Задание 4 по курсу "Байесовский выбор модели"

Грабовой Андрей, группа 574

Задача

Рассмотрим вероятностную модель метода главных компонент, считая, что

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \ \exists \mathbf{z} \in \mathbb{R}^d : \ \mathbf{x} = \mathbf{W}\mathbf{z} + \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{1}$$

где $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n, \ \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^n$.

Пусть имеется iid выборка $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_m]$. Пусть:

$$p(\mathbf{z}) = N(\mathbf{z}|\mathbf{0}, \mathbf{I}), \quad p(\boldsymbol{\varepsilon}) = N(\boldsymbol{\varepsilon}|\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}). \tag{2}$$

а)

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) = \prod_{i=1}^{m} N(\mathbf{x}_i|\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2\mathbf{I}) \prod_{i=1}^{m} N(\mathbf{z}_i|\mathbf{0}, \mathbf{I}). \tag{3}$$

б)

$$p(\mathbf{X}|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) = \prod_{i=1}^{m} N(\mathbf{x}_i|\boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}\mathbf{W}^{\mathsf{T}} + \sigma^2\mathbf{I}). \tag{4}$$

в) Используя EM-алгоритм решим задачу максимизации обоснованности:

$$F(q, \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) = \log p(\mathbf{X}|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) - \sum_{i=1}^{m} D_{KL}(q(\mathbf{z}_i)||p(\mathbf{z}_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma)). \tag{5}$$

Очевидно, что E-шаг имеет следующее решение:

$$q(\mathbf{z}_i) = p(\mathbf{z}_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma), \tag{6}$$

где апостериорное распределение на $\mathbf{z}_i$ является нормальным, так как правдоподобие является нормальным. Тогда апостериорное распределение будет иметь параметры(по аналогии с прошлой домашкой) получаем:

$$q(\mathbf{z}_i) = N(\mathbf{z}_i|\mathbf{m}_i, \mathbf{A}) \quad \mathbf{A} = \left(\frac{1}{\sigma^2}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W} + \mathbf{I}\right)^{-1} \quad \mathbf{m}_i = \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{A}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}). \tag{7}$$

Найдем итеративные формулы для M-шага, для этого запишем:

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{Z})} \log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) = \mathcal{F}(\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}_{q(\mathbf{Z})} \left(-\frac{1}{2}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_i - \frac{1}{2\sigma^2} \left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right)^{\mathsf{T}} \left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right) - \frac{n}{2}\log\sigma^2 \right) - \frac{m\,(d+n)}{2}\log 2\pi. \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right) = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\mathbf{x}_i - \mathbf{W}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\right) \Rightarrow \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbf{x}_i. \quad (9)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{W}} = \sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right)\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}} = \sum_{i=1}^{m}\left(\mathbf{W}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}} + (\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\mathsf{E}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbf{W}_{new} = \left(\sum_{i=1}^{m}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{new})\mathsf{E}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\right)\left(\sum_{i=1}^{m}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\right)^{-1}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \sigma^2} = \frac{1}{2\sigma^4}\sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right)^{\mathsf{T}}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right) - \frac{n \cdot m}{2\sigma^2} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sigma^2_{new} = \frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{m}\left(\mathsf{E}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}_{new}^{\mathsf{T}}\mathbf{W}_{new}\mathbf{z}_i + \left(\boldsymbol{\mu}_{new} - \mathbf{x}_i\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{\mu}_{new} - \mathbf{x}_i\right) + 2\mathsf{E}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}_{new}^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{\mu}_{new} - \mathbf{x}_i\right)\right), \quad (11)$$

где в (10) и в (11) $\mathsf{E}\mathbf{z}_i$ и $\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}$ очевидно определяються из (7), первое слагаемое суммы расписывается через след и тоже выделяется математическое ожидание от $\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}$.

