) = \sum_{z'} T(z', z) p^*(z')$$

- Una condición suficiente para que $p^*(z)$ sea invariante es **eligiendo** T de forma que satisfaga la condición de **balance detallado**

$$p^*(z) T(z, z') = T(z', z) p^*(z')$$

¿Por qué funciona Metropolis?

- Ahora bien, tomamos (z es la última muestra y z' es la muestra propuesta)

$$T(z, z') = p(z'|z) = A(z', z)q(z'|z)$$

- por lo que de imponer la condición, queda que

$$\frac{A(z', z)}{A(z, z')} = \frac{p(z')}{p(z)} \frac{q(z|z')}{q(z'|z)}$$

donde el último factor desaparece (pues era **simétrico**), y una tasa de aceptación que satisface lo anterior es

$$A(z', z) = \min(1, \frac{p(z')}{p(z)})$$

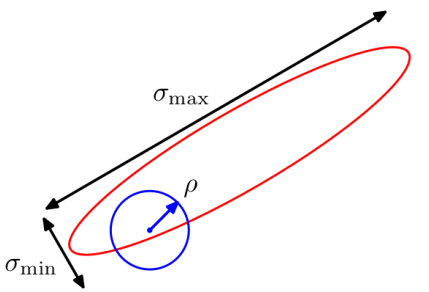
Algoritmo de Metropolis-Hastings

- Generalización que permite el uso de **cualquier proposal**.
- Ahora aceptaremos una muestra con probabilidad:

$$A(z^*, z^{(\tau)}) = \min(1, \frac{p(z^*)q(z^{(\tau)}|z^*)}{p(z^{(\tau)})q(z^*|z^{(\tau)})})$$

Efecto de hiperparámetros

- Si el proposal es $q(z|z^{(\tau)}) \sim \mathcal{N}(z|z^{(\tau)}, \rho)$, valores **bajos** de ρ hacen que la tasa de aceptación sea alta, pero explore muy lentamente. Valores **altos** de ρ provocan que se explore más regiones del espacio, a costa de aumentar las muestras rechazadas.



Gibbs sampling (1)

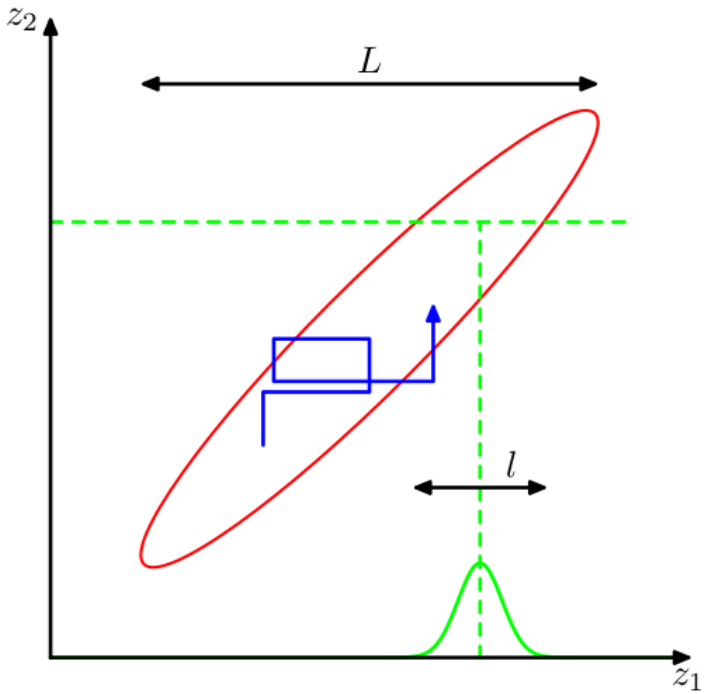
- Caso especial de Metropolis-Hastings, utilizado cuando
  - El objetivo es multidimensional: $p(z) = p(z_1, \ldots, z_M)$.
  - Se conocen las marginales condicionadas $p(z_i | z_{\setminus i})$.
- **Esquema general**: iremos iterando muestras de cada una de las distribuciones condicionales anteriores.

