

# Байесовский выбор моделей: байесовская оптимизация с помощью гауссовских процессов

Александр Адуенко

23е декабря 2023

## Содержание предыдущих лекций

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

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

- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки  $w$  и связь априорного распределения с отбором признаков.
- EM-алгоритм и отбор признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный EM-алгоритм. Смесь моделей лог. регрессии.
- Гауссовские процессы. Учёт эволюции моделей во времени.
- Построение адекватных мультимodelей.
- Сэмплирование. Схема Гиббса и Метрополиса-Хастингса. НМС.

# Гауссовские процессы

$x(t)$  – температура в центре Кито.

Идея:  $GP(m_x(t), R_x(\tau))$ , где  $m_x(t) \equiv m$ ,  $R_x(\tau) = \sigma^2 \exp(-\lambda|\tau|)$ .

Рассмотрим  $t_1, \dots, t_q$ , тогда для GP имеем

$p(\mathbf{x}) = p(x(t_1), \dots, x(t_q)) = \mathcal{N}(\mathbf{m}, \Sigma)$ , где

$\mathbf{m} = [m_x(t_1), \dots, m_x(t_q)]^\top$ ,  $\Sigma = \|\Sigma_{ij}\| = \|R_x(t_i - t_j)\|$ .

Упражнение.  $\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1^\top, \mathbf{x}_2^\top]^\top \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{x} | [\boldsymbol{\mu}_1^\top, \boldsymbol{\mu}_2^\top]^\top, \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{12}^\top & \Sigma_{22} \end{pmatrix}^{-1}\right)$ .

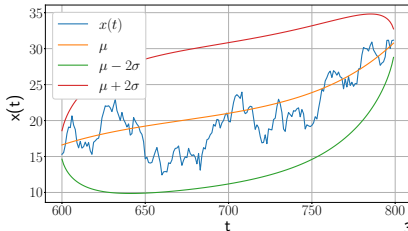
$\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1 \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_2 | \boldsymbol{\mu}_2 - \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{12}(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \Sigma_{22}^{-1})$ .

Вопрос 1: что делать, если неизвестно  $m$ , где  $\boldsymbol{\mu}_1 = m\mathbf{e}_1$ ,  $\boldsymbol{\mu}_2 = m\mathbf{e}_2$ ?

Вопрос 2: что делать, если неизвестны  $\sigma^2$  и  $\lambda$ ?

Возможные модификации:

- Непостоянное  $m_x(t)$ ;
- Введение разрывности  $R_x(\tau) = \sigma^2(\exp(-\lambda|\tau|) + \kappa * [\tau = 0])$ ;
- Другая форма  $R_x(\tau)$ ;
- $R_x(\tau) \rightarrow R_x(t_1, t_2)$ .



Обозначим  $r = \|x_1 - x_2\|$ .

- $K(x_1, x_2) = \sigma^2 \exp(-\tau r^2)$  (RBF);
- $K(x_1, x_2) = \sigma^2 \exp(-\tau r)$  (Laplace);
- $K(x_1, x_2) = \sigma^2 \left(1 + \sqrt{3}r/l\right) \exp\left(-\sqrt{3}r/l\right)$  (Matern 3/2);
- $K(x_1, x_2) = \sigma^2 \left(1 + \sqrt{5}r/l + \frac{5}{3}r^2/l^2\right) \exp\left(-\sqrt{5}r/l\right)$  (Matern 5/2);
- $K(x_1, x_2) = \sigma^2 \exp\left(-2\frac{\sin^2(\pi r)}{l^2}\right)$  (Periodic);
- $K(x_1, x_2) = \sum_i \sigma_i^2 x_1^i x_2^i$  (Linear).

**Вопрос 1:** Как выбрать ядро? Какие функции задаёт каждое из вышеперечисленных?

**Вопрос 2:** Как получить ядро, отличное от вышеперечисленных?

**Вопрос 3:** Как можно использовать гауссовские процессы?

Требуется:  $f(\Theta) \rightarrow \max_{\Theta \in \Theta} f(\Theta)$ , если  $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$ , если

- Дана функция «черный ящик»  $\tilde{f}_i(\Theta) = f(\Theta) + \varepsilon_i$ ;
- Подсчет функции  $\tilde{f}$  – дорог.