Пусть теперь в данных могут быть пропуски. Тогда каждый вектор $\mathbf{x}^n$ можно условно разбить на два подвектора $\mathbf{x}^n_{\text{obs}}$ и $\mathbf{x}^n_{miss}$. Тогда формально матрица $\mathbf{X}$ разбивается на две матрицы $\mathbf{X}_{obs}$ и $\mathbf{X}_{miss}$. Тогда правдоподобие модели выглядит следующим образом:

$$p(\mathbf{X}_{obs}, \mathbf{X}_{miss}, \mathbf{T}|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma) = \prod_{i=1}^{m} N(\mathbf{x}^i_{obs}|\mathbf{W}_{obs}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu}_{obs}, \sigma^2\mathbf{I})N(\mathbf{x}^i_{miss}|\mathbf{W}_{miss}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu}_{miss}, \sigma^2\mathbf{I})N(\mathbf{z}_i|\mathbf{0}, \mathbf{I}), \quad (12)$$

проще говоря все изменения состоят в том, что в нас теперь имеется не по одному $\boldsymbol{\mu}$, $\mathbf{W}$, а по два экземпляра, для случая если признак пропущен и если признак наблюдается.

Модификация EM-алгоритма будет в том, что в качестве скрытых переменных, теперь не только $\mathbf{z}$, но и пропущенные значения $\mathbf{x}_{miss}$. Тоесть теперь в формуле (6) появится еще и и $\mathbf{x}_{miss}$, тоесть:

$$q(\mathbf{z}_i, \mathbf{x}^i_{miss}) = p\left((\mathbf{z}_i, \mathbf{x}^i_{miss})|\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma\right) = N\left((\mathbf{z}_i, \mathbf{x}^i_{miss})|\mathbf{m}_i, \mathbf{A}_i\right), \quad (13)$$

дальше используя свойство сопряжения можно найти $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{A}_i$ и повторяя теже самые действия можно выписать итеративные формулы.

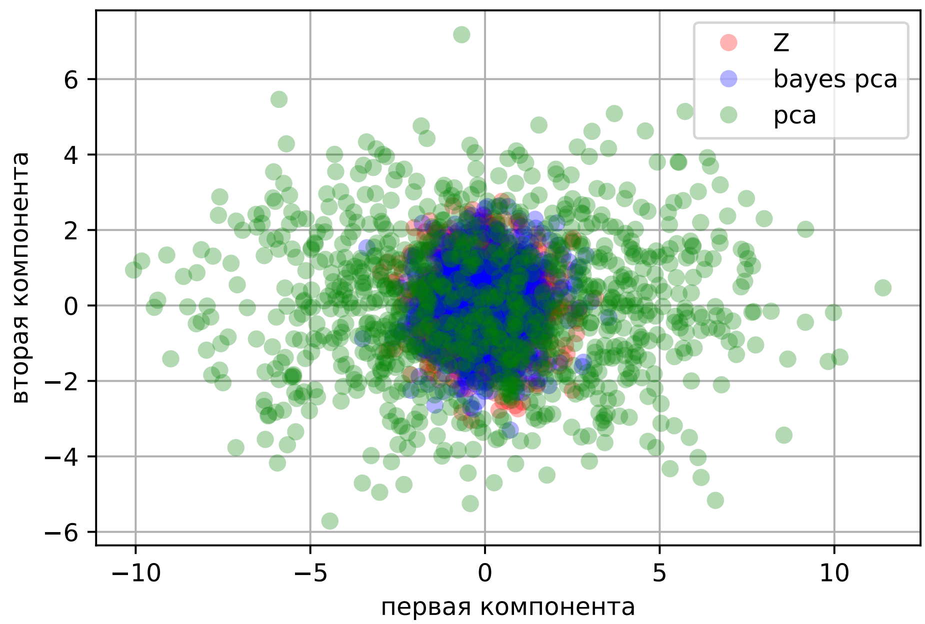

Рис. 1: Изображение латентного пространства

г) На рис. 1 показано изображение скрытого пространства, истинного, через простой PCA и через Bayes PCA. Как видно из рисунка bayes PCA и истинные вектора Z имеют одинаковые распределение, тоесть он полностью восстановил истинное скрытое пространство.