Gibbs sampling (2)

- **Ejemplo**: supongamos que la distribución objetivo es $p(z) = p(z_1, z_2, z_3)$.
- En la iteración i, hemos obtenido por muestreo valores $z_1^{(i)}, z_2^{(i)}, z_3^{(i)}$.
- Obtenemos nuevas muestras $z_1^{(i+1)}, z_2^{(i+1)}, z_3^{(i+1)}$ mediante:
  - $z_1^{(i+1)} \sim p(z_1 | z_2^{(i)}, z_3^{(i)})$.
  - $z_2^{(i+1)} \sim p(z_2 | z_1^{(i+1)}, z_3^{(i)})$.
  - $z_3^{(i+1)} \sim p(z_3 | z_1^{(i+1)}, z_2^{(i+1)})$.
- Si en lugar de muestrea tomamos la moda de cada condicional, obtenemos el algoritmo de **modas condicionadas iteradas (ICM)**.

Gibbs sampling (3)

- **Ejemplo** : Gaussiana bidimensional, e iteraciones del Gibbs sampler



- **Problema**: avance **lento** si hay muchas correlaciones entre variables.

Hamiltonian Monte Carlo (HMC)

- ¿Podemos mejorar el camino aleatorio de la cadena?
- ¿Además de aliviar el problema del tamaño del paso en Metropolis-Hastings?
- **Intuición**: hasta ahora solo hemos utilizado $p(z)$ (o condicionales suyas). ¿Por qué no utilizar también la información del gradiente $\nabla \log p(z)$?
- También conocido como Hybrid Monte Carlo, HMC es adecuado para **espacios continuos**:
  - Permite dar grandes saltos en el espacio.
  - Baja tasa de muestras rechazadas.
  - Necesita evaluar el gradiente de la logprobabilidad respecto a z.
  - **Se espera que la mejor exploración (mayor muestra efectiva) compense el coste computacional de evaluar el gradiente**.

Hamiltonian Monte Carlo (2)

- El objetivo es obtener muestras de $p(z) = \frac{1}{Z}\exp\{-E(z)\}$.
- $E(z)$ se interpreta como **energía potencial** en el estado z.
- ¿Qué ocurre si sólo imponemos la siguiente dinámica (**descenso por el gradiente**)?

$$z^{(t+1)} = z^{(t)} - \eta \nabla_z E(z^{(t)})$$

- Nos quedariamos en el MAP. No basta solo con eso, hay que añadir estocasticidad para que explore toda la región $p(z)$
- Para ello, añadimos un término de **energía cinética**, añadiendo **variables auxiliares de momento** r.

$$p(z, r) = \frac{1}{Z}\exp\{-E(z) - K(r)\} = \frac{1}{Z}\exp\{-H(z, r)\}$$

- donde $K(r) = \frac{1}{2} r^\intercal r$ (ruido Gaussiano).

Hamiltonian Monte Carlo (3)

- La dinámica del Hamiltoniano preserva la cantidad $H(z, r)$ a lo largo de las trayectorias, luego también dejará invariante la distribución $p(z, r)$.

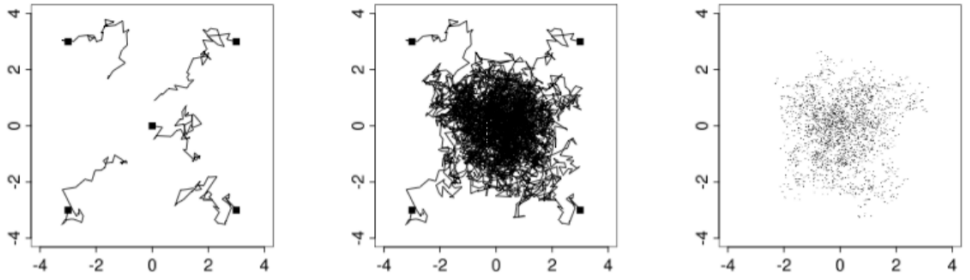
$$\frac{dz}{dt} = +\nabla_r H$$
$$\frac{dr}{dt} = -\nabla_z H$$

