Байесовский подход к машинному обучению

Александр Дьяконов

05 апреля 2022 года

План

Формула Байеса

Оптимальное решение задач классификации - байесовский алгоритм

случай нормальных распределений

линейный дискриминантный анализ (LDA)

квадратичный дискриминантный анализ (QDA)

Наивный байес (naive Bayes)

Байесовский подход в машинном обучении

Подбрасывание нечестной монетки

Линейная регрессия

MAP

Байесовские оценки параметров: точечные, интервальные

Иерархические модели

Что такое случайность

Задача

Тест на болезнь «зеленуху» имеет вероятность ошибки 0.1 (как позитивной, так и негативной), зеленухой болеет 10% населения. Какая вероятность того, что человек болен зеленухой, если у него позитивный результат теста?

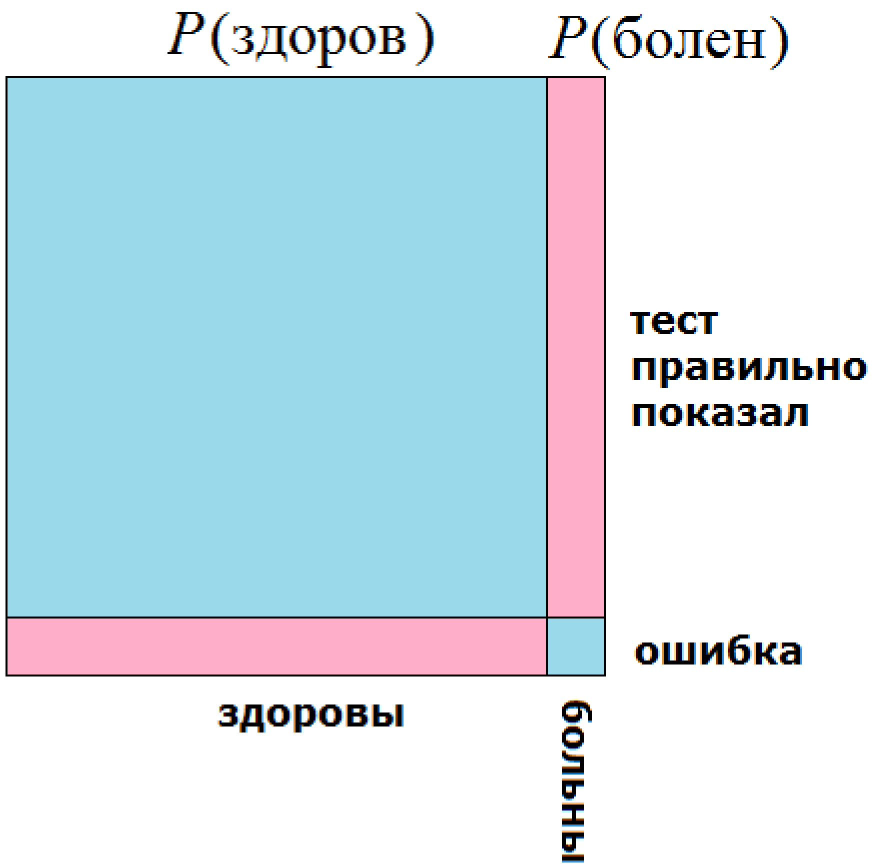
$$P(\text{болен}\,|\,+)=\frac{P(+\,|\,\text{болен})P(\text{болен})}{P(+\,|\,\text{болен})P(\text{болен})+P(+\,|\,\text{здоров})P(\text{здоров})}$$

$$\frac{0.9\cdot 0.1}{0.9\cdot 0.1+0.1\cdot 0.9}=0.5$$

Формула Байеса

$$P(A\,|\,B)=\frac{P(B\,|\,A)P(A)}{P(B)}$$

Задача

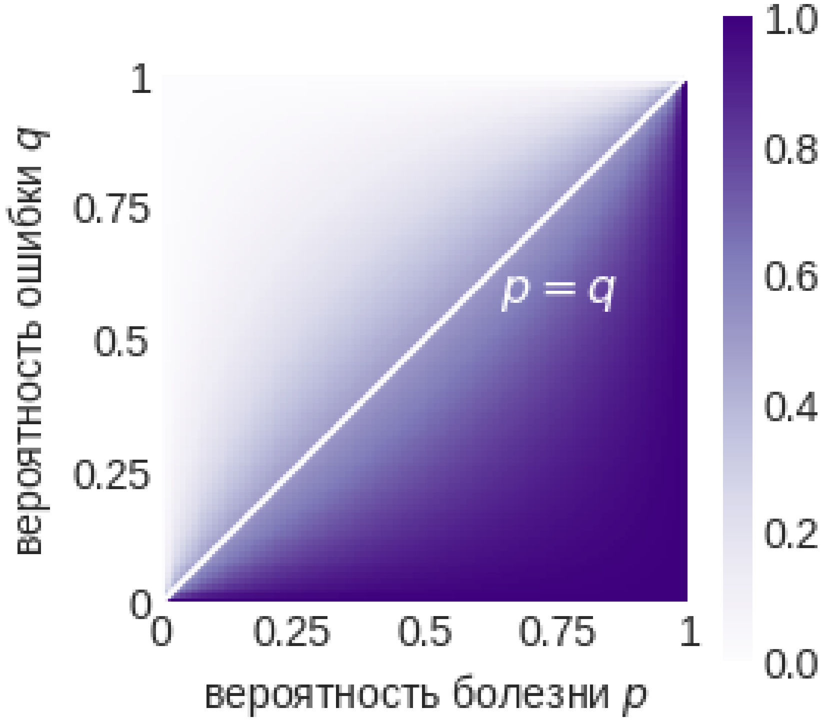


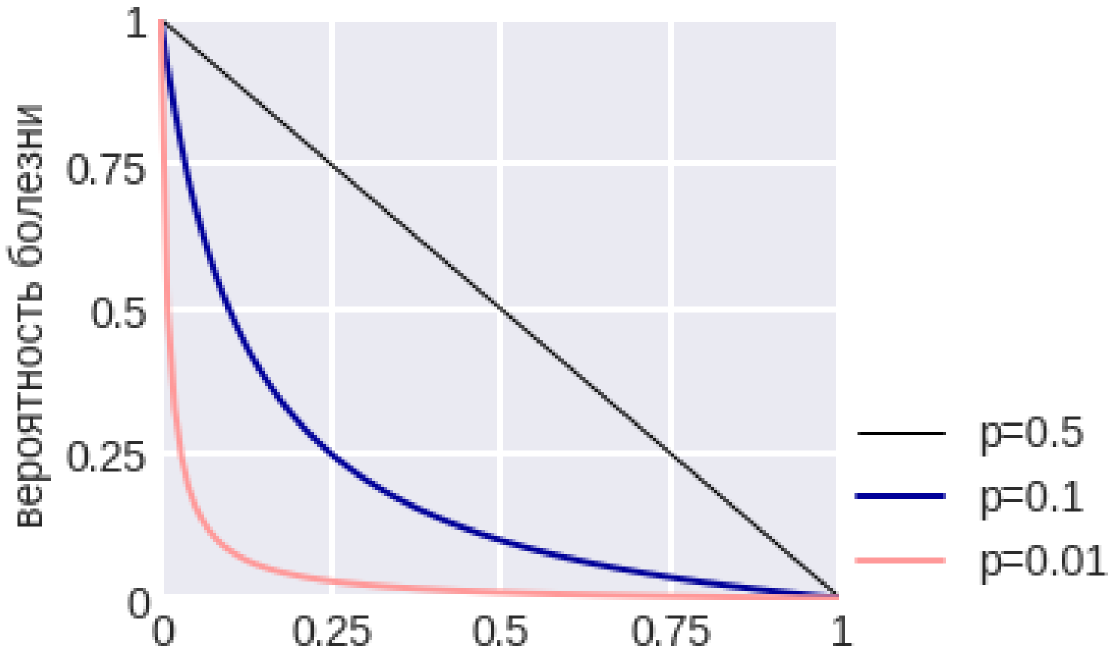
q – **вероятность неправильного ответа прибора**

p – **вероятность заболеть зеленухой**

$$P(\text{болен}\,|\,+) = \frac{(1-q)p}{(1-q)p + q(1-p)} = \frac{p - qp}{p + q - 2qp}$$

Задача





При $p = q$ **искомая вероятность** 0.5

Чтобы диагностировать очень редкие заболевания нужен сверхточный прибор!!!

Нет ли здесь где-то обмана? Почему в жизни мы больше верим тестам?

Оптимальное решение задач классификации

Если можем оценить вероятности принадлежности к классам
(conditional class probabilities)

$$p_k(x) = P(y = k \mid x),\ k = 1, 2, \ldots, l,$$

тогда байесовский оптимальный классификатор

$$a(x) = \arg\max_k (p_k(x))$$

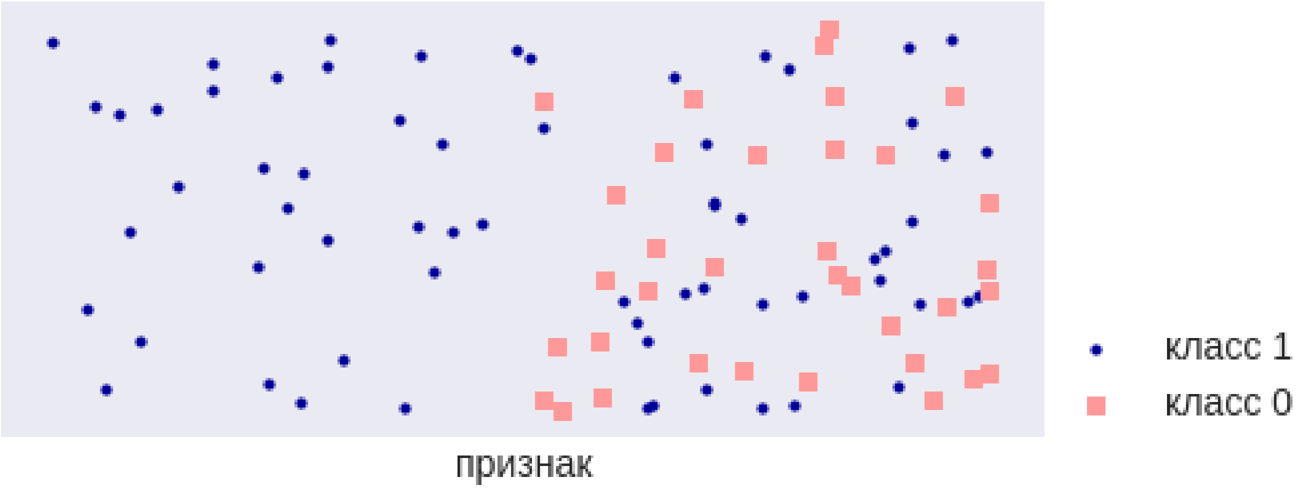
$$p_k(x) = P(y = k \mid x) = \frac{P(x \mid y = k) \cdot P(y = k)}{P(x)}$$

Байесовский оптимальный классификатор имеет наименьшую ошибку в смысле точности классификации

$P(x \mid Y = k)$ **– плотность распределения (density) объектов класса**
$P(Y = k)$ **– априорная вероятность (prior probability) класса**

Байесовский оптимальный классификатор

Случай двух классов:



