

Байесовский выбор моделей: построение адекватных мультимоделей

Александр Адуенко

2е декабря 2025

Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса и формула полной вероятности;
- Определение априорных вероятностей и selection bias;
- (Множественное) тестирование гипотез
- Экспоненциальное семейства. Достаточные статистики.
- Наивный байесовский классификатор. Связь целевой функции и вероятностной модели.
- Линейная регрессия: связь МНК и $\mathbf{w}_{\text{ML}}$, регуляризации и $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$.
- Свойство сопряженности априорного распределения правдоподобию.
- Прогноз для одиночной модели:

$$p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}} | \mathbf{w}, \mathbf{X}_{\text{test}}) p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) d\mathbf{w}.$$

- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки $\mathbf{w}$ и связь априорного распределения с отбором признаков.
- ЕМ-алгоритм и отбор признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный ЕМ-алгоритм. Смесь моделей лог. регрессии.
- Гауссовские процессы. Учёт эволюции моделей во времени.

Смесь моделей логистической регрессии

Вероятностная модель генерации данных

- Веса моделей в смеси π получены из априорного распределения $p(\pi|\mu)$;
- Векторы параметров моделей $\mathbf{w}_k$ получены из нормального распределения $p(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1})$, $k = 1, \dots, K$;
- Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ выбрана модель f_{k_i} , которой он описывается, причем $p(k_i = k) = \pi_k$;
- Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ класс y_i определен в соответствии с моделью f_{k_i} : $y_i \sim \text{Be}(\sigma(\mathbf{w}_{k_i}^\top \mathbf{x}_i))$.

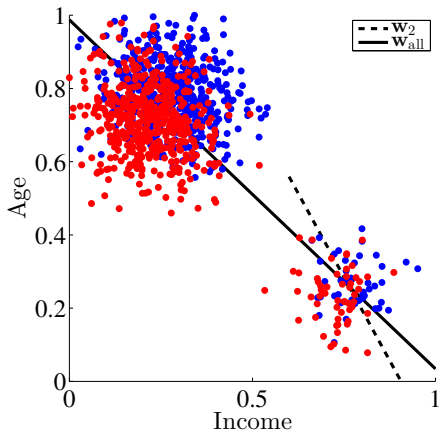
Совместное правдоподобие модели

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \pi | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, \mu) = p(\pi | \mu) \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^m \left(\sum_{l=1}^K \pi_l \sigma(y_i \mathbf{w}_l^\top \mathbf{x}_i) \right).$$

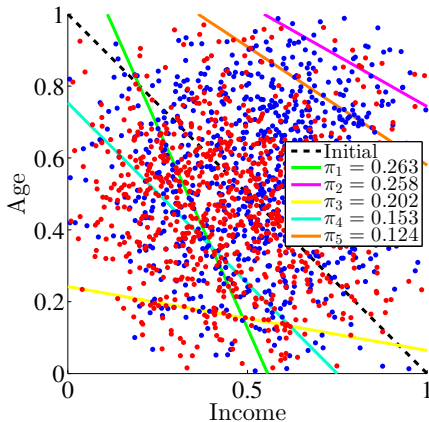
Вопрос: Пусть известна функция $f(\mathbf{x})$, которая по объекту выдает номер модели, которой он описывается. Как изменится совместное правдоподобие?

Близость моделей в мультимодели

Проблема: большое число близких или совпадающих моделей ведет к неинтерпретируемости и низкому качеству прогноза.



Неадекватная многоуровневая
модель



Неадекватная смесь моделей

Вопрос: почему появление лишних моделей ухудшает качество прогноза?

Постановка задачи сравнения моделей

Определение. Мультимодель с совместным распределением $p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, (\boldsymbol{\pi}) | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K, (\mu))$ называется (s, α) -адекватной, если модели, ее составляющие, попарно статистически различимы с помощью функции сходства s на уровне значимости α .

Проблема

Несмотря на прореживание мультимодели, она может не являться (s, α) – адекватной, то есть может содержать похожие модели.