- Es delicado discretizar numéricamente la anterior ODE, hay que tener en cuenta errores numéricos:
- Se corrigen aceptando bajo probabilidad

$$\min(1, \exp\{H(z, r) - H(z', r')\})$$

- Conviene ir remuestreando el momeno r cada pocas iteraciones.
- Ejemplo de visualización: https://chi-feng.github.io/mcmc-demo/app.html#HamiltonianMC,donut
- Versión adaptativa (tamaño del paso) mucho más eficiente: **No U-Turn Sampler** https://arxiv.org/abs/1111.4246

Convergencia (1)



- Conviene utilizar varias cadenas partiendo de condiciones iniciales aleatorias:
  - Izquierda: 50 iteraciones.
  - Centro: 1000 iteraciones.
  - Derecha: muestras tras descartar la primera mitad de cada cadena (**burn-in**).
  - También se puede tomar 1 muestra cada $n > 1$ iteraciones para reducir autocorrelaciones (**thining**).

Convergencia (2)

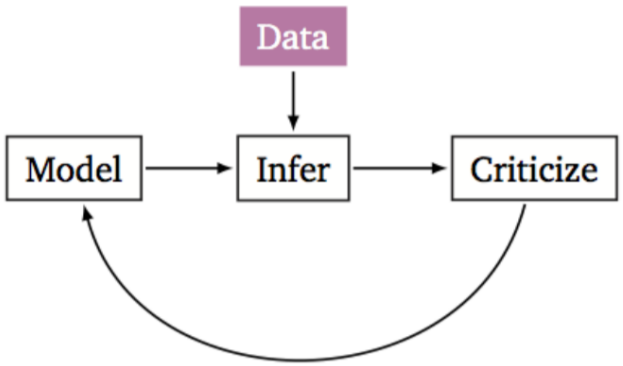
Algunos test para diagnosticar la convergencia y el rendimiento son:

- Estadístico $\hat{R}$ (Potencial Scale Reduction)
  - Sumariza correlaciones intra-cadena y entre cadenas, para una variable del modelo.
  - $\hat{R} >> 1$: no hay convergencia.
  - $\hat{R} \approx 1$: no la garantiza.
- Tamaño de muestra efectiva N_{eff}:
  - Corrige el número total de muestras para tener en cuenta la autocorrelación.
  - Caso peor: $z^{(1)} = z^{(2)} = \ldots = z^{(N)}$, $N_{eff} = 1$.
  - La precisión de la estimación será proporcional a $\frac{1}{\sqrt{N_{eff}}}$.

Extra: breve intro a Stan

Stan como PPL

- Lenguajes de **programación probabilística** (PPL): extensión de un lenguaje de programación normal con nuevas operaciones como **sample** ($\sim$) y **condicionar**.
- Separación entre **modelo** e **inferencia**, permitiendo automatizar el siguiente ciclo (propuesto por Box):



- Mucho desarollo en los últimos años, aunque todavía experimentales
- En R, el más popular y estable es **rStan**: https://mc-stan.org/users/interfaces/rstan

Flujo de trabajo con un PPL

1. Escribir el **modelo probabilístico** (priores + verosimilitudes).
2. Ejecutar el **motor de inferencia** (MCMC, VI, MAP, ...).
3. Diagnosticar la **convergencia**.
4. Realizar la **inferencia** (muestras del posterior).

Modelos en Stan

- Se escriben en un mini-lenguaje (DSL) simple (no en R) para que posteriormente puedan ser compilados a C.
- Especificamos **parámetros** y **variables latentes**.

```
data {
  int<lower=0> N;
  vector[N] x;
  vector[N] y;
}
parameters {
  real alpha;
  real beta;
  real<lower=0> sigma;
}
model {
   y ~ normal(alpha + beta * x, sigma);
}
```

Motores de inferencia en Stan

- HMC/NUTS

```
fit1 <- stan(
  file = "schools.stan",  # Stan program
  data = schools_data,    # named list of data
  chains = 4,             # number of Markov chains
  warmup = 1000,          # number of warmup iterations per chain
  iter = 2000,            # total number of iterations per chain
  cores = 4               # number of cores (could use one per chain)
)
```

