Янаков Дмитрий Спартакович, 417

Теория 3. Вариационный вывод

$X = \{x_1, \dots, x_N\}, \; x_n \in \mathbb{R}^D$

$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{T}(x \mid \mu_k, \Sigma_k, \nu), \; w_k \geq 0, \; \sum_j w_j = 1$$

$$p(X, T, Z \mid w, \mu, \Sigma, \nu) = \prod_{n,k=1}^{N,K} \Big[w_k \mathcal{N}(x_n \mid \mu_k, \Sigma_k / z_n) \cdot \mathcal{G}(z_n \mid \nu/2, \nu/2) \Big]^{t_{nk}},$$

где $t_{nk} \in \{0, 1\}$, $\sum_j t_{nj} = 1$ – обозначает принадлежность n-го объекта k-ой компоненте смеси.

- $q_T(T)\, q_Z(Z) \approx p(T, Z \mid X, w, \mu, \Sigma, \nu)$

~~E-шаг для Z:~~

$$\cancel{\log q_Z(Z) = \mathbb{E}_T \log p(X, T, Z \mid w, \mu, \Sigma, \nu) + C = \mathbb{E}_T \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk}}$$

$\boxed{1}$ E-шаг для T:

$$\log q_T(T) = \mathbb{E}_Z \log p(X, T, Z \mid w, \mu, \Sigma, \nu) + \overset{const}{C} =$$

$$= \mathbb{E}_Z \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Big[\log w_k + \log \mathcal{N}\Big(x_n \mid \mu_k, \frac{\Sigma_k}{z_n}\Big) + \log \mathcal{G}\Big(z_n \mid \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\Big) \Big] + C = \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Big[\log w_k +$$

далее будем опускать константы

$$+\mathbb{E}_Z \log \mathcal{N}\left(x_n \mid \mu_k, \frac{\Sigma_k}{z_n}\right) + \underbrace{\mathbb{E}_Z \log G\left(z_n \middle| \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right)}_{\text{const}}\Bigg] =$$

$$= \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Bigg[\log \omega_k + \mathbb{E}_Z \log \frac{1}{(2\pi)^{D/2} \left|\frac{\Sigma_k}{z_n}\right|^{\frac{1}{2}}} +$$

$$-\frac{1}{2}\mathbb{E}_Z \left[(x_n-\mu_k)^T \left(\frac{\Sigma_k}{z_n}\right)^{-1} (x_n-\mu_k)\right]\Bigg] = \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Bigg[\log \omega_k +$$

$$+ \log \frac{1}{(2\pi)^{D/2} \left(\frac{\Sigma_k}{\mathbb{E}_Z z_n}\right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}(x_n-\mu_k)^T \left(\frac{\Sigma_k}{\mathbb{E}_Z z_n}\right)^{-1} (x_n-\mu_k)\Bigg] =$$

$$= \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \left[\log \omega_k + \log \mathcal{N}\left(x_n \mid \mu_k, \frac{\Sigma_k}{\mathbb{E} z_n}\right)\right]$$

Так как T_i независимы $(i = \overline{1,N})$, то

$$q_T(t_{ij}) = \omega_j \mathcal{N}\left(x_i \mid \mu_j, \frac{\Sigma_j}{\mathbb{E}_Z z_i}\right)$$ с точностью до константы

и поскольку $\sum_j t_{ij} = 1 \quad \forall i = \overline{1,N} \Rightarrow$

$$q_T(t_{ij}) = \frac{\omega_j \mathcal{N}\left(x_i \mid \mu_j, \frac{\Sigma_j}{\mathbb{E}_Z z_i}\right)}{\sum_{k=1}^{K} \omega_k \mathcal{N}\left(x_i \mid \mu_k, \frac{\Sigma_k}{\mathbb{E}_Z z_i}\right)}$$

<u>E-шаг для Z:</u>

далее опускаем константы

$$\log q_Z(z) = \mathbb{E}_T \log p(X, T, Z \mid \omega, \mu, \Sigma, \nu) + C =$$

$$= \mathbb{E}_T \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Big[\underbrace{\log \omega_k - \frac{D}{2}\log 2\pi - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k|}_{\text{const}} +$$

$$+ \frac{D}{2}\log z_n - \frac{z_n}{2}(x_n-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n-\mu_k)\Big] = (+)$$

$$\oplus \left[\left(\frac{\nu}{2} - 1\right) \log z_n - \frac{\nu}{2} z_n \right] =$$

$$= \sum_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \left[\left(\frac{D+\nu}{2} - 1\right) \log z_n - \left(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)\right) z_n \right] =$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \left[\left(\frac{D+\nu}{2} - 1\right) \log z_n \cdot \underbrace{\sum_{k=1}^{K} q_T(t_{nk})}_{1} - \left(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{nk}) (x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)\right) z_n \right]$$

