RL: Методы оценки апостериорного распределения

Многорукий бандит

Формула Байеса

$$p(\theta \mid x) = \frac{p(x \mid \theta)\, p(\theta)}{p(x)}$$

- Байес для бедных
- Байес для богатых
- Байес для среднего класса

Байес для бедных

$$p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$

$$\theta=\underset{\theta}{argmax}\ln p(\theta|x)=\ln p(x|\theta)+\ln p(\theta)-\ln p(x)$$

- В байесе для бедных, мы можем получить точечную оценку моды апостериорного распределения

Байес для богатых

$$p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$

- Если априорное распределение и правдоподобие лежат в одном функциональном классе, то мы можем получить апостериорное распределение аналитически
- Сопряженное распределение

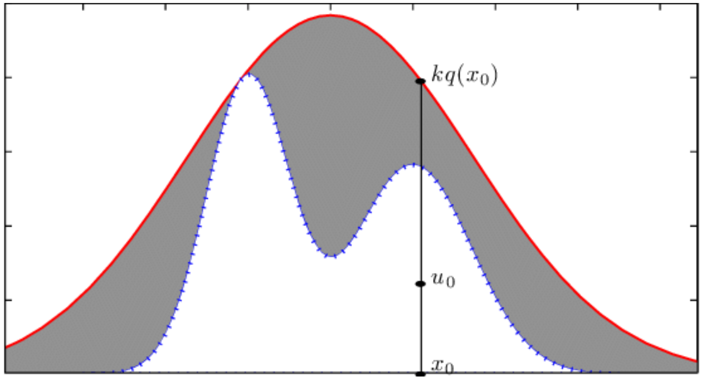
Байес для среднего класса: MCMC

$$p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$

$$I=\int f(x)\,p(x)\,dx=\frac{\sum f(x)}{N}=J \qquad x_n \sim p(x)$$

$$J=N\left(J\,|\,I,\frac{D(f(x))}{N}\right)$$

MCMC: projection sampling



$$kq(x) \geqslant p(x)$$

$$x_0 \sim q(x)$$

$$u_0 \sim U\left[0, kq(x_0)\right]$$

$$x_{n+1} = x_0, \quad u_0 < p(x_0)$$

MCMC: importence sampling

$$E_p f = E_q f \frac{p}{q} \approx \sum f(x_k) \frac{p(x_k)}{q(x_k)}$$

$$p(x) = \frac{\hat{p}(x)}{C} \Rightarrow \int p(x) f(x)\, dx = \frac{\int \hat{p}(x) f(x)\, dx}{C}$$

$$p(x) \approx \frac{\sum f(x_k) \frac{p(x_k)}{q(x_k)}}{\sum \frac{p(x_k)}{q(x_k)}}$$

MCMC: марковские цепи

$$x_1, x_2, \ldots, x_n - МЦ\text{, если } p(x_1, x_2, \ldots, x_n) = p_1(x_1)\, p_2(x_2 | x_1)\, p_2(x_3 | x_2) \ldots p_n(x_n | x_{n-1})$$

$$МЦ \text{ однородна, если } \forall t > 1 \qquad p_t(x' | x) = q(x' | x)$$

$$p_i(x_i) = \int p_i(x_i | x_{i-1})\, p_{i-1}(x_{i-1})\, dx$$

$$p_*(x') = \int q(x' | x)\, p_*(x)\, dx$$

- МЦ называется эргодической, если

$$\exists !\, p_*(x), \forall\, p_i(x_i) \qquad \lim_{n \to \infty} p_n(x_n) = p_*(x)$$

MCMC: марковские цепи

- МЦ называется эргодической, если

$$\exists!\, p_*(x),\ \forall\, p_i(x_i) \qquad \lim_{n\to\infty} p_n(x_n) = p_*(x)$$

$$\text{Если}\ \forall\, x, x' \Rightarrow q(x'|x) > 0 \Rightarrow \text{МЦ с}\ q(x'|x) - \text{эргодичная}$$

