Теоретическое задание по вариационному выводу

Солоткий Михаил, 417 группа ВМК МГУ

6 ноября 2018 г.

Пусть $X = \{x_1, \dots, x_N\}, x_n \in \mathbb{R}^D$ — независимая выборка из смеси распределений Стьюдента

$$p(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{T}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k, \nu), \quad w_k \ge 0, \ \sum_j w_j = 1.$$
 (1)

Рассмотрим следующую вероятностную модель со скрытыми переменными:

$$p(X, T, Z | \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma, \nu) = \prod_{n,k=1}^{N,K} \left[w_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n | \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k / z_n) \mathcal{G}(z_n | \nu / 2, \nu / 2) \right]^{t_{nk}}.$$
 (2)

Здесь $t_{nk} \in \{0,1\}$, $\sum_j t_{nj} = 1$ обозначает принадлежность n-го объекта k-ой компоненте смеси. Очевидно, что неполное правдоподобие $p(X|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\mu},\Sigma,\nu)$ для модели (2) совпадает с правдоподобием выборки X для смеси (1). Поэтому оценки максимального правдоподобия $w_{ML,k}, \mu_{ML,k}, \Sigma_{ML,k}$ для смеси (1) можно искать с помощью вариационного EM-алгоритма для модели (2), в котором на E-шаге апостериорное распределение приближается в семействе

$$q_T(T)q_Z(Z) \approx p(T, Z|X, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma, \nu).$$

Для выполнения задания требуется:

- 1. Выписать формулы пересчёта для компонент вариационного приближения $q_T(T)$ и $q_Z(Z)$;
- 2. Выписать формулы пересчёта параметров w_k, μ_k, Σ_k на М-шаге. Убедиться, что эти формулы переходят в соответствующие формулы с семинара по ЕМ-алгоритму для случая K=1;
- 3. Расписать функционал $\mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ нижнюю оценку на $\log p(X|\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma, \nu)$;
- 4. Найти формулы для статистик распределений $q_T(T)$ и $q_Z(Z)$, требуемых в предыдущих трёх пунктах.

Решение:

1. После выполнения очередной итерации mean-field аппроксимации распределение q_T останется категориальным (носитель не меняется, оно не сможет стать другим). Т. к. априорное гамма-распределение и нормальная функция правдоподобия сопряжены при переменном множителе в ковариационной матрице, после mean-field аппроксимации q_Z будет гамма-распределением. Функция вероятности априорного распределения на переменные T факторизуется в произведение по объектам: $P(T) = \prod_{n=1}^N P(t_n)$; $P(t_n = k) = w_k$ В результате mean-field аппроксимации $q_T(T)$ по-прежнему будет факторизоваться по объектам (это будет показано дальше). Сейчас выведем формулы для распределения q_Z и покажем, что оно тоже факторизуется по объектам.

$$\begin{split} q_T(T) &= \prod_{n=1}^N q_n(t_n), \text{ где } t_n \text{ - индекс компоненты для n-того объекта;} \\ q_Z(Z) &= \frac{\exp\{\mathbb{E}_{q_T} \ln p(X,T,Z|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\nu)\}}{\int \exp\{\mathbb{E}_{q_T} \ln p(X,T,Z|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\nu)\} dZ} \\ p(X,T,Z|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\nu) &= \prod_{n=1}^N w_{t_n} \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_{t_n},\frac{\boldsymbol{\Sigma}_{t_n}}{z_n}) \mathcal{G}(z_n|\frac{\nu}{2},\frac{\nu}{2}) \\ \ln p(X,T,Z|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\nu) &= \sum_{n=1}^N \ln w_{t_n} + \ln \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_{t_n},\frac{\boldsymbol{\Sigma}_{t_n}}{z_n}) + \ln \mathcal{G}(z_n|\frac{\nu}{2},\frac{\nu}{2}) \end{split}$$