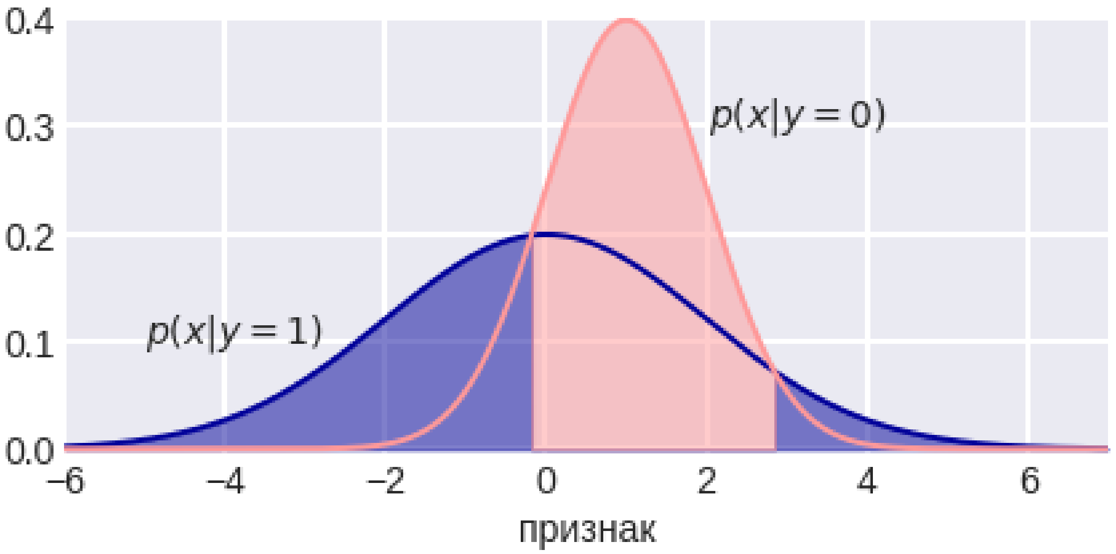
$$p_1(x) = \frac{p(x \mid y=1) \cdot P(y=1)}{P(x)}$$

$$p_0(x) = \frac{p(x \mid y=0) \cdot P(y=0)}{P(x)}$$

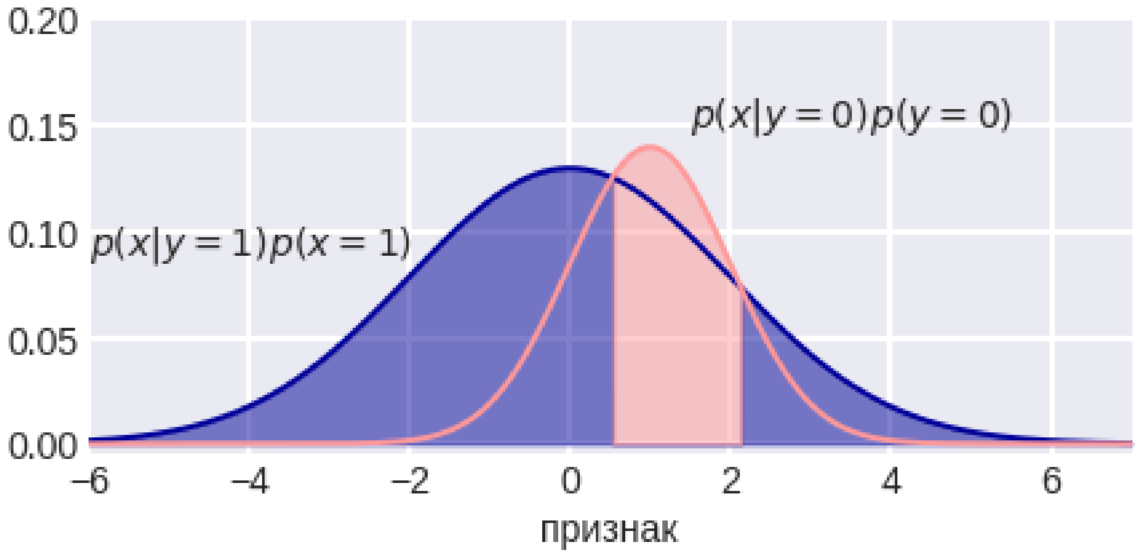
$$p_1(x) <> p_0(x) \Leftrightarrow p(x \mid y=1) \cdot P(y=1) <> p(x \mid y=0) \cdot P(y=0)$$

P **– вероятность,** p **– плотность**

Частный случай одномерных нормальных распределений



плотности классов



∝ апостериорные вероятности

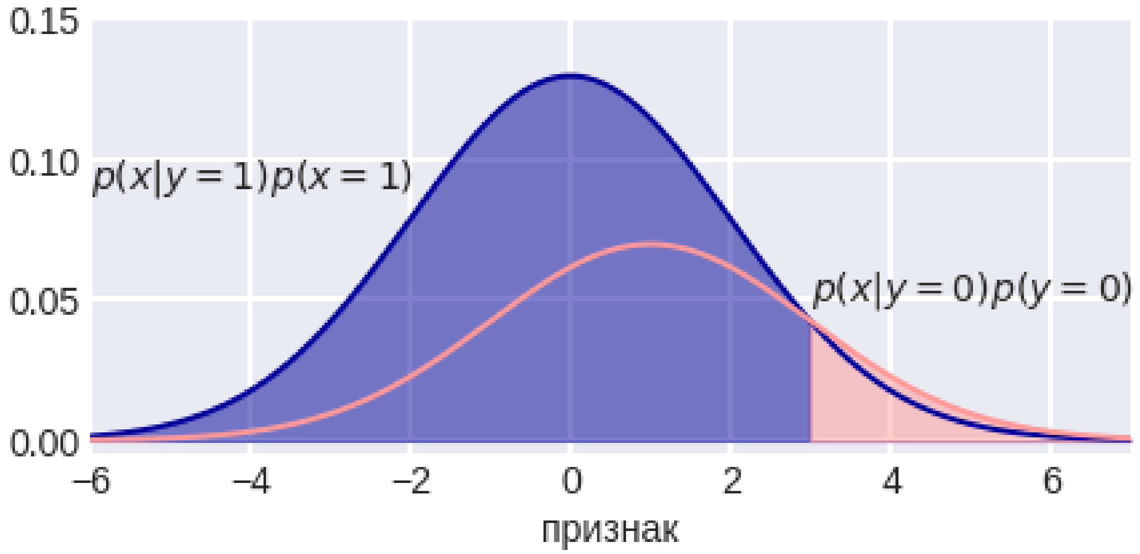
$$p(x\,|\,y=k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu_k}{\sigma_k}\right)^2}$$

$$\frac{p(x\,|\,y=1)}{p(x\,|\,y=0)}<>\frac{P(y=0)}{P(y=1)}$$

$$p(x\,|\,y=1)\cdot P(y=1)<>p(x\,|\,y=0)\cdot P(y=0)$$

$$\frac{(x-\mu_0)^2}{\sigma_0{}^2}-\frac{(x-\mu_1)^2}{\sigma_1{}^2}<>\ln\left(\frac{P(y=0)\cdot\sigma_1}{P(y=1)\cdot\sigma_0}\right)$$

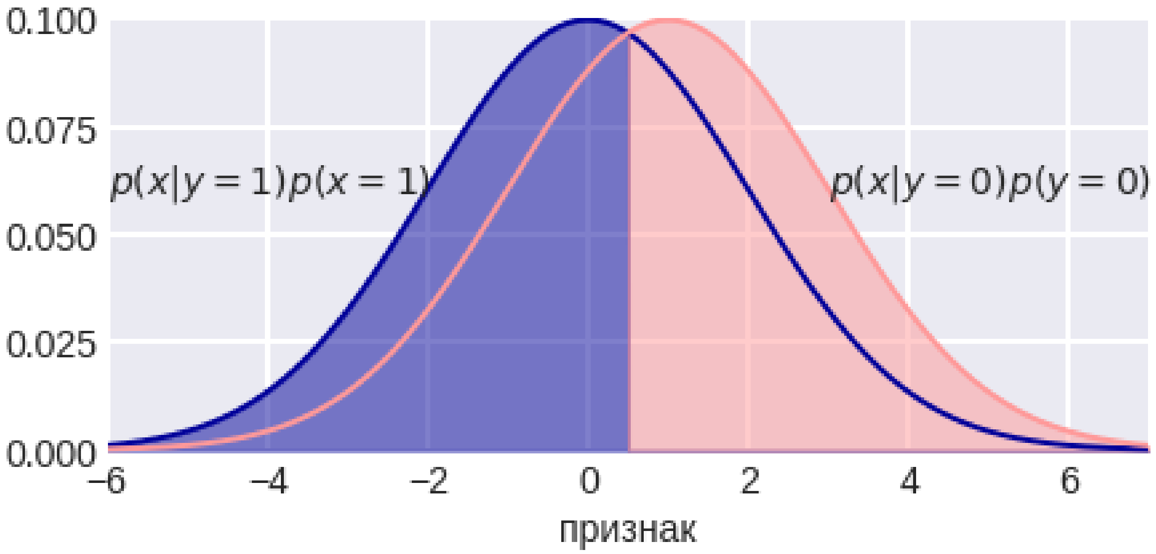
Частный случай одномерных нормальных распределений



если $\sigma_0 = \sigma_1$,
то разделяющая поверхность
(decision boundary) – точка

если $\sigma_0 \neq \sigma_1$,
то разделяющая поверхность –
две точки

Частный случай одномерных нормальных распределений



если $\sigma_0 = \sigma_1$ **и классы равновероятны,**

то разделяющая поверхность $\dfrac{\mu_1 + \mu_2}{2}$

Оценка параметров

Как оценить описанные выше параметры?

$$P(y=k)=\frac{|\{i\mid y_i=k\}|}{m}$$ **– процент объектов класса** k **из известных**

$$\mu_k=\frac{1}{|\{i\mid y_i=k\}|}\sum_{i:y_i=k}x_i$$

$$\Sigma_k=\frac{1}{|\{i\mid y_i=k\}|-1}\sum_{i:y_i=k}(x_i-\mu_k)(x_i-\mu_k)^{\mathrm{т}}$$

Частный случай многомерных нормальных распределений

$$p(x \mid y=k) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_k|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^{\mathrm{T}} \Sigma_k^{-1} (x-\mu_k)}$$

$$\frac{p(x \mid y=1)}{p(x \mid y=0)} <> \frac{P(y=0)}{P(y=1)}$$

$$\frac{\frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_1|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^{\mathrm{T}} \Sigma_1^{-1} (x-\mu_1)}}{\frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_0|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_0)^{\mathrm{T}} \Sigma_0^{-1} (x-\mu_0)}} <> \frac{P(y=0)}{P(y=1)}$$

Частный случай многомерных нормальных распределений

$$\frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^{\mathrm{T}}\Sigma_1^{-1}(x-\mu_1)}}{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_0)^{\mathrm{T}}\Sigma_0^{-1}(x-\mu_0)}} <> \frac{|\Sigma_1|^{1/2}\,P(y=0)}{|\Sigma_0|^{1/2}\,P(y=1)}$$

$$+(x-\mu_0)^{\mathrm{T}}\Sigma_0^{-1}(x-\mu_0)-(x-\mu_1)^{\mathrm{T}}\Sigma_1^{-1}(x-\mu_1) <> 2\ln\frac{|\Sigma_1|^{1/2}\,P(y=0)}{|\Sigma_0|^{1/2}\,P(y=1)}$$

$$\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}(\Sigma_0^{-1}-\Sigma_1^{-1})x-x^{\mathrm{T}}(\Sigma_0^{-1}\mu_0-\Sigma_1^{-1}\mu_1) <> \mu_1^{\mathrm{T}}\Sigma_1^{-1}\mu_1-\mu_0^{\mathrm{T}}\Sigma_0^{-1}\mu_0+2\ln\frac{|\Sigma_1|^{1/2}\,P(y=0)}{|\Sigma_0|^{1/2}\,P(y=1)}$$

Частный случай – линейный дискриминантный анализ (LDA)

$$\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}(\Sigma_0^{-1}-\Sigma_1^{-1})x - x^{\mathrm{T}}(\Sigma_0^{-1}\mu_0-\Sigma_1^{-1}\mu_1) <> \mathrm{const}$$

если ковариационные матрицы равны

$$x^{\mathrm{T}}w <> \mathrm{const}$$

– линейная разделяющая поверхность!