Дано

- Две модели f_1 и f_2 , векторы параметров моделей $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2$.
- Выборки $(\mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1)$ и $(\mathbf{X}_2, \mathbf{y}_2)$,
 $y_{1,i} = f_1(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{w}_1), \quad y_{2,i} = f_2(\mathbf{x}_{2,i}, \mathbf{w}_2).$
- Априорные распределения $\mathbf{w}_1 \sim p_1(\mathbf{w}), \mathbf{w}_2 \sim p_2(\mathbf{w}).$
- Апостериорные распределения параметров моделей
 $g_1(\mathbf{w}_1) = p(\mathbf{w}_1 | \mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1)$ и $g_2(\mathbf{w}_2) = p(\mathbf{w}_2 | \mathbf{X}_2, \mathbf{y}_2).$

Требуется: построить функцию сходства, определенную на паре распределений $g_1(\mathbf{w})$ и $g_2(\mathbf{w})$, удовлетворяющую ряду требований.

Корректная функция сходства s должна быть

- 1 определена в случае несовпадения носителей,
- 2 $s(g_1, g_2) \leq s(g_1, g_1)$,
- 3 $s \in [0, 1]$,
- 4 $s(g_1, g_1) = 1$,
- 5 близка к 1, если $g_2(\mathbf{w})$ — малоинформативное распределение,
- 6 симметрична, $s(g_1, g_2) = s(g_2, g_1)$.

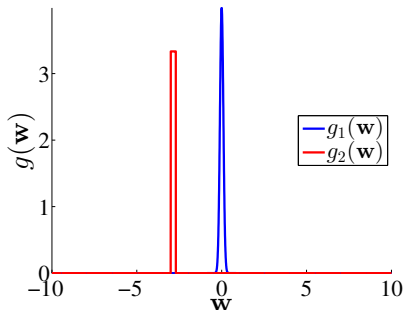
Теорема 1 (Адуенко, 2014)

Функции сходства, порожденные расстояниями Кульбака-Лейблера, Дженсона-Шеннона, Хеллингера, Бхаттачарая, не являются корректными.

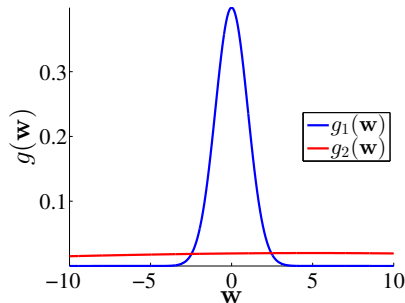
Иллюстрация требований к функции сходства

Важно, чтобы значение функции s

было близко к 1, если $g_2(\mathbf{w})$ — малоинформативное распределение.



$$g_1(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(0, 0.1^2),$$
$$g_2(\mathbf{w}) = U[-3, -2.7].$$



$$g_1(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(0, 1),$$
$$g_2(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(5, 20^2).$$

Теорема 2 (Адуенко, 2014)

Функции сходства, порожденные дивергенциями Брегмана, симметризованными дивергенциями Брегмана и f-дивергенциями, не являются корректными.

В качестве меры сходства распределения предлагается мера сходства s -score:

$$s(g_1, g_2) = \frac{\int_{\mathbf{w}} g_1(\mathbf{w}) g_2(\mathbf{w}) d\mathbf{w}}{\max_{\mathbf{b}} \int_{\mathbf{w}} g_1(\mathbf{w} - \mathbf{b}) g_2(\mathbf{w}) d\mathbf{w}}.$$

Теорема 3 (Адуенко, 2014). Предлагаемая функция сходства является корректной.

Примеры:

$g_1(\mathbf{w})$	$g_2(\mathbf{w})$	$s(g_1, g_2)$
$U[0, 1]$	$U[0.5, 1.5]$	0.5
$U[0, 1]$	$U[0, 1]$	1
$\mathcal{N}(0, 1)$	$\mathcal{N}(10, 10^{10})$	1

Выражение для $s(g_1, g_2)$ для пары нормальных распределений

Определение. *Обобщенно-линейной моделью с натуральной функцией связи* и априорным распределением на вектор параметров $p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$ называется вероятностная модель с совместным правдоподобием

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A}), \text{ где } p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^m p(y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}),$$
$$p(y_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) = c(y_i) \exp(\theta_i y_i - b(\theta_i)), \text{ где } \theta_i = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i.$$

Теорема 4 (Адуенко, 2014).