д) Теперь опишем метод автоматического определения числа компонент.

$$p(\mathbf{W}|\alpha) = \prod_{i=1}^{n} \sqrt{\frac{\alpha_i}{2\pi}}^{n} \exp\left(-\frac{\alpha_i}{2}\mathbf{w}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_i\right). \tag{14}$$

Правдоподобие:

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma) = p(\mathbf{X}|\mathbf{Z}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma)p(\mathbf{Z})p(\mathbf{W}|\boldsymbol{\alpha}). \tag{15}$$

Будем искать решение E-шага в следующем виде:

$$q(\mathbf{W}, \mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_m) = q(\mathbf{W}) \prod_{i=1}^{m} q(\mathbf{z}_i). \tag{16}$$

$$\log q(\mathbf{z}_i) = \mathsf{E}_{q/z_i} \log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma) \propto$$

$$\propto -\frac{1}{2}\mathsf{E}_{q/z_i}\left(\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_i + \frac{1}{\sigma^2}\left[\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right]^{\mathsf{T}}\left[\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right]\right) =$$

$$= -\frac{1}{2}\left[\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\left(\mathbf{I} + \frac{1}{\sigma^2}\mathsf{E}_{\mathbf{W}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W}\right)\mathbf{z}_i + 2\frac{1}{\sigma^2}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}_{\mathbf{W}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\right], \tag{17}$$

из (17) получаем, что:

$$q(\mathbf{z}_i) = N(\mathbf{z}_i|\mathbf{m}_i, \mathbf{A}) \quad \mathbf{A} = \left(\frac{1}{\sigma^2}\mathsf{E}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W} + \mathbf{I}\right)^{-1} \quad \mathbf{m}_i = \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{A}\mathsf{E}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}), \tag{18}$$

то есть получили здесь тоже самое, что и в (7).

$$\log q(\mathbf{W}) = \mathsf{E}_{q/W}\log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma) \propto$$
$$\propto \mathsf{E}_{q/W}\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\left[\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right]^{\mathsf{T}}\left[\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right] - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j\right) \propto$$
$$\propto -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\left(\mathsf{E}_{q/W}\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W}\mathbf{z}_i + 2\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\right) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j =$$
$$= -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathbf{tr}\left(\mathbf{W}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\right) + \sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j\right] - \frac{1}{2}\left[2\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathbf{tr}\left((\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\right)\right] =$$
$$= -\frac{1}{2}\mathbf{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W} + \mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathrm{diag}(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{W}\right) - \frac{1}{2}\left[2\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathbf{tr}\left((\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\right)\right] =$$
$$= -\frac{1}{2}\mathbf{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}} + \mathrm{diag}(\boldsymbol{\alpha})\mathbf{W}\right) - \frac{1}{2}\left[2\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathbf{tr}\left((\boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i)\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\right)\right] =$$
$$= -\frac{1}{2}\left[\sum_{j=1}^{n}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{B}_j^{-1}\mathbf{w}_j - 2\sum_{j=1}^{n}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{B}_j^{-1}\mathbf{u}_j\right], \tag{19}$$

где введены обозначения:

$$\mathbf{B}_j^{-1} = \left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathsf{E}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}} + \mathrm{diag}(\boldsymbol{\alpha})\right) \quad \mathbf{u}_j = \mathbf{B}_j\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\right)_j, \tag{20}$$

где под выражением $(\cdots)_j$ подрозумевается взятие j-го столбца матрицы. Тогда из (19) получаем, что:

$$q(\mathbf{w}_j) = N(\mathbf{w}_j|\mathbf{u}_j, \mathbf{B}_j), \tag{21}$$

где $\mathbf{u}$ и $\mathbf{B}$ определяются формулой (20).

