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 $\mathbf{w}_{\text{ML}}$, 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.
- 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 мультимоделей.
- Сэмплирование. Схема Гиббса и Метрополиса-Хастингса. HMC.

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 $t_1,\ \ldots,\ t_q$, тогда для GP имеем

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

$\mathbf{m} = [m_x(t_1),\ \ldots,\ m_x(t_q)]^{\mathsf{T}}$, $\mathbf{\Sigma} = \|\mathbf{\Sigma}_{ij}\| = \|R_x(t_i - t_j)\|$.

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

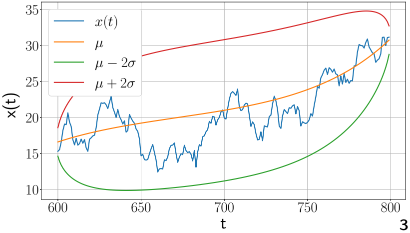
$\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1 \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_2|\boldsymbol{\mu}_2 - \mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1),\ \mathbf{\Sigma}_{22}^{-1})$.

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 σ^2 и λ?

Возможные модификации:

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



Примеры ядер

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);
- $K(x_1,\, x_2) = \sigma^2 \left(1 + \sqrt{3} r / l\right) \exp\left(-\sqrt{3} r / l\right)$ (Mattern 3/2);
- $K(x_1,\, x_2) = \sigma^2 \left(1 + \sqrt{5} r / l + \frac{5}{3} r^2 / l^2\right) \exp\left(-\sqrt{5} r / l\right)$ (Mattern 5/2);
- $K(x_1,\, x_2) = \sigma^2 \exp\left(-2 \dfrac{\sin^2(\pi r)}{l^2}\right)$ (Periodic);
- $K(x_1,\, x_2) = \sum\limits_i \sigma_i^2 x_1^i x_2^i$ (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: $f(\boldsymbol{\Theta}) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta} \in \Theta}$, $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$, если

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

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

Прогноз:

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

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

Замечание: При известном $\boldsymbol{\Theta}$ для получения прогноза используем

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

Вопрос 1: Каковы преимущества вариационной аппроксимации и сэмплирования?

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

Максимизация обоснованности

Требуется: $f(\boldsymbol{\Theta}) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta}\in\Theta}$, $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$, если

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

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

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

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

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

Пусть известны $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_1),\, \dots,\, \tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_m)\|$. Рассмотрим $\boldsymbol{\Theta}^*$.

Обозначим $\mathbf{K} = \|K(\boldsymbol{\Theta}_i,\, \boldsymbol{\Theta}_j)\|$, $\mathbf{k}^* = \|K(\boldsymbol{\Theta}_i,\, \boldsymbol{\Theta}^*)\|$, $K^{**} = K(\boldsymbol{\Theta}^*,\, \boldsymbol{\Theta}^*)$.

$f(\boldsymbol{\Theta}^*)|\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_1),\, \dots,\, \tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_m) \sim \mathcal{N}(f^*|\mu^*,\, \sigma^{*2})$, где

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

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

Требуется: $f(\boldsymbol{\Theta}) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta} \in \Theta}$, $\Theta \subseteq \mathbb{R}^n$, если

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

Схема байесовской оптимизации

- Выбираем исходную точку $\boldsymbol{\Theta}_0$ и вычисляем $\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_0)$;
- На шаге $l+1$ строим $\mu(\boldsymbol{\Theta})$ и $\sigma^2(\boldsymbol{\Theta})$ с помощью условного нормального распределения по известному $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_0), \ldots, \tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_l)\|$;
- Имеем некоторую функцию полезности $u(\mu^*, \sigma^{*2})$, выбираем следующую $\boldsymbol{\Theta}_{l+1}$ из условия $u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}), \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta}}$.

Вопрос 1: Чем задача $u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}), \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) \to \max\limits_{\boldsymbol{\Theta}}$ лучше исходной?

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

Схема байесовской оптимизации (продолжение)

- Выбираем исходную точку $\mathbf{\Theta}_0$ и вычисляем $\tilde{f}(\mathbf{\Theta}_0)$;
- На шаге $l+1$ строим $\mu(\mathbf{\Theta})$ и $\sigma^2(\mathbf{\Theta})$ с помощью условного нормального распределения по известному $\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\mathbf{\Theta}_0), \ldots, \tilde{f}(\mathbf{\Theta}_l)\|$;
- Имеем некоторую функцию полезности $u(\mu^*, \sigma^{*2})$, выбираем следующую $\mathbf{\Theta}_{l+1}$ из условия $u(\mu^*(\mathbf{\Theta}), \sigma^{*2}(\mathbf{\Theta})) \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$.

Замечания:

- $u(\mu^*(\mathbf{\Theta}), \sigma^{*2}(\mathbf{\Theta}))$ 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 $\mathbf{\Theta}_{l+1}$, где $\sigma^{*2}(\mathbf{\Theta}_{l+1})$ велико;
Exploitation: Выбираем $\mathbf{\Theta}_{l+1}$, где $\mu(\mathbf{\Theta}_{l+1})$ велико.

Вопрос 1: Как построить функцию полезности u?
Вопрос 2: Как откалибровать параметры ядерной функции и дисперсию шума σ^2?

Примеры функции полезности

- Верхняя доверительная граница (GP upper confidence band)
  $u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}),\ \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) = \mu^*(\boldsymbol{\Theta}) + \xi\sigma^*(\boldsymbol{\Theta})$;
- Макс. вероятность улучшения (Maximum probability of improvement)
  $$u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}),\ \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) = \mathsf{P}\left(f(\boldsymbol{\Theta}) > \max_{i\in\overline{1,\,l}} f(\boldsymbol{\Theta}_i)\right).$$
  Если $\sigma^2 = 0$, то $u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}),\ \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) = \Phi((\mu^* - \max_{i\in\overline{1,\,l}} f(\boldsymbol{\Theta}_i))/\sigma^*)$;
- Ожидаемое улучшение (expected improvement)
  $$u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}),\ \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) = \mathsf{E}\max\left(0,\ f(\boldsymbol{\Theta}) - \max_{i\in\overline{1,\,l}} f(\boldsymbol{\Theta}_i)\right);$$
  Если $\sigma^2 = 0$, то
  $$u(\mu^*(\boldsymbol{\Theta}),\ \sigma^{*2}(\boldsymbol{\Theta})) = \sigma^*\mathsf{E}\max\left(0,\ \xi - \frac{\mu^* - \max_{i\in\overline{1,\,l}} f(\boldsymbol{\Theta}_i)}{\sigma^*}\right),\ \xi \sim \mathcal{N}(0,\ 1).$$

Вопрос 1: Какие еще функции полезности можно предложить?

Вопрос 2: Как откалибровать параметры ядерной функции и дисперсию шума σ^2?

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

Калибрация параметров ядерной функции и шума

$f(\boldsymbol{\Theta}) \sim \mathrm{GP}(\mathbf{0},\ K(\cdot,\ \cdot))$.
$\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_i) = f(\boldsymbol{\Theta}_i) + \varepsilon_i,\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0,\ \sigma^2)$.
$\tilde{\mathbf{f}} = \|\tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_1),\ \dots,\ \tilde{f}(\boldsymbol{\Theta}_m)\|,\ \mathbf{K} = \|K(\boldsymbol{\Theta}_i,\ \boldsymbol{\Theta}_j)\|$.
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 $\mathbf{q}$, σ^2 из максимума правдоподобия наблюдаемых данных.

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

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

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

Замечание 2: На параметры ядерной функции $\mathbf{q}$ и дисперсию шума σ^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.

Литература

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.