MCMC: алгоритм Метрополиса-Гастингса

$$p(x)=\frac{\hat{p}(x)}{C} \qquad x\in R^d$$

$$r(x'|x) - proposed\ distribution$$

$$\forall x, x' \Rightarrow r(x'|x)>0$$

$$x_{n+1}=\left\{\begin{matrix} x'\sim r(x'|x),\ с\ вероятностью\ A(x'|x)=min\left(1,\frac{\hat{p}(x')r(x|x')}{\hat{p}(x)r(x'|x)}\right) \\ x_n \end{matrix}\right\}$$

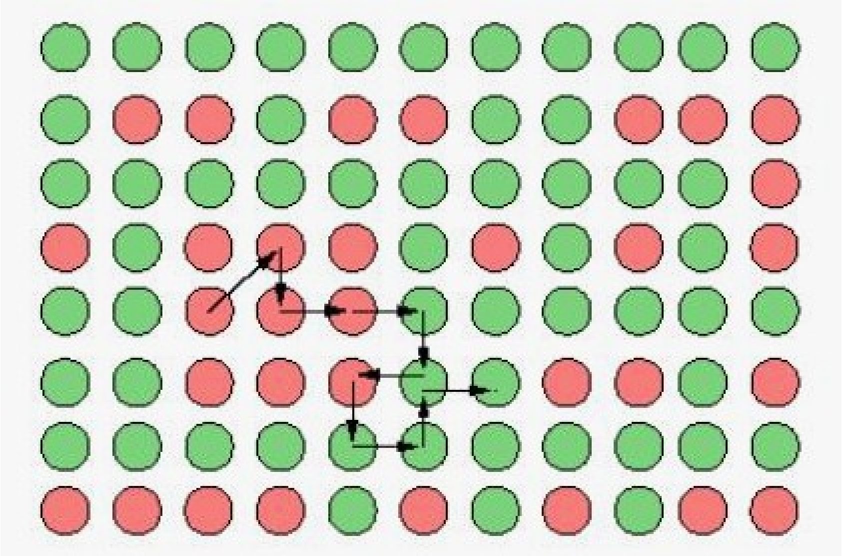
MCMC: sampling Gibbs

$$p\left(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_d^{(k)}\right) \qquad \chi \in R^d$$

$$x_1^{(k+1)} \sim p\left(x_1 | x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \ldots, x_d^{(k)}\right)$$

$$x_2^{(k+1)} \sim p\left(x_2 | x_1^{(k+1)}, x_3^{(k)}, \ldots, x_d^{(k)}\right)$$

$$x_d^{(k+1)} \sim p\left(x_d | x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \ldots, x_{d-1}^{(k+1)}\right)$$



Байес для среднего класса: Вариационные методы
EM алгоритм

$$p(\theta|x) = \frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$

$$p(x|\theta) - \text{сложная}$$

$$p(x,z|\theta) - \text{простая} \qquad p(x|\theta) = \int p(x,z|\theta)\,dz$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы
EM алгоритм

$$\ln p(x|\theta) - \ln p\left(x|\theta^{(m)}\right) \geq 0$$

$$\ln \int p(x,z|\theta)\,dz - \ln p\left(x|\theta^{(m)}\right) = \ln \int p(x|z,\theta)\,p(z|\theta)\,dz - \ln p\left(x|\theta^{(m)}\right) = \dots$$

$$\ln \int \frac{p(x|z,\theta)\,p(z|\theta)}{p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)}\,p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)dz - \ln p\left(x|\theta^{(m)}\right) = \dots$$

$$\ln \int \frac{p(x|z,\theta)\,p(z|\theta)}{p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)p\left(x|\theta^{(m)}\right)}\,p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)dz \geq \int p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)\ln \frac{p(x|z,\theta)\,p(z|\theta)}{p\left(z|x,\theta^{(m)}\right)p\left(x|\theta^{(m)}\right)}\,dz$$