На этом мы закончили делать E-шаг. Теперь нужно сделать M-шаг.

$$\mathsf{E}_{q(\mathbf{Z},\mathbf{W})}\log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma) = \mathcal{F}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\alpha}, \sigma) =$$
$$= \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}\mathsf{E}\left[\mathbf{X}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right]^{\mathsf{T}}\left[\mathbf{X}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right] - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j - \frac{n\cdot m}{2}\log\sigma^2 + \frac{d}{2}\sum_{j=1}^{n}\log\alpha_j. \tag{22}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right) = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\mu}^{new} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \mathbf{x}_i - \frac{1}{m}\mathsf{E}\mathbf{W}\sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\mathbf{z}_i, \tag{23}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \alpha_j} = -\frac{1}{2}\mathsf{E}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j + \frac{d}{2\alpha_j} = 0 \Rightarrow \alpha_j^{new} = \frac{d}{\mathsf{E}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j}, \tag{24}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \sigma^2} = \frac{1}{2\sigma^4}\sum_{i=1}^{m} \mathsf{E}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right)^{\mathsf{T}}\left(\mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu} - \mathbf{x}_i\right) - \frac{m \cdot n}{2\sigma^2} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sigma^2_{new} = \frac{1}{n \cdot m}\sum_{i=1}^{m}\left[\mathsf{E}\left(\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W}\mathbf{z}_i\right) + \left(\boldsymbol{\mu}^{new} - \mathbf{x}_i\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{\mu}^{new} - \mathbf{x}_i\right) + 2\mathsf{E}\left(\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}}\right)\mathsf{E}\left(\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\right)\left(\boldsymbol{\mu}^{new} - \mathbf{x}_i\right)\right], \tag{25}$$

где $\mathsf{E}\mathbf{W}$, $\mathsf{E}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j$, $\mathsf{E}\mathbf{z}_i$, $\mathsf{E}\mathbf{z}_j\mathbf{z}_j^{\mathsf{T}}$, $\mathsf{E}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W}$ легко находятся из формул (18), (20), (21):

$$\mathsf{E}\mathbf{W} = \left(\sum_{i=1}^{m}\left(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}\right)\mathbf{m}_i^{\mathsf{T}}\right)\left(\sum_{i=1}^{m}\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^{\mathsf{T}} + \sigma^2\mathrm{diag}(\boldsymbol{\alpha})\right)^{-1}, \tag{26}$$

$$\mathsf{E}\mathbf{w}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_j = \mathbf{tr}\left(\mathbf{B}_j + \mathbf{u}_j\mathbf{u}_j^{\mathsf{T}}\right), \tag{27}$$

$$\mathsf{E}\mathbf{z}_j = \mathbf{m}_j, \tag{28}$$

$$\mathsf{E}\mathbf{z}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_j = \mathbf{tr}\left(\mathbf{A} + \mathbf{m}_j\mathbf{m}_j^{\mathsf{T}}\right), \tag{29}$$

$$\mathsf{E}\mathbf{W}^{\mathsf{T}}\mathbf{W} = \mathrm{diag}(\mathsf{E}\mathbf{w}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_i), \tag{30}$$

Получили итеративные формулы для решения задачи.

```
In [53]:  1  alpha_C

Out[53]: array([ 2.43719724e+03,   2.43719724e+03,   3.10573896e+00,
                 2.43719724e+03,   1.22735892e+00,   2.43719724e+03,
                 2.43719724e+03,   2.43719724e+03,   2.43719724e+03,
                 2.43719724e+03])
```

Рис. 2: Таблица результатов для α

е) На рис. 2 показана таблица, результата работы алгоритма из пункта д). Как видно из результатов, алгоритм сократил количество компонент до 2, как и предполагалось. Это следует из того, что все α кроме 2 очень большие $\approx 10^3$, в то время как 3 и 5 компоненты вектора α порядка единиц.