так, кстати, выводится логистическая регрессия (была иллюстрация)

приём в ML – часто ковариационные матрицы полагают равными, чтобы оценивать меньше параметров (parameter sharing)

Логистическая регрессия более робастна, лучше работает, когда априорные предположения не выполняются

LDA: логистическая регрессия

маленькое отступление…

Решаем бинарную задачу классификации
Предполагаем, что

$$p(y=1\,|\,x)=\frac{1}{1+\exp(-w^{\mathrm{T}}x)}=\frac{\exp(+w^{\mathrm{T}}x)}{1+\exp(+w^{\mathrm{T}}x)}$$

$$p(y=0\,|\,x)=1-p(y=0\,|\,x)=\frac{1}{1+\exp(+w^{\mathrm{T}}x)}$$

$$\frac{p(y=1\,|\,x)}{p(y=0\,|\,x)}=\exp(-w^{\mathrm{T}}x)$$

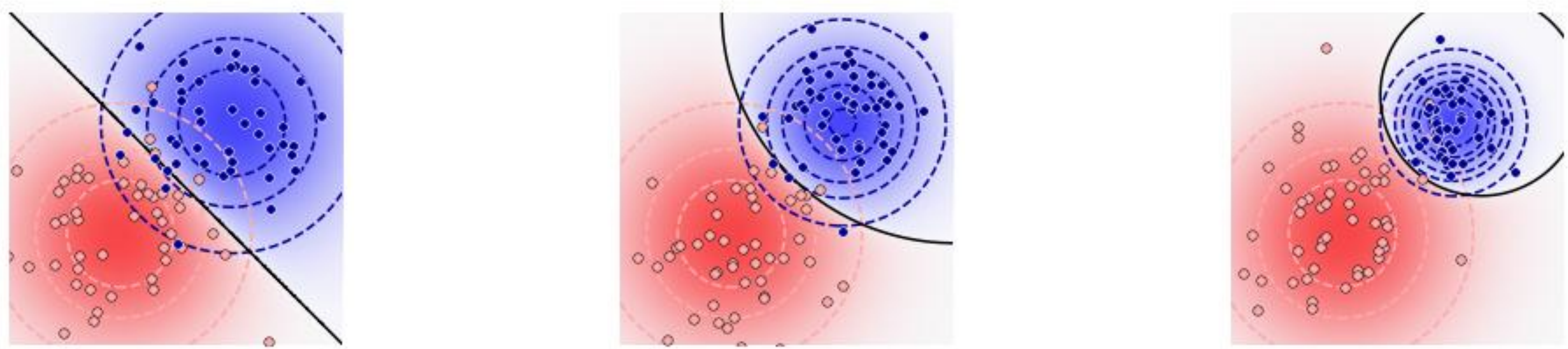
т.е. формально «чёткая классификация» – линейная модель

Частный случай – квадратичный дискриминантный анализ (QDA)

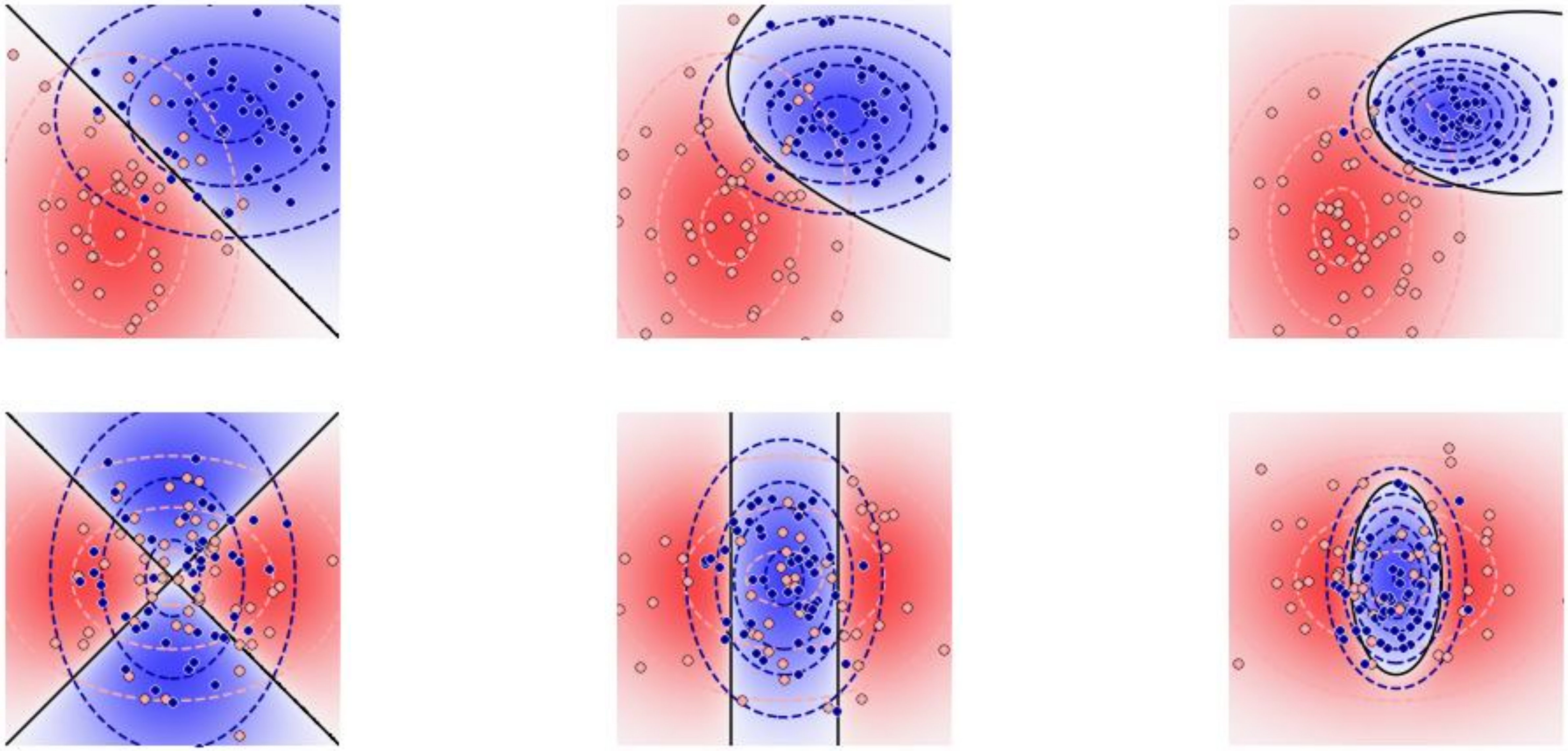
$$\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Wx - x^{\mathrm{T}}w <> \mathrm{const}$$

не просто разделяемая поверхность, а теоретически обоснованная!

Gaussian Bayes Classifier



Gaussian Bayes Classifier



Минимизация среднего риска

$$\sum_k \sum_s \lambda_{ks} P(y=k) P(a(x)=s \mid y(x)=k)$$

λ_{ks} **– штраф за отнесение алгоритмом объекта k-го класса к s-му**

$P(y=k)P(a(x)=s \mid y(x)=k)$ **– вероятность такого события**

Оптимальный классификатор:

$$s = \arg\min_s \sum_k \lambda_{ks} \cdot P(y=k \mid x) =$$
$$= \arg\min_s \sum_k \lambda_{ks} \cdot P(y=k) \cdot P(x \mid y=k)$$

Наивный байес (naive Bayes)

$$p(x=(X_1,\ldots,X_n)\,|\,y)=\prod_{j=1}^{n}p_j(X_j\,|\,y)$$

Плотность = произведение плотностей по всем признакам

(т.е. предполагается независимость признаков)

Для нормальных распределений ~ диагональность матриц ковариаций

Сильное предположение, но часто так получается неплохое решение!

(~регуляризация – поиск решений среди простых)

Бонус: оценивать не многомерную, а одномерные плотности

(меньше требования к объёму выборки)

считается, что наивный Байес неплох для больших размерностей...

пример применения наивного Байеса – mean target encoding

Байесовский алгоритм – итог

+ теоретически наилучший алгоритм

– нужна вероятностная природа данных, знание распределений, их точная оценка

тут, в некотором смысле, накопление ошибок

+ большинство естественных решений – на байесовском подходе

+ получили теоретические обоснования простых алгоритмов

(линейных и квадратичных – сложнее не надо…)

+ возможности для разделения параметров, «наивизации»

Байесовский подход в машинном обучении

$$p(\theta\,|\,D)=\frac{p(D\,|\,\theta)\cdot p(\theta)}{p(D)}=\frac{p(D\,|\,\theta)\cdot p(\theta)}{\int\limits_{\theta}p(D\,|\,\theta)p(\theta)\partial\theta}$$

- D – **данные**
- $p(D)$ – **вероятность данных (Marginal likelihood/ Model evidence)**

  нормировка, чтобы получалась плотность
- θ – **параметр (модели)**
- $p(\theta)$ – **априорная вероятность/распределение (prior)**
- $p(D\,|\,\theta)$ – **правдоподобие (likelihood)**
- $p(\theta\,|\,D)$ – **апостериорная вероятность/распределение (posterior)**

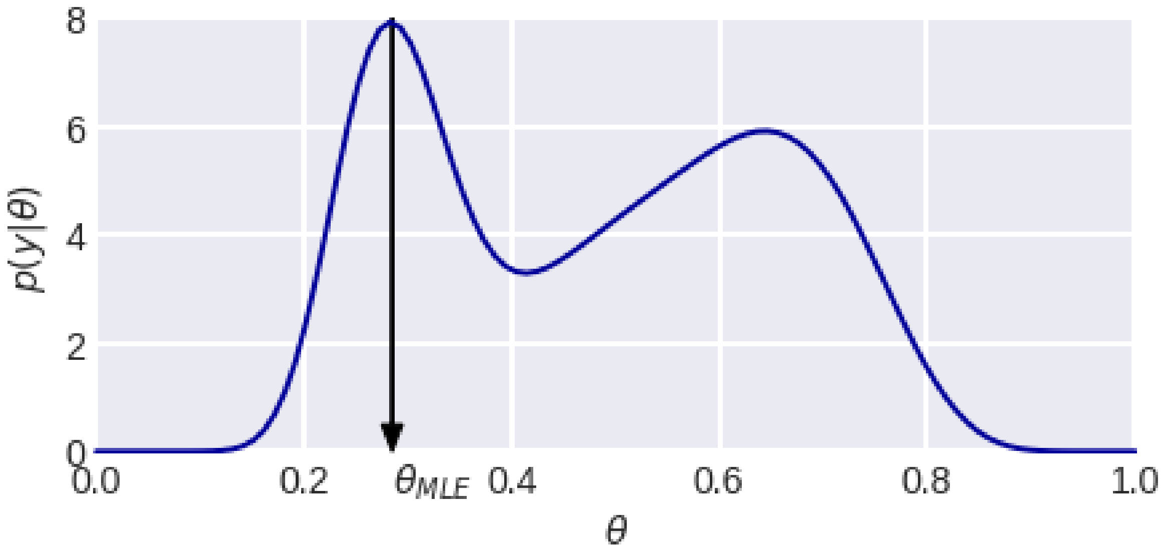
Метод максимального правдоподобия

Независимые одинаково распределённые с.в.: $y_1, \ldots, y_m$

Распределение известно с точностью до параметра: $p(y \mid \theta)$

(можно пока считать, что это плотность)

Правдоподобие (likelihood): $p(y \mid \theta) = p(y_1, \ldots, y_m \mid \theta) = \prod_{i=1}^{m} p(y_i \mid \theta) \to \max$



Находим значение параматра(ов), которое делает наблюдаемые данные максимально правдоподобными

MLE = Maximum Likelihood Estimation

Пример: подбрасывание нечестной монетки (coin-toss problem)

$$y_i = \begin{cases} 1, & \text{орёл}, \\ 0, & \text{решка}. \end{cases}$$

Делаем предположение, что подчиняется распределению Бернулли:

$$p(y_i \mid \theta) = \theta^{y_i}(1-\theta)^{1-y_i}$$

Логарифм правдоподобия: $\sum_{i=1}^{m} \log p(y_i \mid \theta) = \sum_{i=1}^{m} y_i \log\theta + (1-y_i)\log(1-\theta)$

на что похоже выражение под суммой?

Если взять производную и приравнять к нулю…

$$\hat{\theta}_{\text{MLE}} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$$

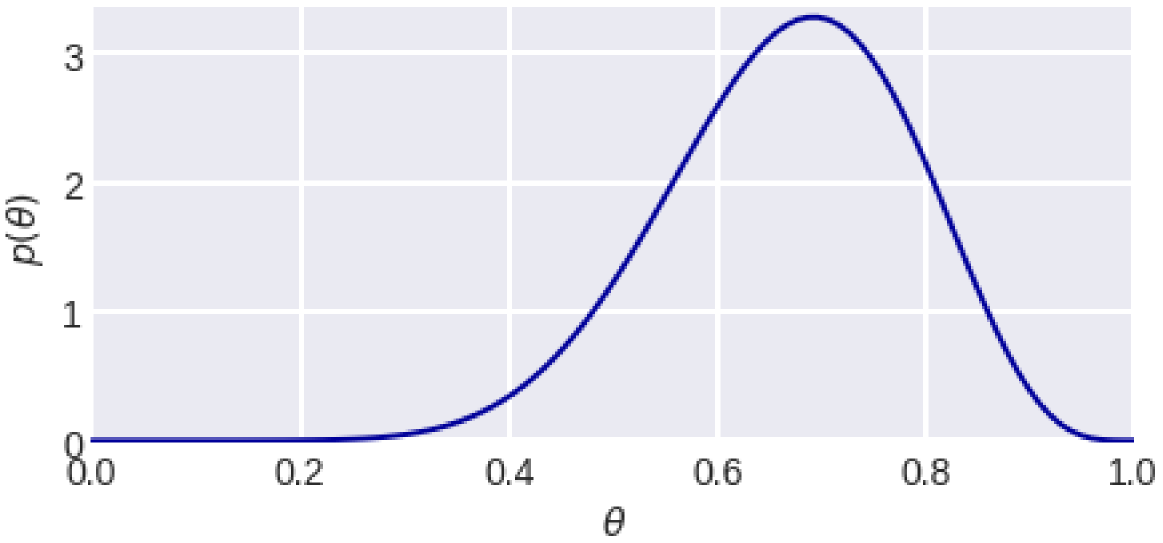
~ оценка максимального правдоподобия вероятности выпадения орла ч.т.д.?