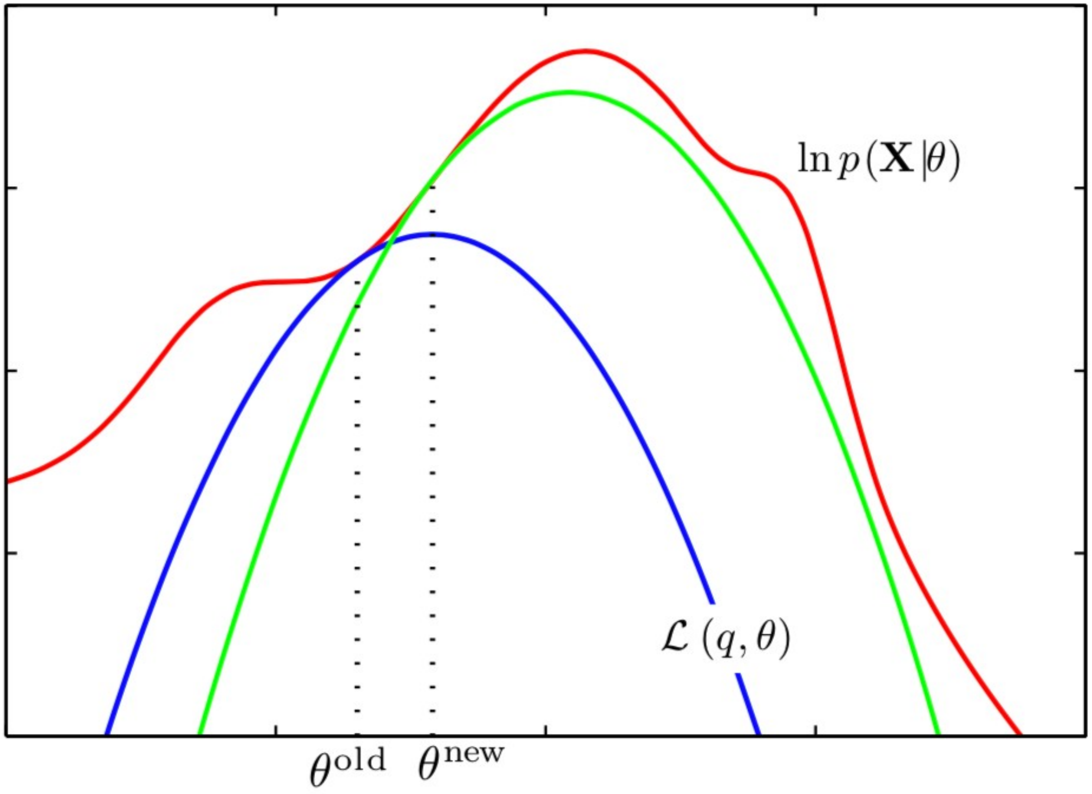
Байес для среднего класса: Вариационные методы
EM алгоритм

$$\ln p(x|\theta) \geq \int p(z|x,\theta^{(m)}) \ln \frac{p(x|z,\theta)\, p(z|\theta)}{p(z|x,\theta^{(m)})\, p(x|\theta^{(m)})} dz$$

$$\int p(z|x,\theta^{(m)}) \ln \frac{p(x|z,\theta)\, p(z|\theta)}{p(z|x,\theta^{(m)})\, p(x|\theta^{(m)})} dz := L(\theta,\theta^{(m)})$$

$$\forall \theta \ \ln p(x|\theta) := l(\theta) \geq L(\theta,\theta^{(m)})$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы
EM алгоритм



