1 Введение

Вариационные байесовские методы - это семейство очень популярных методов в статистическом машинном обучении. Я постараюсь представить основные идеи вариационной нижней границы.

2 Вариационная нижняя оценка

2.1 Постановка задачи

Предположим, что X — это наши наблюдения (данные), а Z — скрытые переменные. Обратим внимание, что скрытые переменные могут включать «параметры». Взаимосвязь этих двух переменных может быть представлена с помощью следующей графической модели (рисунок 1).

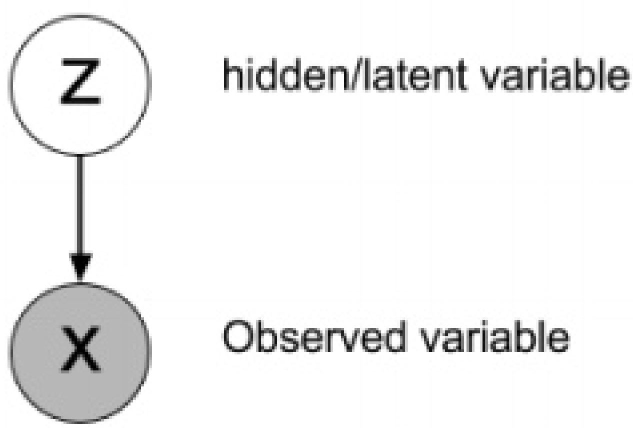

Рис. 1: Графическое представление

Пусть $P(X)$ обозначает распределение вероятностей X, а строчная буква $p(X)$ — это функция плотности распределения X. Тогда апостериорное распределение скрытых переменных можно записать следующим образом, используя теорему Байеса:

$$p(Z|X) = \frac{p(X|Z)p(Z)}{p(X)} = \frac{p(X|Z)p(Z)}{\int_Z p(X,Z)}$$

2.2 Первый вывод: неравенство Йенсена

Пусть $L(X)$ логарифм обоснованности X. Тогда начиная с него можем вывести:

$$L(X) = \log p(X) = \log \int\limits_Z p(X,Z) = \log \int\limits_Z p(X,Z)\frac{q(Z)}{q(Z)} =$$

$$= \log \left(\mathbb{E}_q \left[\frac{p(X,Z)}{q(Z)} \right] \right)$$

$q(Z)$ в выводе — это распределение, которое мы используем для аппроксимации истинного апостериорного распределения $p(Z|X)$. Здесь мы можем рассматривать его как произвольное распределение, поэтому наш вывод все еще в силе.

Теперь воспользуемся неравенством Йенсена $f(\mathbb{E}[X] \geq \mathbb{E}[f(X)]$ для вогнутой функции логаримфа.

$$\log\left(\mathbb{E}_q\left[\frac{p(X,Z)}{q(Z)}\right]\right) \geq \mathbb{E}_q\left[\log\frac{p(X,Z)}{q(Z)}\right] = \mathbb{E}_q\left[\log p(X,Z)\right] - \mathbb{E}_q\left[\log q(Z)\right] =$$
$$= \mathbb{E}_q\left[\log p(X,Z)\right] + H(Z),$$

где $H(Z)$ — это энтропия Шеннона.

$$L = \mathbb{E}_q\left[\log p(X,Z)\right] + H(Z)$$

Тогда очевидно, что L является нижней границей логарифмической вероятности X. То есть получили, что в случаях когда мы хотим максимизировать маргинальную вероятность, мы можем вместо этого максимизировать вариационную нижнюю оценку L.

2.3 Второй вывод: дивергенция Кульбака-Лейблера

В предыдущем параграфе мы не уделяли достаточно внимания распредлению $p(Z)$. Хотя на самом деле это распредление является основной мотивацией вариационных методов. Чаще всего апостериорное распределение $p(Z|X)$ трудновычислимо. Например, нам необходимо проинтегрировать все конфигурации скрытых переменных, чтобы сосчитать знаменатель.

Основная идея вариационных методов состоит в том, чтобы найти некоторое аппроксимационное распределение $q(Z)$, максимально приближенное к истинному апостериорному распределению $p(Z|X)$. Это аппроксимационное распределение может иметь свои вариационные параметры: $q(Z|\Theta)$. Основная цель настроить параметры так, чтобы q стало как можно ближе к интересующему апостериорному распределению.

Очевидно, что распределение $q(Z)$ должно быть хорошо известным нам и соответсвенно более простым для вычислений.

Для измерения близости двух распределений $q(Z)$ и $p(Z|X)$ используется общая метрика — дивергенция Кульбака-Лейблера. Тогда распишем дивергенцию в нашем случае:

$$KL[q(Z)||p(Z|X)] = \int_Z q(Z)\log\frac{q(Z)}{p(Z|X)} = -\int_Z q(Z)\log\frac{p(Z|X)}{q(Z)} =$$
$$= -\left(\int_Z q(Z)\log\frac{p(X,Z)}{q(Z)} - \int_Z q(Z)\log p(X)\right) =$$
$$-\int_Z q(Z)\log\frac{p(X,Z)}{q(Z)} + \log p(X)\int_Z q(Z) =$$
$$= L + \log p(X),$$

где L — нижнняя вариационая оценка, которую мы уже получили. Переставим слагаемые получим:

$$L = \log p(X) - KL[q(Z)||p(Z|X)]$$

Так как дивергенция Кульбака Лейблера всегда неотрицательная, мы снова получаем, что $L \leq \log p(X)$, то есть является нижней вариационной оценкой. И мы также теперь знаем, что разница между ними равна дивергенции Кульбака-Лейблера между апроксимационным и истинным распредлением. Другими словами, мы доказали, что нижняя вариационная оценка совпадает с обоснованностью тогда и только тогда, когда апроксимирующее распредление приближает истинное идеально.

References

Yang, Xitong. "Understanding the Variational Lower Bound". Institute for Advanced Computer Studies. University of Maryland. Retrieved 20 March 2018.

Minka, Thomas (2005), Divergence measures and message passing.

Bishop, Christopher M. (2006), "10.1 Variational Inference"Pattern Recognition and Machine Learning