~~Тогда:~~

$$\cancel{q_Z(z_i) \sim G\left(z_i \,\middle|\, \frac{\nu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{ik}) (x_i - \mu_k)^T \cdot \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k), \frac{D+\nu}{2}\right)}$$

Тогда:

$$q_Z(z_i) \sim G\left(z_i \,\middle|\, \frac{D+\nu}{2}, \frac{\nu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{ik}) \cdot (x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k)\right)$$

M-шаг: $\mathbb{E}_{Z,T} \log p(X,T,Z|w,\mu,\Sigma,\nu) \to \max\limits_{w,\mu,\Sigma,\nu}$ $\boxed{2}$

$$\mathbb{E}_{Z,T} \log p(X,T,Z|w,\mu,\Sigma,\nu) = \mathbb{E}_{Z,T} \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \Big[\log w_k - \underbrace{\frac{D}{2}\log 2\pi} - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k| + \underbrace{\frac{D}{2}\log z_n} - \frac{z_n}{2}(x_n-\mu_k)^T \cdot \Sigma_k^{-1}(x_n-\mu_k) + \underbrace{\log G\left(z_n \Big| \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right)} \Big] =$$

$$= \sum_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \Big[\log w_k - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k| - \frac{\mathbb{E}_Z z_n}{2}(x_n-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x_n-\mu_k) \Big]$$

$\boxed{w_k}$: $\sum\limits_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \log w_k \to \max$

$$L = \sum_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \log w_k + \lambda\left(\sum_j w_j - 1\right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \frac{1}{w_j}\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj}) + \lambda = 0 \Rightarrow w_j = -\frac{1}{\lambda}\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj})$$

Подставим в уравнение связи:

$$\sum_j w_j = \sum_j -\frac{1}{\lambda}\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj}) = 1 \Rightarrow \lambda = -\sum_j \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj})$$

Тогда $$w_j = \frac{\sum\limits_{n=1}^{N} q_T(t_{nj})}{\sum\limits_{j'=1}^{K}\sum\limits_{n=1}^{N} q_T(t_{nj'})} = \frac{\sum\limits_{n=1}^{N} q_T(t_{nj})}{\sum\limits_{n=1}^{N} 1} =$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj}) \geq 0$$

Итак: $$w_j = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nj})$$

$$\boxed{\mu_k} : I = \sum_{n=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \left[-\frac{\mathbb{E}_z z_n}{2} (x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) \right] \to \max_{\mu_k}$$

$$\frac{\partial I}{\partial \mu_k} = \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \frac{\mathbb{E}_z z_n}{2} 2 \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) = 0$$

$$\Rightarrow \mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \mathbb{E}_z z_n \cdot x_n}{\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \mathbb{E}_z z_n}$$

$$\boxed{\Sigma_k} : M = \sum_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \left[-\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{\mathbb{E}_z z_n}{2} (x_n - \mu_k)^T \cdot \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) \right] \to \max_{\Sigma_k}$$

$$\frac{\partial M}{\partial \Sigma_k} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \left[\frac{1}{|\Sigma_k|} \cdot |\Sigma_k| \underbrace{\Sigma_k^{-T}}_{= \Sigma_k^{-1}} + \mathbb{E}_z z_n \cdot \frac{\partial}{\partial \Sigma_k} (x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) \right] =$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \left[\Sigma_k^{-1} - \underbrace{\left(\Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} \right)^T}_{\text{показывали на семинаре}} \right] = 0$$

Заметим, что $\left(\Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} \right)^T =$

$$= \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1}$$

Тогда:

$$\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \Sigma_k^{-1} = \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1}$$