Байес для среднего класса: Вариационные методы
ЕМ алгоритм

- Е шаг: оценка матожидания для скрытых переменных

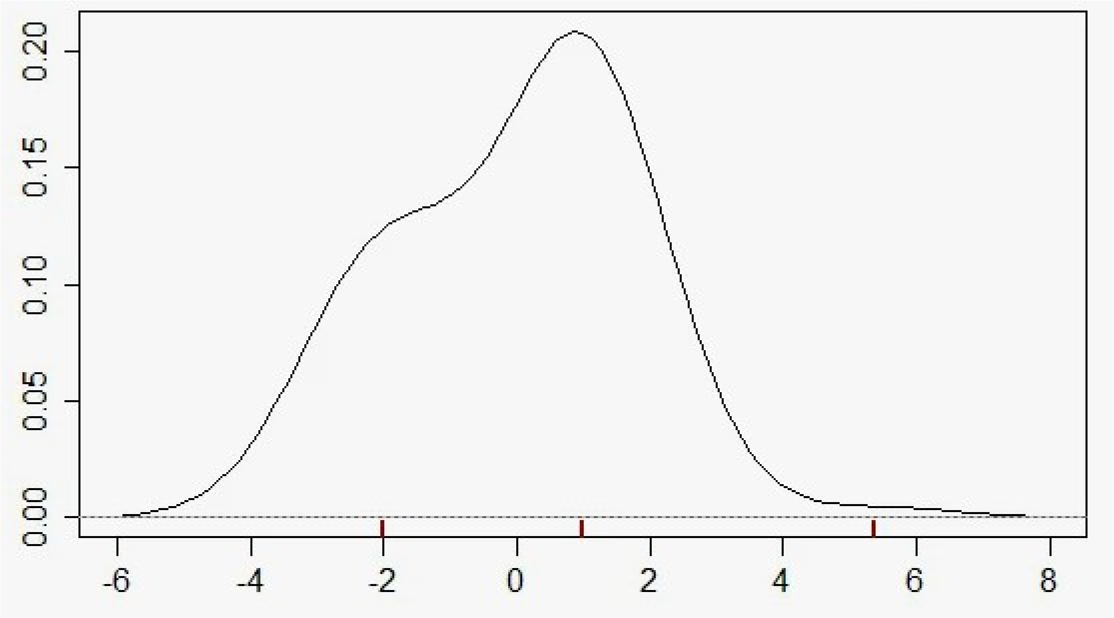
$$L(\theta, \theta^{(m)}) = \int p(z|x, \theta^{(m)}) \ln p(x|z, \theta) p(z|\theta) dz = E_{p(z|x, \theta^{(m)})} \ln p(x|z, \theta) p(z|\theta)$$

- М шаг: максимизация

$$\theta^{(m+1)} = \underset{\theta}{argmax}\, L(\theta, \theta^{(m)})$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы

ЕМ алгоритм. Пример



$$p(x|\theta)=\alpha N(x_n|\mu_1,\sigma_1)+(1-\alpha)N(x_n|\mu_2,\sigma_2)$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы EM алгоритм. Пример

$$p(x_n|\theta) = \alpha\, N(x_n|\mu_1,\sigma_1) + (1-\alpha)\, N(x_n|\mu_2,\sigma_2)$$

$$p(x_n, z_n|\theta) = [\alpha\, N(x_n|\mu_1,\sigma_1)]^{z_n} [(1-\alpha) N(x_n|\mu_2,\sigma_2)]^{1-z_n}$$

$$\ln p(x, z|\theta) = \ln \prod p(x_n, z_n|\theta) = \ldots$$

$$\sum [\ln \alpha + z_n \ln N(x_n|\mu_1,\sigma_1) + \ln(1-\alpha) + (1-z_n) \ln N(x_n|\mu_2,\sigma_2)]$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы
ЕМ алгоритм. Пример

- Е шаг: оценка матожидания для скрытых переменных

$$\sum\left[\ln\alpha+z_n\ln N\left(x_n|\mu_1,\sigma_1\right)+\ln\left(1-\alpha\right)+\left(1-z_n\right)\ln N\left(x_n|\mu_2,\sigma_2\right)\right]=L\left(\theta,\theta^{(m)}\right)$$

$$E_{p\left(z|\theta^{(m)}\right)}L\left(\theta,\theta^{(m)}\right)=Q\left(\theta,\theta^{(m)}\right)$$

$$Q\left(\theta,\theta^{(m)}\right)=\sum\left[\ln\alpha N\left(x_n|\mu_1,\sigma_1\right)E_{p\left(z|\theta^{(m)}\right)}\left[z_n\right]+\ln\left(1-\alpha\right)N\left(x_n|\mu_2,\sigma_2\right)\left(1-E_{p\left(z|\theta^{(m)}\right)}\left[z_n\right]\right)\right]$$

$$E_{p\left(z|\theta^{(m)}\right)}\left[z_n\right]=p\left(z_n=1|x,\theta^{(m)}\right)=\frac{\alpha N\left(x_n|\mu_1,\sigma_1\right)}{\alpha N\left(x_n|\mu_1,\sigma_1\right)+\left(1-\alpha\right)N\left(x_n|\mu_2,\sigma_2\right)}$$