Пример:  $f(\Theta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \Theta) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\Theta)d\mathbf{w}$ .

Прогноз:

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

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}, \Theta) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\Theta)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \Theta)}.$$

Замечание: При известном  $\Theta$  для получения прогноза используем

- Честный posterior  $p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}, \Theta)$ , когда есть сопряженность;
- Вариационную аппроксимацию;
- Сэмплирование  $\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K \sim p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}, \Theta)$ .

Вопрос 1: Каковы преимущества вариационной аппроксимации и сэмплирования?

Вопрос 2: Как определить  $\Theta$ ? Что есть  $\tilde{f}$ ?

# Максимизация обоснованности

Требуется:  $f(\Theta) \rightarrow \max_{\Theta \in \Theta}$ ,  $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$ , если

- Дана функция «черный ящик»  $\tilde{f}_i(\Theta) = f(\Theta) + \varepsilon_i$ ;
- Подсчет функции  $\tilde{f}$  – дорог.

Пример:  $f(\Theta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \Theta) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\Theta)d\mathbf{w}$ .

$$\tilde{f}(\Theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}_i), \mathbf{w}_i \sim p(\mathbf{w}|\Theta).$$

Идея: Предположим, что априори  $f(\Theta) \sim \text{GP}(\mathbf{0}, K(\cdot, \cdot))$ .

$$\tilde{f}(\Theta_i) = f(\Theta_i) + \varepsilon_i, \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(\varepsilon_i|0, \sigma^2).$$

Пусть известны  $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\Theta_1), \dots, \tilde{f}(\Theta_m)\|$ . Рассмотрим  $\Theta^*$ .

Обозначим  $\mathbf{K} = \|K(\Theta_i, \Theta_j)\|$ ,  $\mathbf{k} = \|K(\Theta_i, \Theta^*)\|$ ,  $K^{**} = K(\Theta^*, \Theta^*)$ .

$f(\Theta^*)|\tilde{f}(\Theta_1), \dots, \tilde{f}(\Theta_m) \sim \mathcal{N}(f^*|\mu^*, \sigma^{*2})$ , где

$$\mu^* = \sum_{i=1}^m \alpha_i K(\Theta^*, \Theta_i), \alpha = (\mathbf{K} + \sigma^2 \mathbf{I}_m)^{-1} \tilde{\mathbf{f}},$$

$$\sigma^{*2} = K^{**} - \mathbf{k}^{*\top} (\mathbf{K} + \sigma^2 \mathbf{I}_m)^{-1} \mathbf{k}^*.$$

Требуется:  $f(\Theta) \rightarrow \max_{\Theta \in \Theta}$ ,  $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$ , если

- Дана функция «черный ящик»  $\tilde{f}_i(\Theta) = f(\Theta) + \varepsilon_i$ ;
- Подсчет функции  $\tilde{f}$  – дорог.

## Схема байесовской оптимизации

- Выбираем исходную точку  $\Theta_0$  и вычисляем  $\tilde{f}(\Theta_0)$ ;
- На шаге  $l + 1$  строим  $\mu(\Theta)$  и  $\sigma^2(\Theta)$  с помощью условного нормального распределения по известному  $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\Theta_0), \dots, \tilde{f}(\Theta_l)\|$ ;
- Имеем некоторую функцию полезности  $u(\mu^*, \sigma^{*2})$ , выбираем следующую  $\Theta_{l+1}$  из условия  $u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) \rightarrow \max_{\Theta}$ .

Вопрос 1: Чем задача  $u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) \rightarrow \max_{\Theta}$  лучше исходной?

Вопрос 2: Как выбрать функцию полезности  $u(\cdot, \cdot)$ ?

# Схема байесовской оптимизации (продолжение)

- Выбираем исходную точку  $\Theta_0$  и вычисляем  $\tilde{f}(\Theta_0)$ ;
- На шаге  $l + 1$  строим  $\mu(\Theta)$  и  $\sigma^2(\Theta)$  с помощью условного нормального распределения по известному  $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\Theta_0), \dots, \tilde{f}(\Theta_l)\|$ ;
- Имеем некоторую функцию полезности  $u(\mu^*, \sigma^{*2})$ , выбираем следующую  $\Theta_{l+1}$  из условия  $u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) \rightarrow \max_{\Theta}$ .