$$\begin{split} \mathbb{E}_{qT} & \ln p(X,T,Z|\mathbf{w},\boldsymbol{\mu},\Sigma,\nu) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \mathbf{w}_k - \frac{ND}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \ln z_n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_n(t_n=k) \ln \mathbf{w}_k + \sum_{n=1}^{N} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \ln z_n - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} q_n(t_n=k) \ln \mathbf{w}_k + \sum_{k=1}^{N} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \mathbf{w}_k + \sum_{k=1}^{K} \sum_{n=1}^{K} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \mathbf{w}_k + \sum_{k=1}^{K} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} \sum_{k=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{K} q_n(t_n=k) \ln \det \Sigma_{t_n} + \\ & + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{$$

2. $q=q_Tq_Z$ $q_T(T)=\prod_{n=1}^N q_n(t_n),$ где t_n - индекс компоненты для n-того объекта;

$$\begin{split} \mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= \mathbb{E}_{q} \ln p(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{Z} | \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\nu}) = \sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}_{q} \left[\ln w_{t_{n}} - \frac{D}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln \det \Sigma_{t_{n}} + \frac{D}{2} \ln z_{n} - \frac{1}{2} z_{n} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{t_{n}})^{T} \Sigma_{t_{n}}^{-1} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{t_{n}}) + \frac{v}{2} \ln \frac{v}{2} - \ln \Gamma(\frac{v}{2}) + \left(\frac{v}{2} - 1\right) \ln z_{n} - \frac{v}{2} z_{n} \right] = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} - \frac{ND}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln \det \Sigma_{k} + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\Gamma'(a_{n})}{\Gamma(a_{n})} - \ln b_{n} \right] - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{k})^{T} \Sigma_{k}^{-1} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{k}) + \frac{Nv}{2} \ln \frac{v}{2} - N \ln \Gamma(\frac{v}{2}) + \left(\frac{v}{2} - 1\right) \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\Gamma'(a_{n})}{\Gamma(a_{n})} - \ln b_{n} \right] - \frac{v}{2} \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} \right] \\ = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{K} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{K} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{K} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{K} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{K} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \lambda_{k} w_{k} - \mu \left(\sum_{k=1}^{N} w_{k} - 1 \right) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \ln w_{k} + \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} q_{n}(k) \\ = \sum_{k=1}^{N} \sum_{k=$$

$$\mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma) \to \max_{\boldsymbol{\mu}}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}_{k}} \mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k) \nabla_{\boldsymbol{\mu}_{k}} [\boldsymbol{x}_{n}^{T} \boldsymbol{\Sigma}_{k}^{-1} \boldsymbol{x}_{n} - 2 \boldsymbol{x}_{n}^{T} \boldsymbol{\Sigma}_{k}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{k} + \boldsymbol{\mu}_{k}^{T} \boldsymbol{\Sigma}_{k}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{k}] = 2 \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k) [-\boldsymbol{\Sigma}_{k}^{-1} \boldsymbol{x}_{n} + \boldsymbol{\Sigma}_{k}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{k}] = 0 \Rightarrow \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k) \boldsymbol{x}_{n} = \sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k) \boldsymbol{\mu}_{k} \Rightarrow \boldsymbol{\mu}_{k} = \frac{\sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k) \boldsymbol{x}_{n}}{\sum_{n=1}^{N} \frac{a_{n}}{b_{n}} q_{n}(k)}$$

$$\mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma) \to \max_{\Sigma}$$

$$\nabla_{\Sigma_k^{-1}} \mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N q_n(k) \left[\nabla_{\Sigma_k^{-1}} \ln \det \Sigma_k^{-1} - \frac{a_n}{b_n} \nabla_{\Sigma_k^{-1}} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \Sigma_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N q_n(k) \left[\Sigma_k - \frac{a_n}{b_n} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \right] = 0 \Rightarrow \Sigma_k = \frac{\sum_{n=1}^N \frac{a_n}{b_n} q_n(k) (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T}{\sum_{n=1}^N q_n(k)}$$