Байес для среднего класса: Вариационные методы ЕМ алгоритм. Пример

- М шаг: максимизация функции $E_{p(z|\theta^{(m)})} L(\theta, \theta^{(m)}) = Q(\theta, \theta^{(m)})$

$$Q(\theta, \theta^{(m)}) = \sum \left[\ln \alpha N(x_n | \mu_1, \sigma_1) E_{p(z|\theta^{(m)})}[z_n] + \ln(1-\alpha) N(x_n | \mu_2, \sigma_2)\left(1 - E_{p(z|\theta^{(m)})}[z_n]\right)\right]$$

$$\theta^{(m+1)} = \underset{\theta}{argmax}\, Q(\theta, \theta^{(m)})$$

Вариационные методы. Приближенный вариационный вывод

- Bayesian inference $$p(\theta|x) = \frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$
- MP $$p(\theta|x) \approx \delta(\theta - \theta_{MP})$$
- Mean field variational inference $$p(\theta|x) \approx q(\theta) = \prod_{j=1}^{m} q_j(\theta_j)$$
- Parametric variational inference $$p(\theta|x) \approx q(\theta) = q(\theta|\lambda)$$

Вариационные методы. Приближенный вариационный вывод

$$p(\theta|x) = \frac{p(x|\theta)\, p(\theta)}{p(x)}$$

$p(\theta|x) - сложная$

$$\ln p(x) = \int q(\theta) \ln p(x)\, d\theta = \int q(\theta) \ln \frac{p(x,\theta)}{p(\theta|x)} d\theta \pm \int \ln q(\theta)\, d\theta = \ldots$$

$$\int q(\theta) \ln \frac{p(x,\theta)\, q(\theta)}{q(\theta)\, p(\theta|x)} d\theta = \int q(\theta) \ln \frac{p(x,\theta)}{q(\theta)} d\theta + \int q(\theta) \ln \frac{q(\theta)}{p(\theta|x)} d\theta$$

Вариационные методы. Приближенный вариационный вывод

$$p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}$$

$$\ln p(x)=\int q(\theta)\ln\frac{p(x,\theta)}{q(\theta)}d\theta+\int q(\theta)\ln\frac{q(\theta)}{p(\theta|x)}d\theta=L(q)+KL(q\|p)$$

Вариационные методы. Приближенный вариационный вывод

$$L(q)=\int \ln\frac{p(x,z)}{q(z)}q(z)\,dz=\int \ln p(x,z)q(z)\,dz-\int \ln q(z)q(z)\,dz$$

Вариационные методы. Приближенный вариационный вывод

- ELBO — Evidence Lower Bound
  - Evidence

$$p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)}=\frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{\int p(x|\theta)\,p(\theta)\,d\theta}=\frac{likelihood \times prior}{evidence}$$

Lower
Bound

$$\ln p(x)=L(q)-KL(p\|q)\geq L(q)$$

Вариационные методы. Mean field variational inference

$$p(z|x) \approx q(z) = \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)$$

$$L(q) = \int \ln \frac{p(x,z)}{q(z)} q(z)\,dz = \int \ln \frac{p(x,z)}{\prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)} \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)\,dz \underset{q_i(z_i)}{\rightarrow} max$$

$$\int \ln \frac{p(x,z)}{\prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)} \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)\,dz = \int \sum_{j \neq i} \ln q_j q_j\,dz_j + \int \ln p(x,z) \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j) - \int \ln q_i(z_i) q_i(z_i)\,dz_i$$

Вариационные методы. Mean field variational inference

$$p(z|x) \approx q(z) = \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)$$

$$\int \ln \frac{p(x,z)}{\prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)} \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j) dz = \int \sum_{j\neq i} \ln q_j q_j dz_j + \int \ln p(x,z) \prod_{j=1} q_j(z_j) - \int \ln q_i(z_i) q_i(z_i) dz_i$$

$$\int \ln p(x,z) \prod_{j=1} q_j(z_j) dz_j = \int q_i \left(\int \ln p(x,z) \prod_{j\neq i} q_{j\neq i} dq_{j\neq i} \right) dq_i = \int q_i \ln \tilde{p}(x, z_i) dq_i + const$$

$$L(q_i) = \int q_i \ln \tilde{p}(x, z_i) dq_i - \int \ln q_i(z_i) q_i(z_i) dz_i + const = \int q_i \ln \frac{\tilde{p}(x, z_i)}{q(z_i)} dz_i + const$$