Пусть $g_1 = \mathcal{N}(\mathbf{v}_1, \Sigma_1)$, $g_2 = \mathcal{N}(\mathbf{v}_2, \Sigma_2)$. Тогда выражение для $s(g_1, g_2)$ имеет вид

$$s(g_1, g_2) = \exp \left(-\frac{1}{2}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^\top (\Sigma_1 + \Sigma_2)^{-1}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \right).$$

Следствие. В случае $\Sigma_2 = \mathbf{0}$ выражение для s-score

$$s(g_1, g_2) = \exp \left(-\frac{1}{2}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)^\top \Sigma_1^{-1}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \right).$$

Распределение s-score в условии истинности гипотезы о совпадении моделей

Рассматриваем пару обобщенно-линейных моделей с натуральной функцией связи. Введем $O_m^\delta(\mathbf{w}) = \{\mathbf{v} : \|\mathbf{H}_m^{T/2}(\mathbf{v} - \mathbf{w})\| \leq \delta\}$.

Теорема 5 (Адуенко, 2016). Пусть

- Модели f_1 и f_2 совпадают, то есть $\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_2 = \mathbf{w}$;
- Априорное распределение: $\mathbf{w}_k \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{0}, \mathbf{A}_{m^k}^{-1})$, $k = 1, 2$;
- $\sum_{i=1}^{m^k} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top$ имеет полный ранг для $m^k \geq m_0$, $k = 1, 2$;
- $\lambda_{\min}(\mathbf{H}_{m^k}(\mathbf{w})) \rightarrow \infty$ при $m^k \rightarrow \infty$, $k = 1, 2$;
- $\forall \delta > 0 \max_{\mathbf{v} \in O_{m^k}^\delta(\mathbf{w})} \left\| \mathbf{H}_{m^k}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{H}_{m^k}(\mathbf{v}) \mathbf{H}_{m^k}^{-\frac{1}{2}} - \mathbf{I} \right\| \rightarrow 0$ $m^k \rightarrow \infty$, $k = 1, 2$;
- $\|\tilde{\mathbf{H}}_{m^1}(\hat{\mathbf{w}}_1)\| \|\tilde{\mathbf{H}}_{m^2}^{-1}(\hat{\mathbf{w}}_2)\| \xrightarrow{P} 0$ при $m = \min(m^1, m^2) \rightarrow \infty$.

Тогда

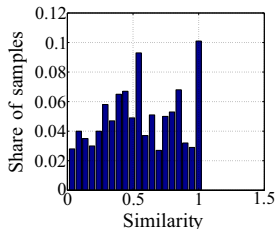
$$-2 \log s\text{-score} = (\hat{\mathbf{w}}_2 - \hat{\mathbf{w}}_1)^\top (\tilde{\mathbf{H}}_{m^1}^{-1}(\hat{\mathbf{w}}_1) + \tilde{\mathbf{H}}_{m^2}^{-1}(\hat{\mathbf{w}}_2))^{-1} (\hat{\mathbf{w}}_2 - \hat{\mathbf{w}}_1) \xrightarrow{d} \chi^2(n).$$

Следствие. Для случая $n = 2$ s-score имеет асимптотически равномерное распределение на отрезке $[0, 1]$.

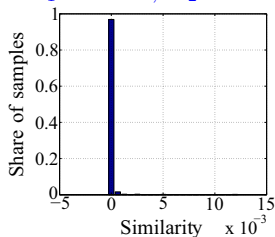
Иллюстрация применения s-score для сравнения двух моделей, $\rho = 0.9$

Рассмотрим две близкие в терминах $\|\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2\|$ модели,

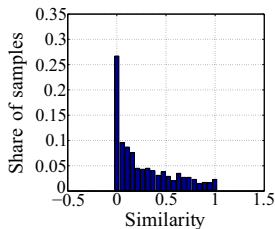
$$\|\mathbf{w}_1\| = \|\mathbf{w}_2\| = 1, \mathbf{w}_1^\top \mathbf{w}_2 = \rho.$$



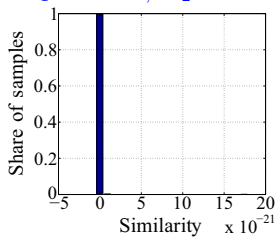
$N_1 = 10000, N_2 = 10$



$N_1 = 10000, N_2 = 1000$



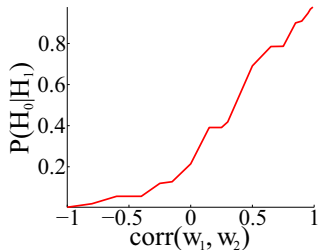
$N_1 = 10000, N_2 = 100$



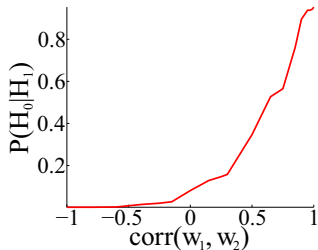
$N_1 = 10000, N_2 = 10000$

Зависимость $P(H_0|H_1)$ от корреляции между истинными параметрами двух моделей.