Домножим слева и справа на Σ_k:

$$\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) \Sigma_k = \sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T$$

$$\Rightarrow \quad \Sigma_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk}) (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T}{\sum_{n=1}^{N} q_T(t_{nk})}$$

$$\mathcal{L}(q, \omega, \mu, \Sigma) = \mathbb{E}_{Z,T} \log p(X, T, Z \mid \omega, \mu, \Sigma, \nu) - \qquad \boxed{3}$$

$$- \mathbb{E}_T \log q_T(T) - \mathbb{E}_Z \log q_Z(Z)$$

- $$\mathbb{E}_{T,Z} \log p(X, T, Z \mid \omega, \mu, \Sigma, \nu) = \mathbb{E}_{T,Z} \sum_{n,k=1}^{N,K} t_{nk} \cdot$$

$$\cdot \Big[\log \omega_k - \frac{D}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |\Sigma_k| + \frac{D}{2} \log z_n -$$

$$- \frac{z_n}{2} (x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) + \frac{\nu}{2} \log \frac{\nu}{2} - \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right) +$$

$$+ \left(\frac{\nu}{2} - 1\right) \log z_n - \frac{\nu}{2} z_n \Big] = \sum_{n,k=1}^{N,K} q_T(t_{nk}) \Big[\log \omega_k -$$

$$- \frac{D}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \log |\Sigma_k| + \left(\frac{D+\nu}{2} - 1\right) \mathbb{E}_Z \log z_n -$$

$$- \frac{\mathbb{E}_Z z_n}{2} \left[(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k) + \nu \right] + \frac{\nu}{2} \log \frac{\nu}{2} -$$

$$- \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right) \Big]$$

- $\mathbb{E}_T \log q_T(T) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{nk}) \log q_T(t_{nk})$
- Обозначим параметры из $q_Z(z_i)$:

$$\beta_i \equiv \frac{\nu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{ik}) (x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k),$$

$$\alpha_i \equiv \frac{D+\nu}{2}$$

$$\Rightarrow \quad q_Z(z_i) = G(z_i \mid \alpha_i, \beta_i)$$

Тогда:

$$\mathbb{E}_Z \log q_Z(Z) = \mathbb{E}_Z \log \prod_{n=1}^{N} q_Z(z_n) = \sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}_Z \log q_Z(z_n)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \Big[\alpha_i \log \beta_i - \log \Gamma(\alpha_i) + (\alpha_i - 1) \mathbb{E}_Z \log z_n -$$

$$- \beta_i \mathbb{E}_Z z_n \Big]$$

$\boxed{4}$ Вычислим $\mathbb{E}_Z z_n$, исп-вый в пред. ф-ле:

$$\mathbb{E}_Z z_n = \frac{\alpha_i}{\beta_i} = \frac{1}{2} \cdot \frac{D+\nu}{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} q_T(t_{ik}) (x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k)}$$

$\mathbb{E}_Z \log z_n$:

$$\mathbb{E}_Z \log z_n = \int_0^{+\infty} \log z_n \frac{\alpha_n^{\beta_n}}{\Gamma(\beta_n)} z_n^{\beta_n - 1} \exp(-\alpha_n z_n) dz_n =$$

$$= \{ \alpha_n z_n = y_n \} = \int_0^{+\infty} \log \frac{y_n}{\alpha_n} \cdot \frac{\alpha_n^{\beta_n}}{\Gamma(\beta_n)} \cdot \frac{y_n^{\beta_n - 1}}{\alpha_n^{\beta_n - 1}} \cdot$$

$$\cdot \exp(-y_n) \frac{1}{\alpha_n} dy_n = \int_0^{+\infty} (\log y_n - \log \alpha_n) \frac{1}{\Gamma(\beta_n)} y_n^{\beta_n - 1} \cdot$$

$$\cdot \exp(-y_n) dy_n = \int_0^{+\infty} \log y_n \frac{1}{\Gamma(\beta_n)} y_n^{\beta_n - 1} \exp(-y_n) dy_n -$$

$$= \log \alpha_n \cdot \frac{1}{\Gamma(\beta_n)} \underbrace{\int_0^{+\infty} y_n^{\beta_n - 1} \exp(-y_n)\, dy_n}_{\Gamma(\beta_n)} =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\beta_n)} \cdot \Gamma'(\beta_n) - \log(\alpha_n) = \underbrace{(\ln \Gamma(\beta_n))'}_{\text{дигамма ф-ция}} - \log \alpha_n$$

Также, было показано, что $\mathbb{E}_T\, t_{nk} = q_T(t_{nk})$

Все ост. статистики выведены в 3 пункте