3.
$$q = q_T q_Z$$

 $q_T(T) = \prod_{n=1}^N q_n(t_n)$, где t_n - индекс компоненты для n-того объекта;

$$\mathcal{L}(q, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma) = \mathbb{E}_q \ln p(X, T, Z | \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\mu}, \Sigma, \nu) = \sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}_q \left[\ln w_{t_n} - \frac{D}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln \det \Sigma_{t_n} + \frac{D}{2} \ln z_n - \frac{D}{2} \ln(2\pi) \right]$$

$$\begin{split} & - \frac{1}{2} z_n (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{t_n})^T \Sigma_{t_n}^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{t_n}) + \frac{\nu}{2} \ln \frac{\nu}{2} - \ln \Gamma(\frac{\nu}{2}) + \left(\frac{\nu}{2} - 1\right) \ln z_n - \frac{\nu}{2} z_n \Big] = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(k) \ln w_k - \frac{ND}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_n(k) \ln \det \Sigma_k + \frac{D}{2} \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\Gamma'(a_n)}{\Gamma(a_n)} - \ln b_n \right] - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \frac{a_n}{b_n} \sum_{k=1}^{K} q_n(k) (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T \Sigma_k^{-1} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) + \frac{N\nu}{2} \ln \frac{\nu}{2} - \frac{N}{2} \ln \Gamma(\frac{\nu}{2}) + \left(\frac{\nu}{2} - 1\right) \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\Gamma'(a_n)}{\Gamma(a_n)} - \ln b_n \right] - \frac{\nu}{2} \sum_{n=1}^{N} \frac{a_n}{b_n} \end{split}$$

$$4. \ \mathcal{G}(z_{n}|a_{n},b_{n}) = \frac{b_{n}^{a_{n}}}{\Gamma(a_{n})} z_{n}^{a_{n}-1} e^{-b_{n}z_{n}}$$

$$\mathbb{E}_{z_{n}} z_{n} = \int_{0}^{+\infty} \frac{b_{n}^{a_{n}}}{\Gamma(a_{n})} z_{n}^{a_{n}} e^{-b_{n}z_{n}} dz_{n} = \int_{0}^{+\infty} \frac{b_{n}^{a_{n}+1} \Gamma(a_{n}+1)}{b_{n} \Gamma(a_{n}) \Gamma(a_{n}+1)} z_{n}^{a_{n}} e^{-b_{n}z_{n}} dz_{n} = \frac{a_{n}}{b_{n}} \int_{0}^{+\infty} \frac{b_{n}^{a_{n}+1}}{\Gamma(a_{n}+1)} z_{n}^{a_{n}} e^{-b_{n}z_{n}} dz_{n} = \frac{a_{n}}{b_{n}}$$

$$\mathbb{E}_{z_{n}} \ln z_{n} = \int_{0}^{+\infty} \ln z_{n} \frac{b_{n}^{a_{n}}}{\Gamma(a_{n})} z_{n}^{a_{n}-1} e^{-b_{n}z_{n}} dz_{n} = \left\{ y_{n} = b_{n}z_{n}, z_{n} = \frac{y_{n}}{b_{n}} \right\} = \int_{0}^{+\infty} (\ln y_{n} - \ln b_{n}) \frac{b_{n}^{a_{n}}}{\Gamma(a_{n})} \frac{y_{n}^{a_{n}-1}}{b_{n}^{a_{n}-1}} e^{y_{n}} \frac{1}{b_{n}} dy_{n} = \frac{1}{\Gamma(a_{n})} \int_{0}^{+\infty} y_{n}^{a_{n}-1} e^{-y_{n}} \ln y_{n} dy_{n} - \ln b_{n} = \frac{1}{\Gamma(a_{n})} \frac{d}{da_{n}} \int_{0}^{+\infty} y_{n}^{a_{n}-1} e^{-y_{n}} dy_{n} - \ln b_{n} = \frac{\Gamma'(a_{n})}{\Gamma(a_{n})} - \ln b_{n}$$