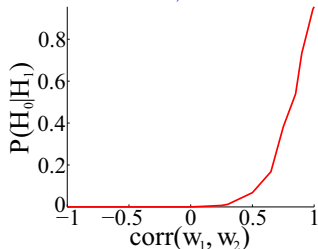
Рассмотрим две близкие в терминах $\|\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2\|$ модели,
 $\|\mathbf{w}_1\| = \|\mathbf{w}_2\| = 1$, $\cos(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) = \rho$.



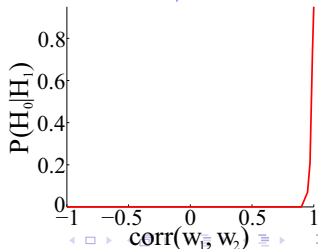
$N_1 = 10000, N_2 = 30$



$N_1 = 10000, N_2 = 50$



$N_1 = 10000, N_2 = 100$



$N_1 = 10000, N_2 = 1000$

Методы прореживания мультимоделей

Обозначим матрицу парных сходств $\mathbf{S} = [s_{kl}(g_k(\mathbf{w}_k), g_l(\mathbf{w}_l))]$,

а матрицу достигаемых уровней значимости

$\mathbf{T} = [P(s(g_k(\mathbf{w}_k), g_l(\mathbf{w}_l)) < s_{kl} | \mathbf{w}_k = \mathbf{w}_l)]$, $k, l = 1, \dots, K$.

1 Находим $[k^*, l^*] = \arg \max_{k < l} t_{kl}$.

2 Если $t_{k^*l^*} < \alpha$, останавливаемся. Иначе на шаг 3.

3 ■ Для многоуровневых моделей:

Объединяем модели k^* , l^* и пересчитываем $g_{k^*}(\mathbf{w}_{k^*})$.

$\mathcal{I}_{k^*} \sqcup \mathcal{I}_{l^*} \rightarrow \mathcal{I}_{k^*}$, $\mathbf{A}_{k^*}^* = \arg \max_{\mathbf{A}_{k^*}^*} p(\mathbf{y}_{\mathcal{I}_{k^*}} | \mathbf{X}_{\mathcal{I}_{k^*}}, \mathbf{A}_{k^*}^*)$;

$g_{k^*}(\mathbf{w}_{k^*}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_{k^*} | \mathbf{w}_{k^*}^*, \Sigma_{k^*}^*)$

■ Для смесей моделей:

Объединяем модели k^* , l^* и перенастраиваем смесь моделей.

Начальное приближение:

$$\pi_{k^*} + \pi_{l^*} \rightarrow \pi_{k^*}, 0 \rightarrow \pi_{l^*}, \frac{\mathbf{w}_{k^*} + \mathbf{w}_{l^*}}{2} \rightarrow \mathbf{w}_{k^*}, \mathbf{w}_k \rightarrow \mathbf{w}_k, k \neq k^*, l^*.$$

4 Удаляем l^* -й столбец матриц $\mathbf{S}$ и $\mathbf{T}$ и пересчитываем s_{k^*l} и t_{k^*l} для $l \neq k^*$. Переходим на шаг 1.

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 48-58, 203-213, 653-674.
- 2 Адуенко, А. А. "Выбор мультимоделей в задачах классификации". Москва, 2017.
URL: http://frccsc.ru/sites/default/files/docs/ds/002-073-05/diss/11-aduenko/11-Aduenko_main.pdf?626
- 3 Baghishani, Hossein, and Mohsen Mohammadzadeh. "Asymptotic normality of posterior distributions for generalized linear mixed models." Journal of Multivariate Analysis 111 (2012): 66-77.
- 4 MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
- 5 MacKay, David JC. "The evidence framework applied to classification networks." Neural computation 4.5 (1992): 720-736.
- 6 Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
- 7 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.