Что не так с оценкой MLE

- переобучение…
- ненадёжность при малом числе экспериментов
- нет возможности внести априорные предположения о вероятности

Байесовский подход в нашем примере

Пусть есть априорное распределение параметра $p(\theta)$ (prior):



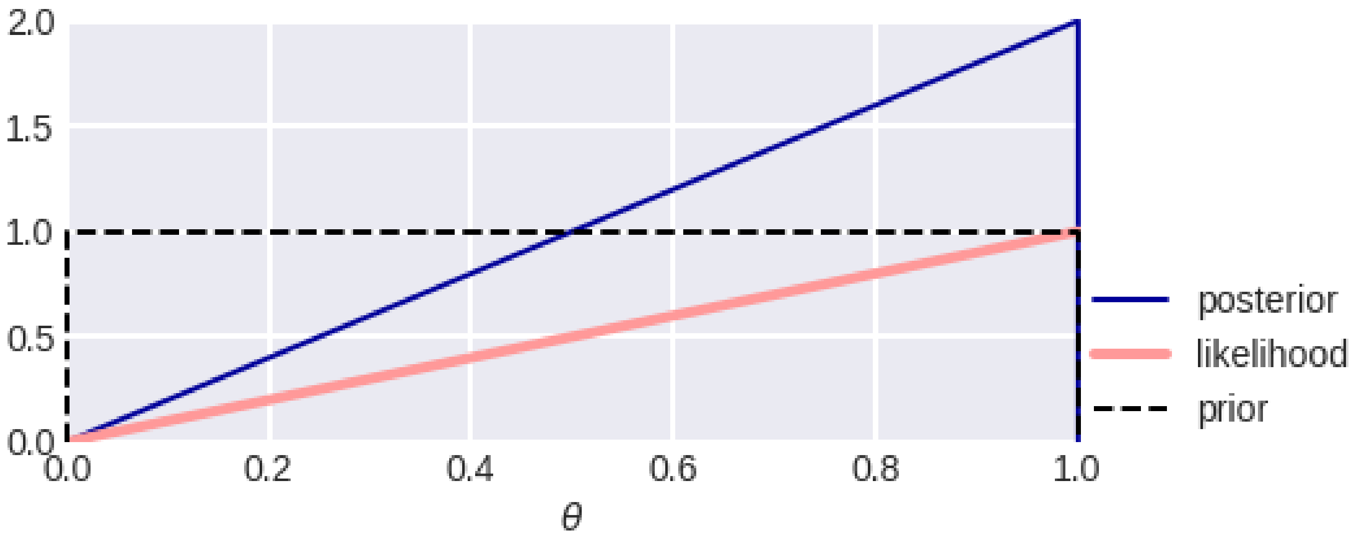
это будет формализация априорных знаний + регуляризация!

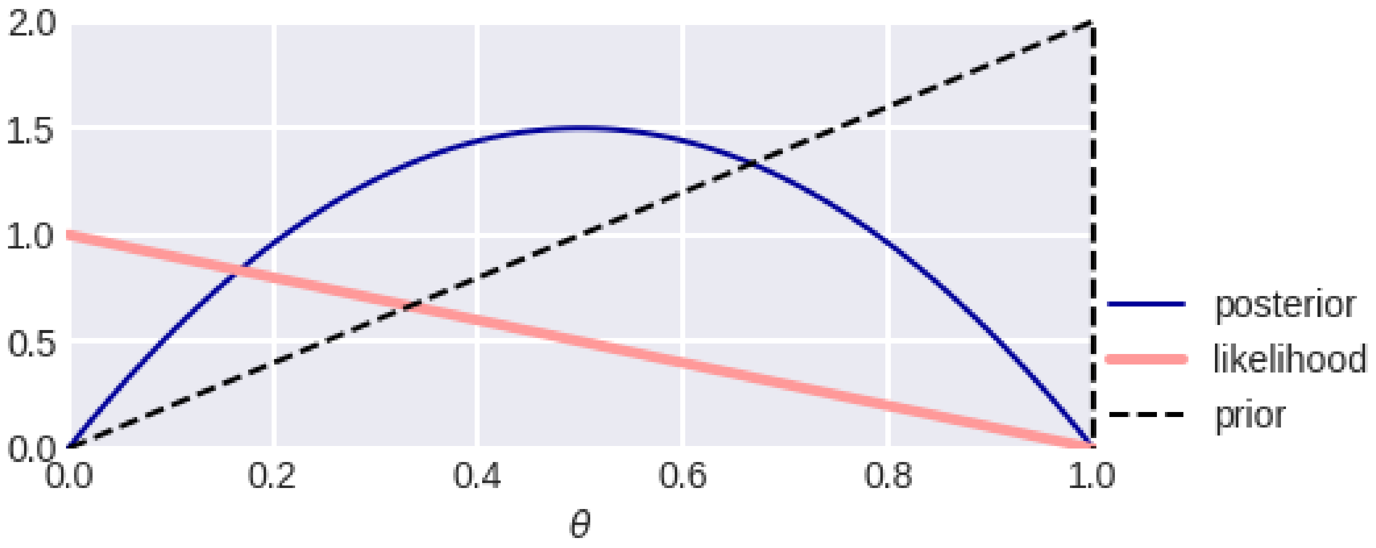
Замечание: равномерное распределение – отсутствие априорных знаний…

Байесовский подход в нашем примере

Формула Байеса (Bayes rule)

$$p(\theta\,|\,y)=\frac{p(y\,|\,\theta)\,p(\theta)}{p(y)}$$





ничего не знаем ($p(\theta)=1$ **)** $\to$
один орёл ($p(y_1=1\,|\,\theta)=\theta^1(1-\theta)^{1-1}=\theta$ **)** $\to$

$$p(\theta\,|\,y_1=1)=2\theta$$

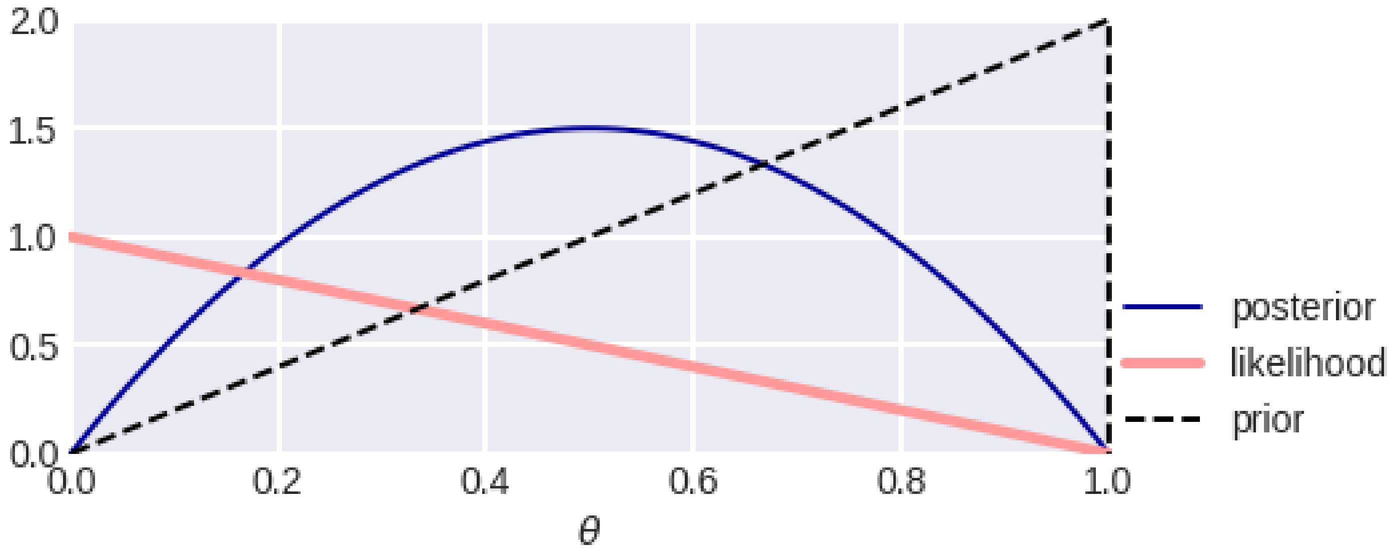
знания как будто был один орёл (или был в 1м эксперименте) $p(\theta\,|\,y_1=1)=2\theta\to$

одна решка

($p(y_2=0\,|\,\theta)=\theta^0(1-\theta)^{1-0}=1-\theta$ **)** $\to$

$$p(\theta\,|\,y_2=0)=6\theta(1-\theta)$$

Байесовский подход в нашем примере



$$p(\theta \mid y_1 = 1, y_2 = 0) = 6\theta(1-\theta)$$

В итоге получим распределение на множестве значений параметра!

Как выбрать конкретное значение параметра – дальше – пока моду…

Байесовский подход в нашем примере

MLE: $p(y\,|\,\theta)\to\max$

MAP: $p(\theta\,|\,y)\to\max$

Теперь максимизируем апостериорную вероятность (posterior distribution)

MAP (Maximum A Posteriori)

$$\log p(\theta\,|\,y)=\log p(y\,|\,\theta)+\log p(\theta)-\log p(y)$$

$$\log p(y\,|\,\theta)+\log p(\theta)\to\max$$

второе слагаемое – регуляризатор,

т.е. это как бы MLE + регуляризация

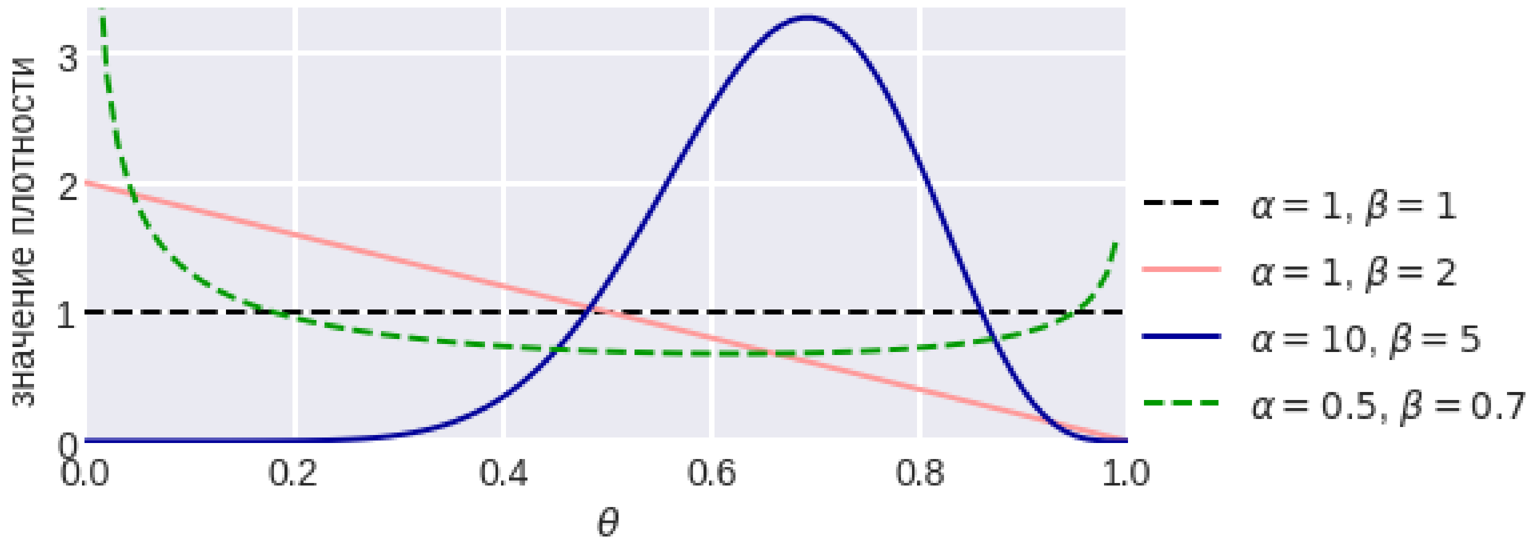
При равномерном распределении регуляризатор исчезает

Байесовский подход в примере с монетой

Априорное Бета-распределение $\theta \sim \mathrm{Beta}(\alpha, \beta)$**:**

$$p(\theta) = \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}$$

α, β **– гиперпараметры априорного распределения**



Байесовский подход в примере с монетой

$$\log p(y\,|\,\theta) + \log p(\theta) =$$

$$= \sum_{i=1}^{m} y_i \log\theta + (1-y_i)\log(1-\theta) + (\alpha-1)\log\theta + (\beta-1)\log(1-\theta) + \mathrm{const}$$

пренебрегаем константами

Берём производную и приравниваем к нулю:

$$\hat{\theta}_{\mathrm{MAP}} = \frac{\sum_{i=1}^{m} y_i + \alpha - 1}{m + \alpha + \beta - 2}$$

узнаём «сглаживание по Лапласу»

Для равномерного априорного распределения ($\alpha = \beta = 1$) оценки MLE и MAP совпадают

Оценку можно трактовать в терминах наличия априорных экспериментов

Особенности байесовского подхода

ММП даёт точечную оценку параметра (конкретное значение).
Байесовский подход – целое распределение параметра – апостериорное!