Вариационные методы. Mean field variational inference

$$p(z|x) \approx q(z) = \prod_{j=1}^{m} q_j(z_j)$$

$$L(q_i) = \int q_i \ln \tilde{p}(x, z_i) dq_i - \int \ln q_i(z_i) q_i(z_i) dz_i + const = \int q_i \ln \frac{\tilde{p}(x, z_i)}{q(z_i)} dz_i + const$$

$$\int q_i \ln \frac{\tilde{p}(x, z_i)}{q(z_i)} dz_i = -KL(q \| \tilde{p})$$

$$\ln q_i = \int \ln p(x, z) \prod_{j \neq i} q_{j \neq i} dq_{j \neq i} + const$$

Вариационные методы. Mean field variational. Пример

$$p(z) = N(z \mid \mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}\sqrt{\det \Sigma^{-1}}} e^{-\frac{1}{2}(z-\mu)^T \Sigma^{-1}(z-\mu)}$$

$$p(z) = N(z \mid \mu, \Lambda^{-1}) = \frac{\sqrt{\det \Lambda}}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\frac{1}{2}(z-\mu)^T \Lambda (z-\mu)}$$

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix} \qquad \Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{12} & \Lambda_{22} \end{pmatrix}$$

Вариационные методы. Mean field variational. Пример

$$p(z) \approx q(z) = q_1(z_1)\, q_2(z_2)$$

$$\begin{pmatrix} \ln q_1^* = E_{q_2^*}\left[\ln p(z_1, z_2)\right] + const \\ \ln q_2^* = E_{q_1^*}\left[\ln p(z_1, z_2)\right] + const \end{pmatrix}$$

$$\ln q_1^* = E_{q_2^*(z_2)}\left[\frac{1}{2}\ln det\, \Lambda - \ln 2\pi - \frac{1}{2}(z-\mu)^T \Lambda\, (z-\mu)\right] + const = \ldots$$

$$\frac{1}{2} E_{q_2^*(z_2)}\left[\lambda_{11}(z_1-\mu_1)^2 + 2(z_1-\mu_1)(z_2-\mu_2)\lambda_{12} + \lambda_{22}(z_2-\mu_2)^2\right] + const = \ldots$$

$$\frac{1}{2} E_{q_2^*(z_2)}\left[\lambda_{11}(z_1-\mu_1)^2 + 2(z_1-\mu_1)(z_2-\mu_2)\lambda_{12}\right] + const = \ldots$$

$$\frac{1}{2} E_{q_2^*(z_2)}\left[\lambda_{11} z_1^2 - 2 z_1\left(\lambda_{11}\mu_1 - \lambda_{12}(z_2-\mu_2)\right)\right] + const = -\frac{1}{2}\lambda_{11} z_1^2 + z_1(\lambda_{11}\mu_1 - \lambda_{12})\left(E_{q_2^*(z_2)}[z_2] - \mu_2\right)$$

Вариационные методы. Mean field variational. Пример

$$\frac{1}{2}E_{q_2^*(z_2)}\left[\lambda_{11}z_1^2-2z_1\left(\lambda_{11}\mu_1-\lambda_{12}\left(z_2-\mu_2\right)\right)\right]+const=-\frac{1}{2}\lambda_{11}z_1^2+z_1\left(\lambda_{11}\mu_1-\lambda_{12}\right)\left(E_{q_2^*(z_2)}\left[z_2\right]-\mu_2\right)$$

$$\ln q_1^*\left[z_1\right]=-\frac{1}{2}\lambda_{11}z_1^2+z_1\lambda_{11}\mu_1-z_1\lambda_{12}\left(E\left[z_2\right]-\mu_2\right)+const$$

$$q_1^*\left[z_1\right]=N\left(z_1|m_1,\lambda_{11}^{-1}\right) \qquad m_1=\mu_1-\frac{\lambda_{12}}{\lambda_{11}}\left(E\left[z_2\right]-\mu_2\right)$$

$$q_2^*\left[z_2\right]=N\left(z_2|m_2,\lambda_{22}^{-1}\right) \qquad m_2=\mu_2-\frac{\lambda_{12}}{\lambda_{22}}\left(E\left[z_1\right]-\mu_1\right)$$