- VI (**V**ariational **B**ayes, siguiente capítulo)

```
s8 <- stan_model(file = '8schools.stan')
fit_vb <- vb(
  s8,
  data = schools_dat,     # data list
  algorithm = "meanfield", # type of VI
  output_samples = 2000   # samples from the posterior
  )
```

Diagnósticos en Stan

```
> print(fit)  # Como Rhat = 1, parece que ha convergido
Inference for Stan model: 8schools.
4 chains, each with iter=2000; warmup=1000; thin=1;
post-warmup draws per chain=1000, total post-warmup draws=4000.

          mean se_mean   sd   2.5%    25%    50%    75%  97.5% n_eff Rhat
mu        7.99    0.15 5.21  -2.02   4.74   7.92  11.17  18.40  1268    1
tau       6.63    0.15 5.51   0.25   2.59   5.38   9.33  19.92  1330    1
```

- También visualizaciones:
  - plot(fit)
  - pairs(fit, pars = c("mu", "tau"))
  - traceplot(fit, pars = c("mu", "tau"), inc_warmup = TRUE, nrow = 2)

Inferencia Variacional

Introducción

- VI convierte la inferencia en un problema de optimización.
- Busca aproximaciones **analíticas** a la distribución a posteriori.
- Basado en *cálculo de variaciones*.
- Optimización de funcionales: encontrar funciones que maximicen o minimicen el funcional.
- En principio, el cálculo de variaciones es exacto. La aproximación nace de restringir el espacio de búsqueda de funciones.
- En el caso de VI, restringiremos el espacio donde buscaremos la distribución a posteriori.

Inferencia Variacional (1)

- Sea un modelo Bayesiano en el que todas las variables desconocidas tienen distribuciones a priori.
- Denotamos con Z al conjunto de estas variables y de las variables latentes.
- X es el conjunto de variables observadas.
- El modelo probabilístico define $p(X, Z)$.
- **Objetivo**: encontrar $p(Z|X)$, lo que requiere encontrar

$$p(X) = \int p(X, Z) dZ$$

- Idea

$$\arg\min_{q(Z)} KL(q(Z)||p(Z|X))$$

- $q(Z) = p(Z|X)$, no ganamos nada...

Inferencia Variacional (2)

- Alternativa: restringir espacio de búsqueda a familia de distribuciones $\mathcal{Q}$

$$\arg \min_{q(Z) \in \mathcal{Q}} KL(q(Z)||p(Z|X))$$

- $\mathcal{Q}$ ha de ser **suficientemente flexible** para ofrecer buenas aproximaciones, y al mismo tiempo **suficientemente simple** para ser tratable computacionalmente.

Inferencia Variacional (3)

- Sabemos que

$$KL[q(Z)||p(Z|X)] = -\int q(Z) \log \left[\frac{p(Z|X)}{q(Z)} \right] dZ$$

- Que podemos escribir como

$$KL[q(Z)||p(Z|X)] = \mathbb{E}[\log q(Z)] - \mathbb{E}[\log p(X, Z)] + \log p(X)$$

- Evaluar la función objetivo requiere calcular $p(X)$!!
- Minimizar la KL es equivalente a maximizar

$$ELBO(q) = \mathbb{E}[\log p(X, Z)] - \mathbb{E}[\log q(Z)]$$

Inferencia Variacional (4)

- Podemos escribir

$$ELBO(q) = \mathbb{E}[\log p(X|Z)] - KL[q(Z)||p(Z)]$$

- Maximizar el ELBO favorece a densidades que ponen masa en configuraciones que explican los datos (primer término), y al mismo tiempo a densidades cercanas a la distribución a priori (segundo término).

- Además

$$\log p(X) = KL[q(Z)||p(Z|X)] + ELBO(q)$$

- Con lo que $\log p(X) \geq ELBO(q)$.