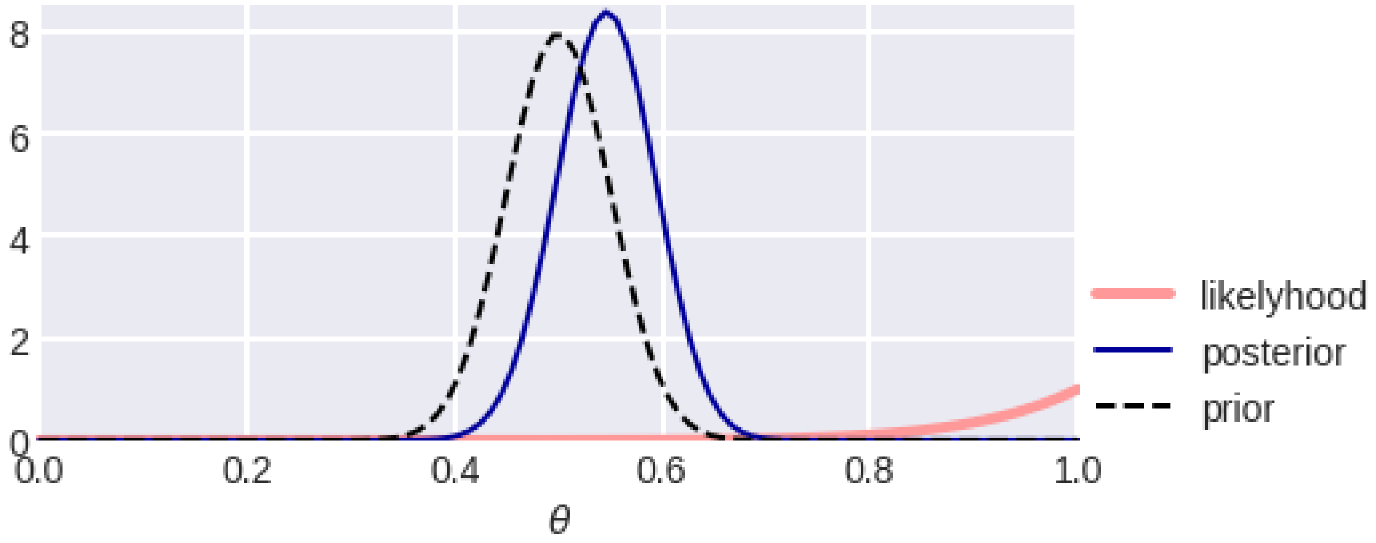
$$p(\theta \mid y) = \frac{p(y \mid \theta)\,p(\theta)}{p(y)}$$

априорное распределение $\to$ апостериорное распределение

Красиво и эффективно БП применяется,
если апостериорное распределение из того же семейства, что и априорное
(и удаётся найти формулу для пересчёта параметров)

Особенности байесовского подхода

Может применяться в онлайн-режиме (данные поступают батчами)



верили в честность монетки → 10 орлов подряд → изменили веру

$$p(\theta) = \mathrm{Beta}(50,50) \to p(y\,|\,\theta) = \theta^{10} \to p(\theta\,|\,y) = \mathrm{Beta}(60,50)$$

$$p(\theta_{\mathrm{new}}) = p(\theta\,|\,y)$$

Апостериорное распределение становится априорным для нового батча

Особенности байесовского подхода

Теперь ясно почему связались с бета-распределением:

$$p(y\,|\,\theta)\,p(\theta)=\theta^{k}(1-\theta)^{n-k}\cdot C\cdot\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}=$$
$$=C\cdot\theta^{k+\alpha-1}(1-\theta)^{n-k+\beta-1}$$

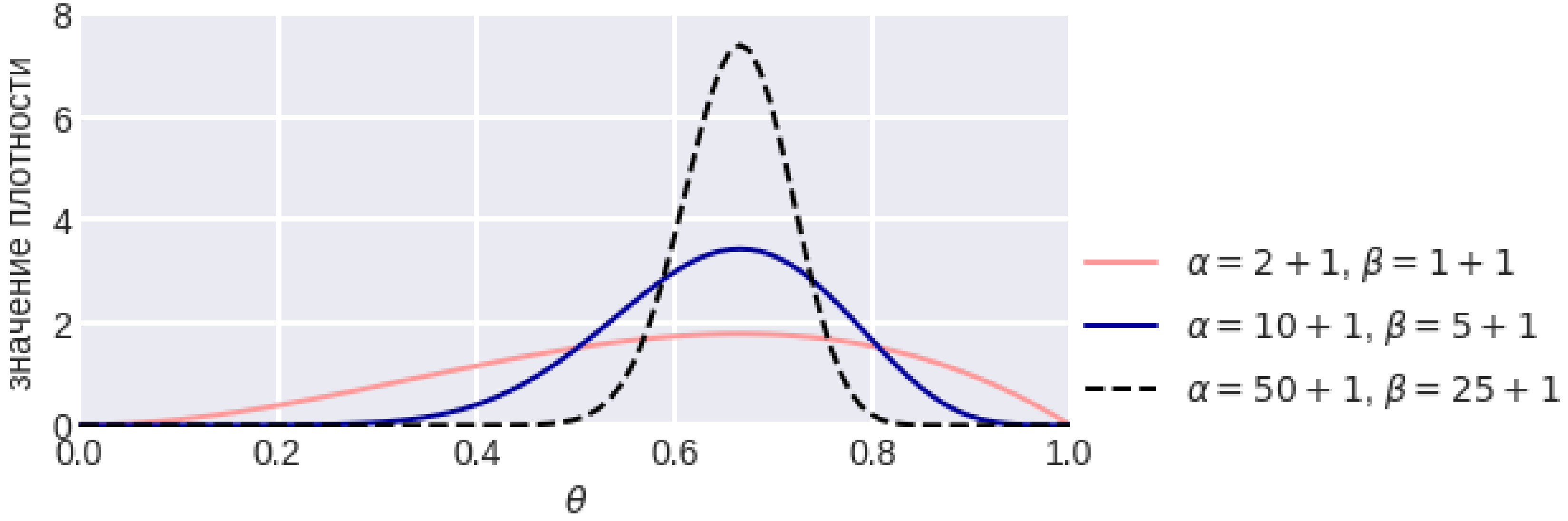
Если это распределение умножить на правдоподобие и нормировать, то получим опять это распределение (с другими параметрами)

Такие распределения сопряжённые

Бета-распределение сопряжённое к распределению Бернулли
И интеграл от их произведения (условие нормировки) берётся аналитически

Особенности байесовского подхода

С помощью бета-распределения удобно формализовать «веру в определённую вероятность»



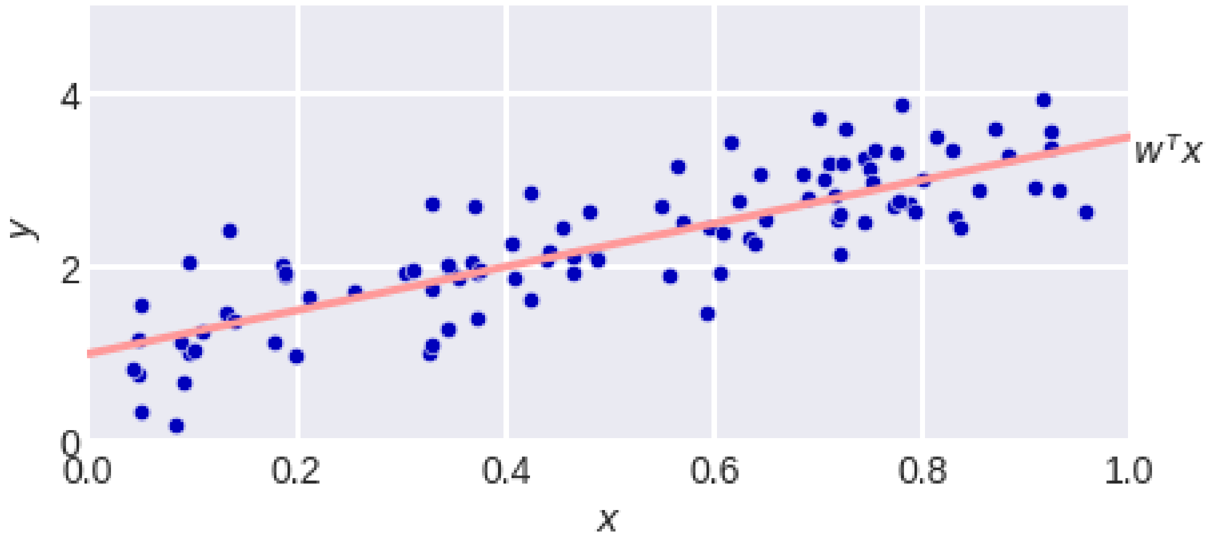
MLE для линейной регрессии (напоминание)

Пусть

$$y = w^{\mathrm{т}} x + \varepsilon$$

$$\varepsilon \sim \mathrm{norm}(0, \sigma^2)$$

таким образом $y \sim \mathrm{norm}(w^{\mathrm{т}} x, \sigma^2)$



MLE для линейной регрессии (напоминание)

$$p(y\,|\,x,w)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left[-\frac{(y-w^{\mathrm{T}}x)^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$\log L(w)=\log\prod_{i=1}^{m}p(y_i\,|\,x_i,w)=\sum_{i=1}^{m}\left[-\frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2)-\frac{(y_i-w^{\mathrm{T}}x_i)^2}{2\sigma^2}\right]$$

Максимизация правдоподобия (MLE):

$$\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}(y_i-w^{\mathrm{T}}x_i)^2\to\min,$$

т.е. это МНК!

Байесовская теория для линейной регрессии

А теперь введём априорное распределение на веса

$$p(w) = \mathrm{norm}(w \mid 0, \lambda^{-1} I) = \frac{\lambda^{n/2}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left[-\frac{\lambda}{2} w^{\mathrm{T}} w\right]$$

Как всегда логика: «меньше – лучше»

$$\log p(w \mid D) = \log p(w) + \log p(D \mid w) - \log p(D)$$

MAP

$$\log p(w \mid D) \sim \log p(w) + \log p(D \mid w) =$$

$$= \log\left[\frac{\lambda^{n/2}}{(2\pi)^{n/2}}\right] - \frac{\lambda}{2} w^{\mathrm{T}} w + \sum_{i=1}^{m}\left[-\frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{(y_i - w^{\mathrm{T}} x_i)^2}{2\sigma^2}\right]$$

Байесовская теория для линейной регрессии

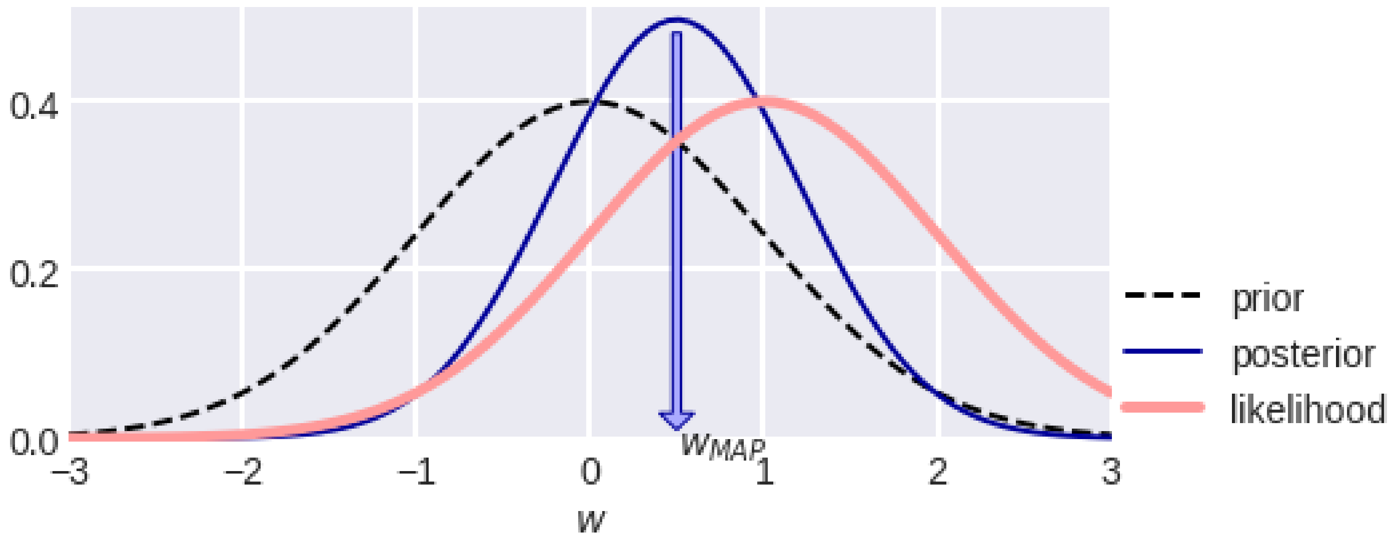
MAP

$$\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}(y_i - w^{\mathrm{T}}x_i)^2 + \frac{\lambda}{2}w^{\mathrm{T}}w \to \min$$

т.е. это гребневая регрессия!