## Замечания:

- $u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta))$  легко считается вместе с производными;
- При построении  $u(\cdot, \cdot)$  требуется соблюсти баланс между устранением неопределенности (exploration) и поиском в районе ожидаемого максимума (exploitation).

**Exploration:** Выбираем  $\Theta_{l+1}$ , где  $\sigma^{*2}(\Theta_{l+1})$  велико;

**Exploitation:** Выбираем  $\Theta_{l+1}$ , где  $\mu(\Theta_{l+1})$  велико.

**Вопрос 1:** Как построить функцию полезности  $u$ ?

**Вопрос 2:** Как откалибровать параметры ядерной функции и дисперсию шума  $\sigma^2$ ?



## Примеры функции полезности

- Верхняя доверительная граница (GP upper confidence band)

$$u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) = \mu^*(\Theta) + \xi \sigma^*(\Theta);$$

- Макс. вероятность улучшения (Maximum probability of improvement)

$$u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) = \mathbb{P} \left( f(\Theta) > \max_{i \in \overline{1, l}} f(\Theta_i) \right).$$

Если  $\sigma^2 = 0$ , то  $u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) = \Phi((\mu^* - \max_{i \in \overline{1, l}} f(\Theta_i))/\sigma^*);$

- Ожидаемое улучшение (expected improvement)

$$u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) = \mathbb{E} \max \left( 0, f(\Theta) - \max_{i \in \overline{1, l}} f(\Theta_i) \right);$$

Если  $\sigma^2 = 0$ , то

$$u(\mu^*(\Theta), \sigma^{*2}(\Theta)) = \sigma^* \mathbb{E} \max \left( 0, \xi - \frac{\mu^* - \max_{i \in \overline{1, l}} f(\Theta_i)}{\sigma^*} \right), \xi \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

**Вопрос 1:** Какие еще функции полезности можно предложить?

**Вопрос 2:** Как откалибровать параметры ядерной функции и дисперсию шума  $\sigma^2$ ?

**Вопрос 3:** Какие еще применения (кроме максимизации обоснованности) байесовской оптимизации вы видите?

# Калибрация параметров ядерной функции и шума

$$f(\Theta) \sim \text{GP}(\mathbf{0}, K(\cdot, \cdot)).$$

$$\tilde{f}(\Theta_i) = f(\Theta_i) + \varepsilon_i, \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

$$\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\Theta_1), \dots, \tilde{f}(\Theta_m)\|, \mathbf{K} = \|K(\Theta_i, \Theta_j)\|.$$

Тогда  $\tilde{\mathbf{f}} \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{f}}|\mathbf{0}, \mathbf{K} + \sigma^2\mathbf{I}_m)$ .

Обозначим  $\mathbf{q}$  – параметры ядерной функции,  $\mathbf{C}(\mathbf{q}, \sigma^2) = \mathbf{K} + \sigma^2\mathbf{I}_m$ .

**Идея:** Найдем  $\mathbf{q}, \sigma^2$  из максимума правдоподобия наблюдаемых данных.

$$L(\mathbf{q}, \sigma^2) = -2 \log p(\tilde{\mathbf{f}}) = \log \det \mathbf{C}(\mathbf{q}, \sigma^2) + \tilde{\mathbf{f}}^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{q}, \sigma^2) \tilde{\mathbf{f}} \rightarrow \min_{\mathbf{q}, \sigma^2}.$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \text{tr} \left( \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial q_i} \right) - \tilde{\mathbf{f}}^T \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial q_i} \mathbf{C}^{-1} \tilde{\mathbf{f}} \quad (\text{то же для } \sigma^2).$$

**Замечание 1:** Для применения ML оценки требуется достаточная по размеру выборка.

**Замечание 2:** На параметры ядерной функции  $\mathbf{q}$  и дисперсию шума  $\sigma^2$  можно ввести априорное распределение.

**Замечание 3:** Часто для максимизации обоснованности можно использовать вариационную аппроксимацию (максимизация нижней оценки), а уже для апостериорного распределения – сэмплирование в случае сильной зависимости между переменными.

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 78-88, 303-320.
- 2 MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
- 3 MacKay, David JC. "The evidence framework applied to classification networks." Neural computation 4.5 (1992): 720-736.
- 4 Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
- 5 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.