

Смесь экспертов^{*}

А. В. Грабовой¹, В. В. Стрижов²

Аннотация:

Ключевые слова: ; .

DOI: 00.00000/0000000000000000

1 Введение

2 Постановка задачи смеси экспертов

Задана выборка:

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times n}, \quad (2.1)$$

где N — количество объектов в выборке, а n — размерность признакового пространства.

Определение 2.1. *Смесь экспертов — мультимодель, определяющая правдоподобие каждой π_k каждой модели \mathbf{f}_k на объекте \mathbf{x} на основе его признакового описания.*

$$\hat{\mathbf{f}} = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathbf{f}_k, \quad \pi_k(\mathbf{x}, \mathbf{V}) : \mathbb{R}^{2 \times n} \rightarrow [0, 1], \quad \sum_{k=1}^K \pi_k(\mathbf{x}, \mathbf{V}) = 1 \quad (2.2)$$

где $\hat{\mathbf{f}}$ — мультимодель, а \mathbf{f}_k является некоторой моделью, π_k — параметрическая модель.

^{*}Работа выполнена при поддержке РФФИ и правительства РФ.

¹Московский физико-технический институт, grabovoy.av@phystech.edu

²Московский физико-технический институт, strijov@ccas.ru

2.1 Общий случай

Правдоподобие модели:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^K [\pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) p_k(y_i | \mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i)]^{z_{ik}} \prod_{k=1}^K p^k(\mathbf{w}_k | \mathbf{A}_k) \quad (2.3)$$

Логарифм правдоподобия модели:

$$\begin{aligned} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K z_{ik} [\log \pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) + \log p_k(y_i | \mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i)] + \\ &+ \sum_{k=1}^K \log p^k(\mathbf{w}_k | \mathbf{A}_k) \end{aligned} \quad (2.4)$$

E-step

Найдем $q(\mathbf{Z})$:

$$\begin{aligned} \log q(\mathbf{Z}) &= \mathbb{E}_{q/\mathbf{Z}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) \\ p(z_{ik} = 1) &= \frac{\exp(\log \pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) + \mathbb{E} \log p_k(y_i | \mathbf{w}_k, \mathbf{A}_k))}{\sum_{k'=1}^K \exp(\log \pi_{k'}(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) + \mathbb{E} \log p_{k'}(y_i | \mathbf{w}'_{k'}, \mathbf{A}'_k))} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Найдем $q(\mathbf{W})$:

$$\begin{aligned} \log q(\mathbf{W}) &= \mathbb{E}_{q/\mathbf{W}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \mathbb{E} z_{ik} [\log \pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) + \log p_k(y_i | \mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i)] + \\ &+ \sum_{k=1}^K \log p^k(\mathbf{w}_k, \mathbf{A}_k) \end{aligned} \quad (2.6)$$

M-step

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_q p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) &= \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}) \\ \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}) &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \mathbb{E} z_{ik} [\log \pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) + \mathbb{E} \log p_k(y_i | \mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i)] \\ &+ \sum_{k=1}^K \mathbb{E} \log p_k(\mathbf{w}_k | \mathbf{A}_k) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Найдем \mathbf{A} из условия:

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}^{-1}} = 0 \quad (2.8)$$

Найдем \mathbf{V} :

Аналитически решение не ищется, поэтому воспользуемся градиентным спуском для максимизации правдоподобия модели:

$$\mathbf{V}^{j+1} = \mathbf{V}^j + \alpha \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{W}, \mathbf{V}^j, \beta)}{\partial \mathbf{V}} \quad (2.9)$$

2.2 Случай $p_k(y_i|\mathbf{X}, \mathbf{w}_k) = \mathbf{N}(y_i|\mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i, \beta^{-1})$

E-step

Для нахождения $q(\mathbf{Z})$ требуется:

$$\mathbb{E} \log p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{A}_k) = -\frac{\beta}{2} (y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k + \mathbf{x}_i^\top (\mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top) \mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} (\log \beta - \log 2\pi) \quad (2.10)$$

Найдем $q(\mathbf{w}_k)$:

$$\begin{aligned} \log q(\mathbf{w}_k) &\propto -\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{w}_k + \beta \sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik} [y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i]^2 \right) \propto \\ &\propto -\frac{1}{2} (\mathbf{w}_k - \mathbf{m}_k)^\top \mathbf{B}_k^{-1} (\mathbf{w}_k - \mathbf{m}_k) \end{aligned} \quad (2.11)$$