мы наконец-то (ещё раз!) теоретически обосновали Ridge()!

И тут ясен смысл регуляризационного множителя $\lambda\sigma^2$



Байесовская теория для линейной регрессии

- **MLE – нерегуляризованное решение**
- **MAP – регуляризованное решение**

регуляризация ~ априорное распределение параметров

Априорное нормальное распределение сводится к гребневой регрессии (l2-регуляризации)

Если использовать априорное распределение Лапласа, то получим L1-регуляризацию

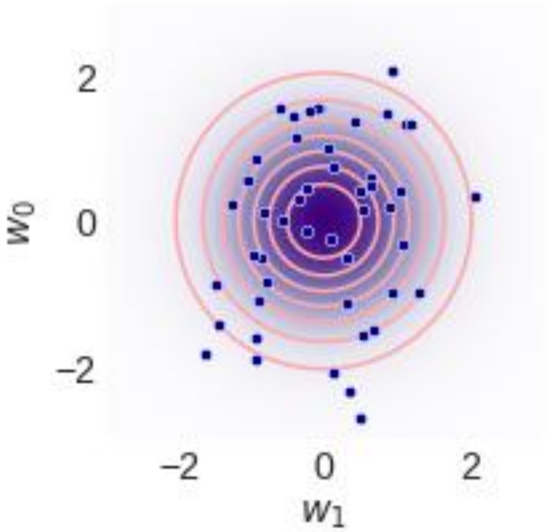
Аналогично с логистической регрессией!

Байесовская теория для линейной регрессии

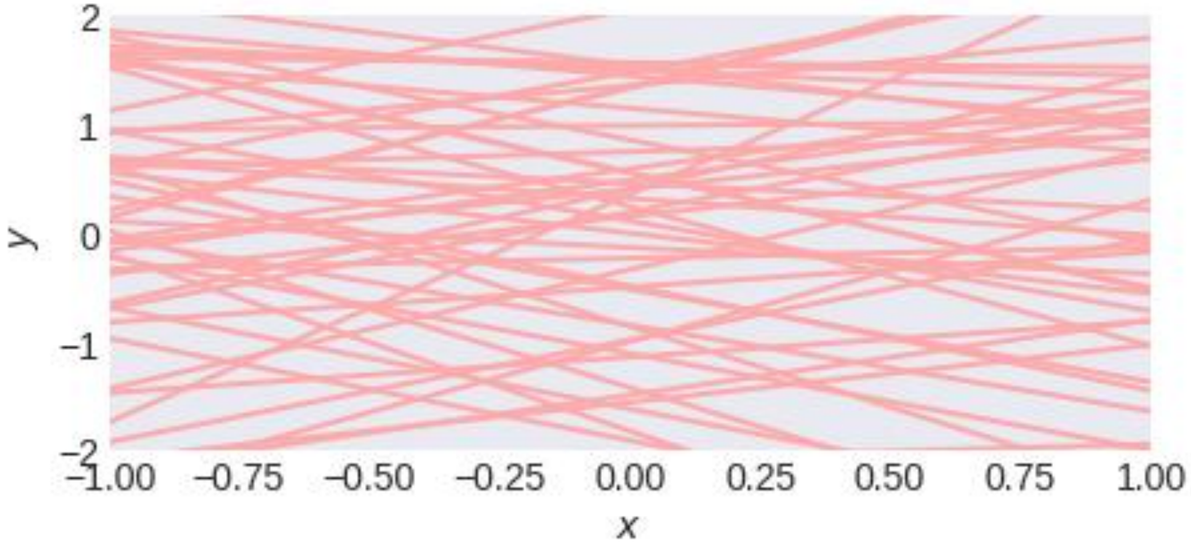
априорное распределение

$$p(w) = \mathrm{norm}(w \mid 0, \Sigma_0) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \mid \Sigma_0 \mid^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} \Sigma_0^{-1} w \right]$$

распределение на значениях коэффициентов



пространство данных и сэмплированные модели



Байесовская теория для линейной регрессии

MAP

$$\log p(w\,|\,D) \sim \log p(w) + \log p(D\,|\,w) =$$

$$= \mathrm{const} - \frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} \Sigma_0^{-1} w - \frac{1}{2\sigma^2} \| Xw - y \|^2 =$$

$$= \mathrm{const} - \frac{1}{2\sigma^2} (w^{\mathrm{T}} X^{\mathrm{T}} Xw - 2y^{\mathrm{T}} Xw + y^{\mathrm{T}} y) - \frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} \Sigma_0^{-1} w =$$

$$= -\frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} \left(\frac{1}{\sigma^2} X^{\mathrm{T}} X + \Sigma_0^{-1} \right) w + \frac{2}{2\sigma^2} y^{\mathrm{T}} Xw + \mathrm{const} = -\frac{1}{2} (w - \mu)^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1} (w - \mu) + \mathrm{const}$$

если выделить полный квадрат… можно раскрыть последнюю строчку и приравнять

постериорное распределение

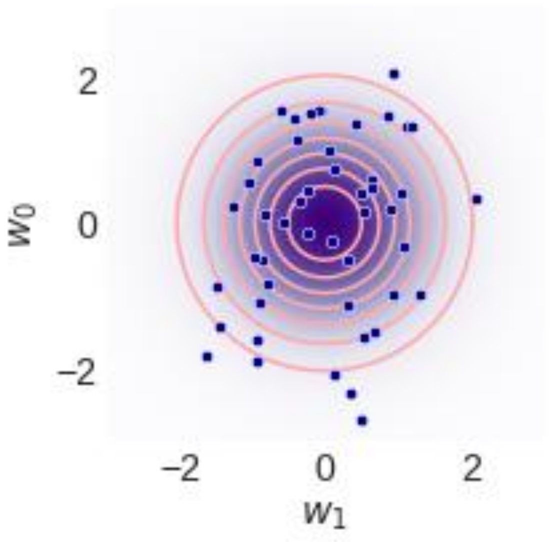
$$P(w\,|\,D) = \mathrm{norm}(\sigma^{-2} (\sigma^{-2} X^{\mathrm{T}} X + \Sigma_0^{-1})^{-1} X^{\mathrm{T}} y, \quad (\sigma^{-2} X^{\mathrm{T}} X + \Sigma_0^{-1})^{-1})$$

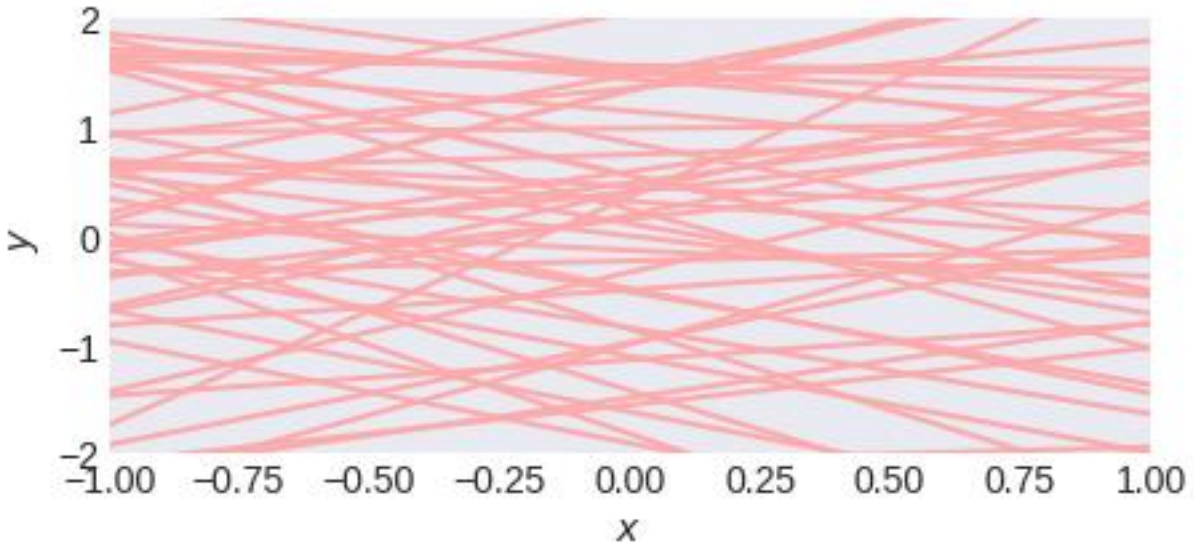
posterior mean, posterior variance

Байесовская теория для линейной регрессии

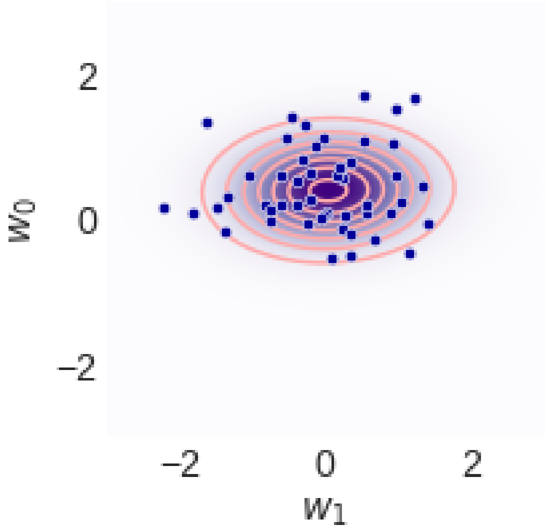
$$m = 0$$

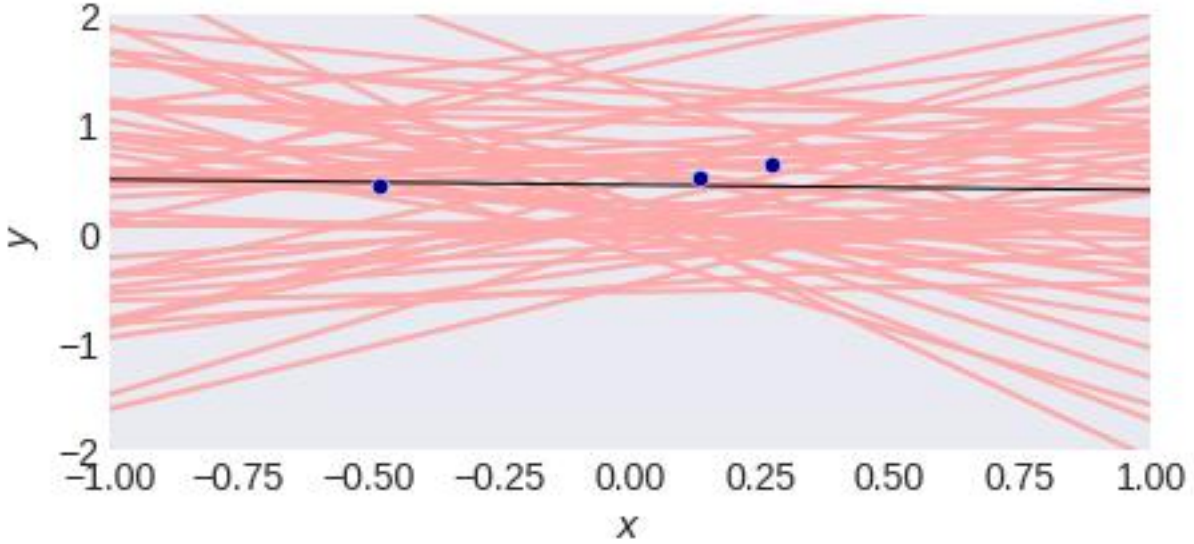
только априорное нормальное распределение значений коэффициентов