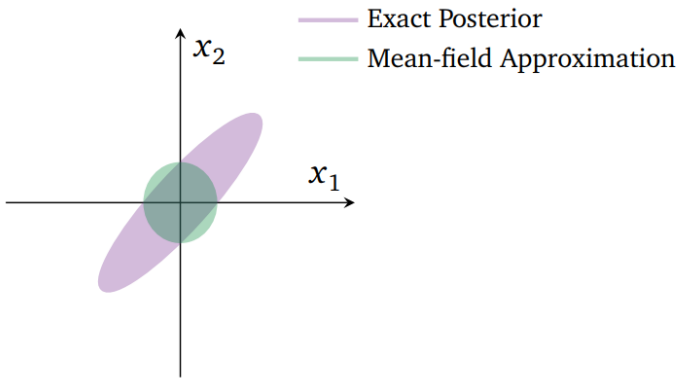
- Esto explica que se haya usado $ELBO$ para selección de modelos (como aproximador de la verosimilutud marginal).

Aproximación de campo medio

- Es una forma de restringir el espacio de búsqueda
- Consiste en particionar los elementos de Z en grupos disjuntos Z_i con $i = 1, \ldots, M$, y asumir

$$q(Z) = \prod_{i=1}^{M} q_i(Z_i)$$

- Suele subestimar la varianza a posteriori...



Aproximación de campo medio. CAVI

- Algoritmo para maximizar ELBO bajo la aproximación de campo medio.
- Coordinate Ascent Variational Inference: actualiza cada factor de la densidad, manteniendo el resto de factores constante.
- Converge a óptimo local.
- Si fijamos todas las variables latentes menos Z_j, entonces el $q_j(Z_j)$ óptimo es

$$q_j^*(Z_j) \propto \exp\left[\mathbb{E}_{-j} \log p(Z_j | Z_{-j}, X)\right]$$

- Que es lo mismo que

$$q_j^*(Z_j) \propto \exp\left[\mathbb{E}_{-j} \log p(Z_j, Z_{-j}, X)\right]$$

CAVI: Algoritmo

1. Inicializar los factors $q_i(Z_i)$

2. Actualizar cada factor utilizando

$$q_j^*(Z_j) \propto \exp\left[\mathbb{E}_{-j} \log p(Z_j | Z_{-j}, X)\right]$$

3. Repetir paso 2 hasta convergencia.

- Nota: cuando se da la **conjugación condicional**, entonces las condicionales completas de cada variable $p(Z_j | Z_{-j}, X)$ se pueden escribir de forma analítica y la regla de actualización es muy sencilla.

CAVI: Demostración

- Podemos escribir el ELBO como

$$\begin{aligned} ELBO(q) &= \mathbb{E}[\log p(X, Z)] - \mathbb{E}[\log q(Z)] \\ &= \mathbb{E}_j \left[\mathbb{E}_{-j} \left[\log p(Z_j, Z_{-j}, X) \right] \right] - \mathbb{E}_j \left[\log q_j(Z_j) \right] + \text{cte} \end{aligned}$$

- Vemos que esta expresión es, salvo constante, menos la divergencia KL entre $q_j(Z_j)$ y $q_j^*(Z_j)$.

- Por tanto, maximizaremos el ELBO, escogiendo $q_j(Z_j) = q_j^*(Z_j)$.

Inferencia Variacional Estocástica

- CAVI no escala a datos masivos, pues en cada iteración requiere evaluar todo el dataset.
- Alternativa: optimización estocástica del ELBO basada en el gradiente.
- Requiere calcular una estimación ruidosa (insesgada) del gradiente del ELBO.
- Para calcular esta estimación, no es necesario evaluar todos los datos.
- Variational Inference: A Review for Statisticians.

Automatic Differentiation Variational Inference

- Otra posibilidad es **ADVI**.
- Aproxima usando MC tanto el ELBO como su derivada para una forma paramétrica particular de la familia variacional (normal full-rank o mean field).
- Requiere que sea sencillo muestrear de $q(Z)$.
- Es la que usa STAN.
- Automatic Differentiation Variational Inference.