где введены обозначения:

$$\mathbf{B}_k = \left(\mathbf{A}_k^{-1} + \beta \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} z_{ik} \right)^{-1}, \quad \mathbf{m}_k = \beta \mathbf{B}_k \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i y_i \mathbb{E} z_{ik} \right). \quad (2.12)$$

M-step

$$\mathbb{E}_q p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta) = \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta).$$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \log p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i) &= -\frac{\beta}{2} (y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k + \mathbf{x}_i^\top (\mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top) \mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} (\log \beta - \log 2\pi) \\ \mathbb{E} \log p_k(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) &= -\frac{1}{2} \mathbb{E} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{w}_k + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A}_k^{-1} - \frac{n}{2} \log 2\pi \end{aligned} \quad (2.13)$$

Найдем β :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta)}{\partial \beta} &= \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\beta} \mathbb{E} z_{ik} - \frac{1}{2} \mathbb{E} z_{ik} [y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k + \mathbf{x}_i^\top \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i] \right) = 0 \\ \frac{1}{\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K [y_i^2 - 2y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k + \mathbf{x}_i^\top \mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i] \mathbb{E} z_{ik} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Найдем \mathbf{A} :

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta)}{\partial \mathbf{A}^{-1}} = \frac{1}{2} \mathbf{A}_k - \frac{1}{2} \mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top = 0 \Rightarrow \mathbf{A}_k^{new} = \text{diag}(\mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top) \quad (2.15)$$

Найдем \mathbf{V} :

Аналитически решение не ищется, поэтому воспользуемся градиентным спуском для максимизации правдоподобия модели:

$$\mathbf{V}^{j+1} = \mathbf{V}^j + \alpha \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{W}, \mathbf{V}^j, \beta)}{\partial \mathbf{V}} \quad (2.16)$$

2.3 Случай $p_k(y_i|\mathbf{X}, \mathbf{w}_k) = \text{Exp}\left(y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i \mid \frac{\beta}{2}\right)$

E-step

Для нахождения $q(\mathbf{Z})$ требуется:

$$\mathbb{E} \log p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{A}_k) = \log \frac{\beta}{2} - \frac{\beta}{2} (y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) \quad (2.17)$$

Найдем $q(\mathbf{w}_k)$:

$$\begin{aligned} \log q(\mathbf{w}_k) &\propto -\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{w}_k + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik} [y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i] \right) \propto \\ &\propto -\frac{1}{2} (\mathbf{w}_k - \mathbf{m}_k)^\top \mathbf{A}_k^{-1} (\mathbf{w}_k - \mathbf{m}_k) \end{aligned} \quad (2.18)$$

где введено обозначения:

$$\mathbf{m}_k = \frac{\beta}{2} \mathbf{A}_k \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \mathbb{E} z_{ik} \right). \quad (2.19)$$

M-step

$$\mathbb{E}_q p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta) = \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta).$$

$$\mathbb{E} \log p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i) = \log \frac{\beta}{2} - \frac{\beta}{2} (y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) \quad (2.20)$$

$$\mathbb{E} \log p_k(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) = -\frac{1}{2} \mathbb{E} \mathbf{w}_k^\top \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{w}_k + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A}_k^{-1} - \frac{n}{2} \log 2\pi$$

Найдем β :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta)}{\partial \beta} &= \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik} \left[\frac{1}{\beta} - \frac{y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i}{2} \right] = 0 \\ \frac{1}{\beta} &= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K (y_i - \mathbf{w}_k^\top \mathbf{x}_i) \mathbb{E} z_{ik} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Найдем \mathbf{A} :

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{A}, \beta)}{\partial \mathbf{A}^{-1}} = \frac{1}{2} \mathbf{A}_k - \frac{1}{2} \mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top = 0 \Rightarrow \mathbf{A}_k^{\text{new}} = \text{diag}(\mathbb{E} \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^\top) \quad (2.22)$$

Найдем \mathbf{V} :

Аналитически решение не ищется, поэтому воспользуемся градиентным спуском для максимизации правдоподобия модели:

$$\mathbf{V}^{j+1} = \mathbf{V}^j + \alpha \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{W}, \mathbf{V}^j, \beta)}{\partial \mathbf{V}} \quad (2.23)$$

3 Вычислительный эксперимент

4 Заключение

Список литературы