$$m = 3$$

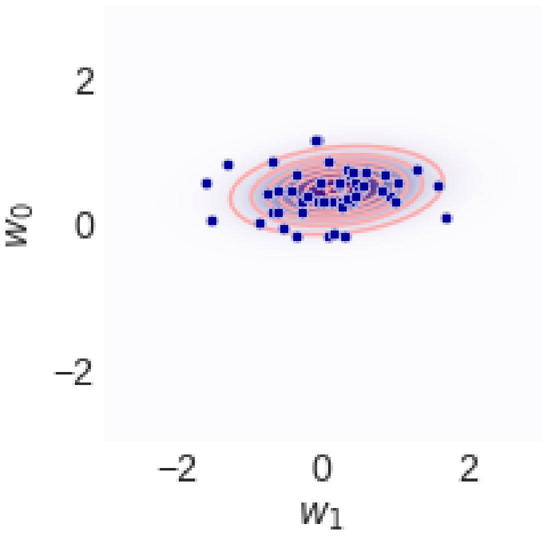


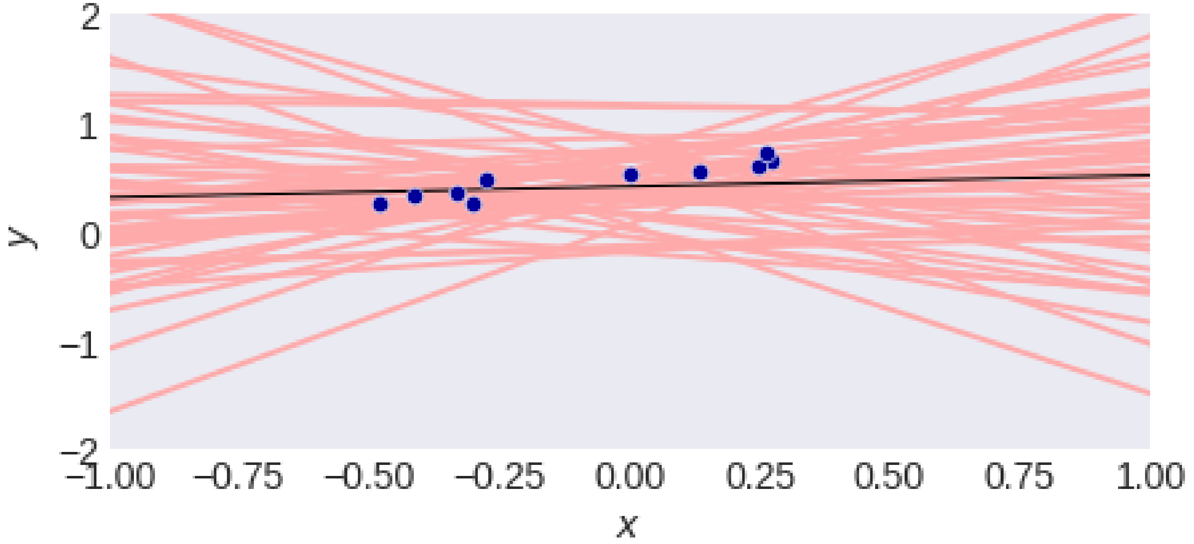


тут, правда, ограничения на оба коэффициента (и своб. член), что непрактично

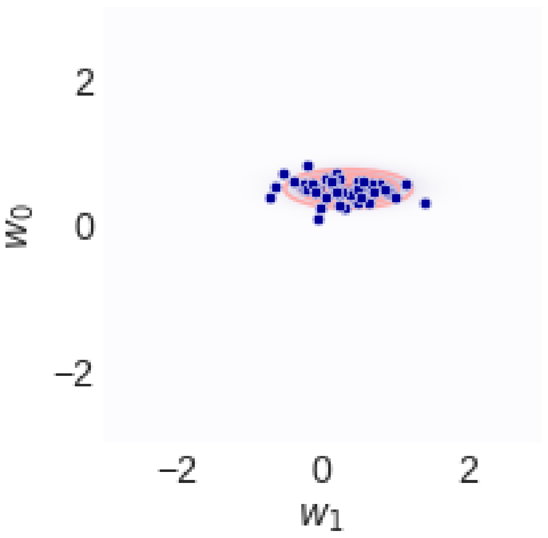
Байесовская теория для линейной регрессии

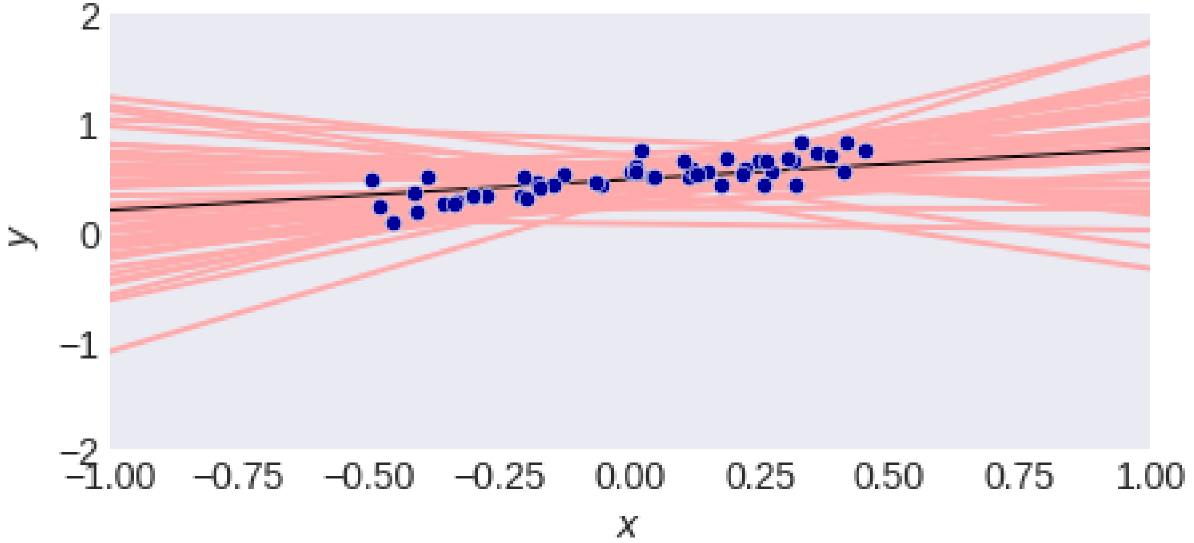
$m = 10$





$m = 50$





Логистическая регрессия + байесовский подход

Здесь всё аналогично…

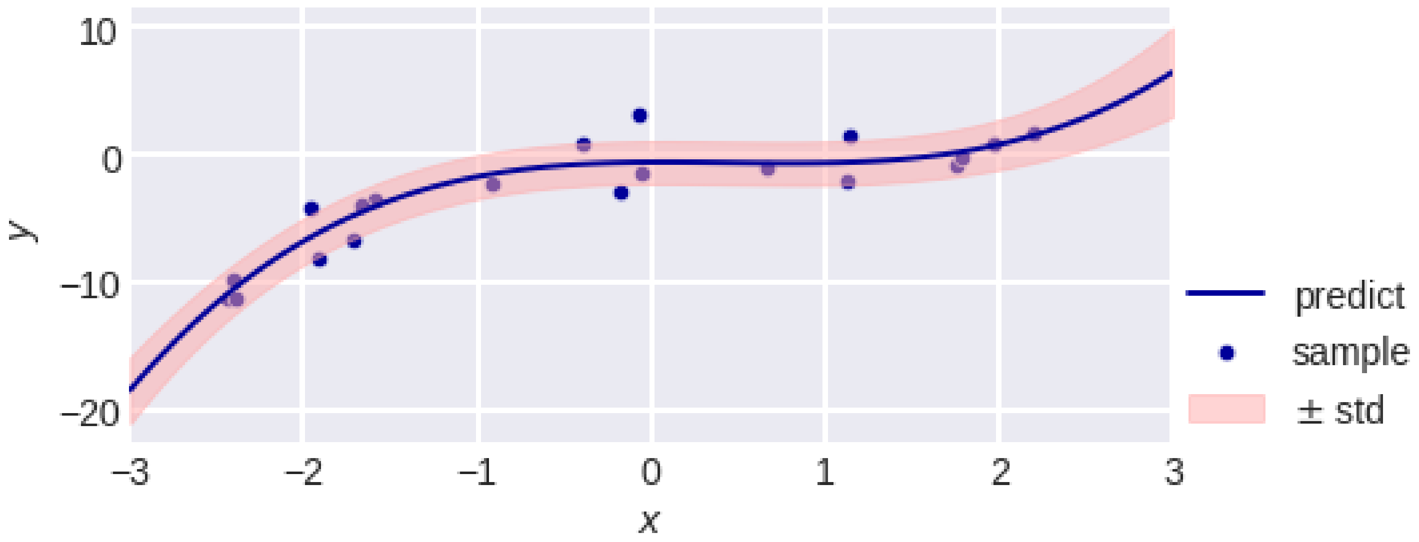
$$p(w) = \mathrm{norm}(w \mid 0, \lambda^{-1} I) = \frac{\lambda^{n/2}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left[-\frac{\lambda}{2} w^{\mathrm{T}} w\right]$$

$$\log p(w \mid D) \sim \log p(w) + \log p(D \mid w) \sim$$

$$\sum_i (-y_i \log a_i - (1 - y_i) \log(1 - a_i)) + \lambda^2 w^{\mathrm{T}} w \to \min$$

тоже возникло регуляризационное слагаемое…

Минутка кода




```
from sklearn.linear_model import BayesianRidge
# обучение
model = BayesianRidge()
x = np.vander(x, 4)
model.fit(x,y)
# формируем ответ
grid = np.linspace(-3, 3, 100)
x2 = np.vander(grid, 4)
means, stds = model.predict(x2, return_std=True)
```

Байесовские точечные оценки

оценки параметра по апостериорному распределению

Среднее значение распределения

$$\hat{\theta} = \int \theta p(\theta \mid y) \partial \theta$$

очень трудоёмко!

Наилучшая оценка с смысле минимизации апостериорного байесовского риска:

$$\int (\theta - \hat{\theta})^2 p(\theta \mid y) \partial \theta \to \min$$

Модальное значение

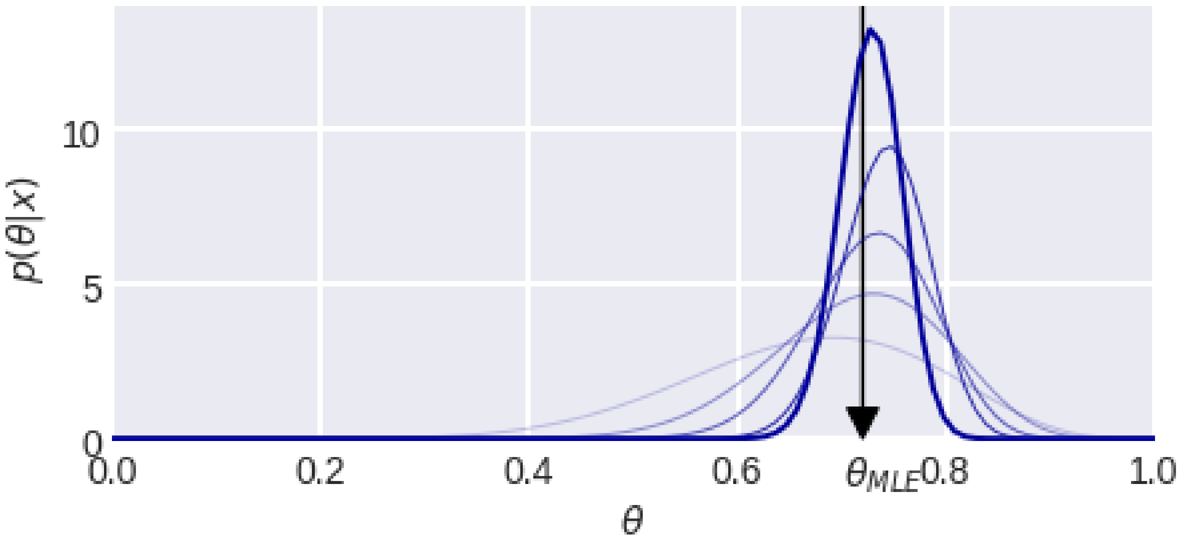
$$\hat{\theta}_{\text{MAP}} = \arg\max p(\theta \mid y)$$

получается коррекция MLE (ММП):

$$\arg\max(\log p(y \mid \theta) + \log p(\theta))$$

Байесовские точечные оценки

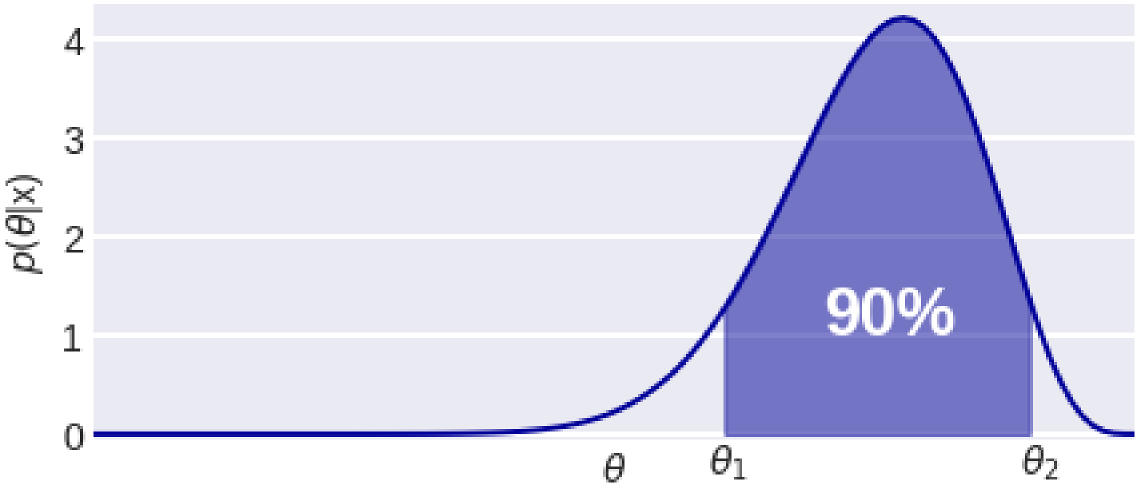
$$\lim_{m/n\to\infty} p(\theta \mid y_1,\ldots,y_m) \to \sigma(\theta-\theta_{\mathrm{MLE}})$$



Медианное значение – используется реже…

Байесовские интервальные оценки

Из вычисленного распределения $p(\theta \mid y)$



Ищем пороги p_1, p_2**:**

$$\int_{p_1}^{p_2} p(\theta \mid y) \partial\theta = p$$

Проблемы с вычислениями

$$p(\theta \mid D) = \frac{p(D \mid \theta) \cdot p(\theta)}{\int\limits_{\theta} p(D \mid \theta) p(\theta) \partial\theta}$$

Как вычислить интеграл в знаменателе?!

Интегрирование в многомерном пространстве…

Нам повезло (сопряжённые распределения) и ответ получался даже аналитически

Hint: в качестве априорного брать распределение сопряжённое к правдоподобию
(и так формализовать начальные знания)

Для распределений из экспоненциального семейства существуют сопряжённые

Как считать нормировочную константу

$$p(w\,|\,y)=\frac{p(y\,|\,w)\cdot p(w)}{p(y)}=\frac{p(y\,|\,w)\cdot p(w)}{\int p(y\,|\,w)\,p(w)\partial w}$$

для этого используется т.н. Variational Bayesian Inference:

$$\log p(y)=\int q(z)\log p(y)\partial z=\int q(z)\log\frac{p(y,z)}{p(z\,|\,y)}\partial z=$$

$$=\int q(z)\log\frac{p(y,z)q(z)}{q(z)\,p(z\,|\,y)}\partial z=$$

$$=\underbrace{\int q(z)\log\frac{p(y,z)}{q(z)}\partial z}_{f(q)\to\max}+\underbrace{\int q(z)\log\frac{q(z)}{p(z\,|\,y)}\partial z}_{D_{\mathrm{KL}}(p(z|y)\,\|\,q(z))\geq 0}$$

левая часть не зависит от q, поэтому, когда f максимально DL=0

приближённое вычисление $p(y)$ **свели к максимизации интеграла**

Байесовский подход к машинному обучению

обучающая выборка: (X,Y)

обучение:

$$p(w\,|\,X,Y)=\frac{p(Y\,|\,X,w)\,p(w)}{\int p(Y\,|\,X,w)\,p(w)\partial w}$$

Получаем распределение в пространстве параметров модели, т.е. «вероятностный ансамбль»!

На контрольной выборке x'**:**

$$p(y'\,|\,x',X,Y)=\int p(y'\,|\,x',w)\,p(w\,|\,X,Y)\partial w$$

Предсказание с использованием полного распределения!

В этом и есть защита от переобучения…

ясно как дообучить модель в рамках байесовского подхода…

Но как делать интегрирования на этом слайде?

Байесовский подход к машинному обучению

Если

$$w_{\mathrm{MAP}} = \arg\max p(w \mid X, Y) = \arg\max p(Y \mid X, w)\, p(w)$$

теперь функцию внутри интеграла заменить на дельта-функцию:

$$p(y' \mid x', X, Y) = \int p(y' \mid x', w)\, p(w \mid X, Y)\, \partial w \approx p(y' \mid x', w_{\mathrm{MAP}})$$

Мы уже видели:

БП $\Rightarrow$ регуляризация

в БП можно обучать батчами

Теперь понимаем:

автоматическое ансамблирование

есть возможность автоматического получения наиболее простой модели

Иерархические модели

Пусть w зависит от другого параметра (мета-параметра) α, тогда по формуле Байеса

$$p(\alpha \mid X, Y) = \frac{p(Y \mid X, \alpha) p(\alpha)}{p(Y \mid X)}$$

Правдоподобие α

$$p(Y \mid X, \alpha) = \int p(Y \mid X, w) p(w \mid \alpha) \partial w$$

называется обоснованностью (просто исключаем переменную)

– дальше принцип максимальной обоснованности

параметры α выбираются так, чтобы создать ограничения на параметр w

Не пытаемся оптимизировать сразу по всем параметрам

Иерархические модели

Параметр α может зависеть от другого параметра (мета-мета-параметра)…

считается, что при настройке таких параметров меньше риска переобучения

Принцип максимальной обоснованности

$$\alpha_{\mathrm{ME}} = \arg\max p(Y \mid X, \alpha)$$

далее находим апостериорное распределение

$$p(w \mid \alpha_{\mathrm{ME}}, X, Y)$$

Так производится классификация / регрессия

$$p(y' \mid x', X, Y, \alpha_{\mathrm{ME}}) = \int p(y' \mid x', w)\, p(w \mid \alpha_{\mathrm{ME}}, X, Y)\, \partial w$$

в некоторых случаях (ex: RVM) этот интеграл легко вычислить

RVM (метод релевантных векторов) для регрессии

напомним, что для линейной регрессии $y = w^{\mathrm{T}}x + \varepsilon$, $\varepsilon \sim \mathrm{norm}(0, \sigma^2)$

$$p(w) = \mathrm{norm}(w \mid 0, \lambda^{-1}I) \quad \to \quad \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}(y_i - w^{\mathrm{T}}x_i)^2 + \frac{\lambda}{2}w^{\mathrm{T}}w \to \min$$

пусть теперь

априорное распределение на параметры

$$p(w \mid \alpha) = \mathrm{norm}(w \mid 0, \mathrm{diag}(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)^{-1})$$

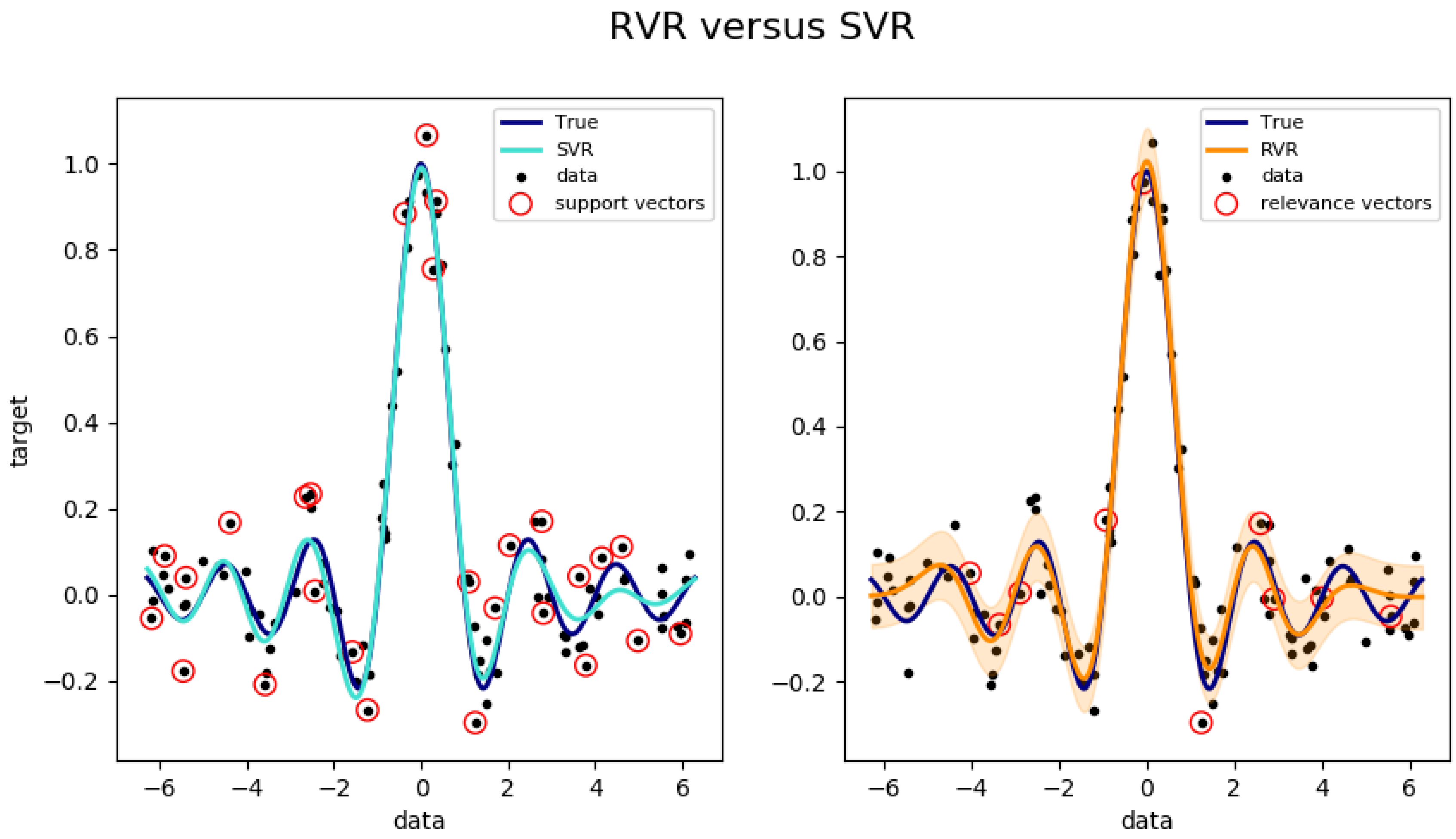
для каждого параметра независимая регуляризация

по максимальной обоснованности (evidence approximation или type-2 max likelihood)

$$p(Y \mid X, \alpha, \sigma^2) = \int p(Y \mid X, w, \sigma^2)\, p(w \mid \alpha)\, \partial w \to \max_{\alpha, \sigma^2}$$

вывод не рассматриваем: тут свёртка двух гауссиан

RVM (метод релевантных векторов) для регрессии



параметры α, σ^2 подбираются автоматически

разреженное решение – «отбор релевантных векторов»

кроме прогноза выдаёт дисперсию прогноза

https://sklearn-rvm.readthedocs.io/en/latest/auto_examples/plot_compare_rvr_svr.html

RVM (метод релевантных векторов) для классификации

напомним, что для логистической регрессии

$$p(w)=\mathrm{norm}(w\,|\,0,\lambda^{-1}I)\quad\to\quad \mathrm{logloss}+\lambda w^{\mathrm{T}}w\to\min$$

пусть теперь
априорное распределение на параметры

$$p(w\,|\,\alpha)=\mathrm{norm}(w\,|\,0,\mathrm{diag}(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)^{-1})$$

для каждого параметра независимая регуляризация

и опять принцип максимальной обоснованности
тут ещё приём – приближение Лапласа (Laplace Approximation), чтобы взять интеграл

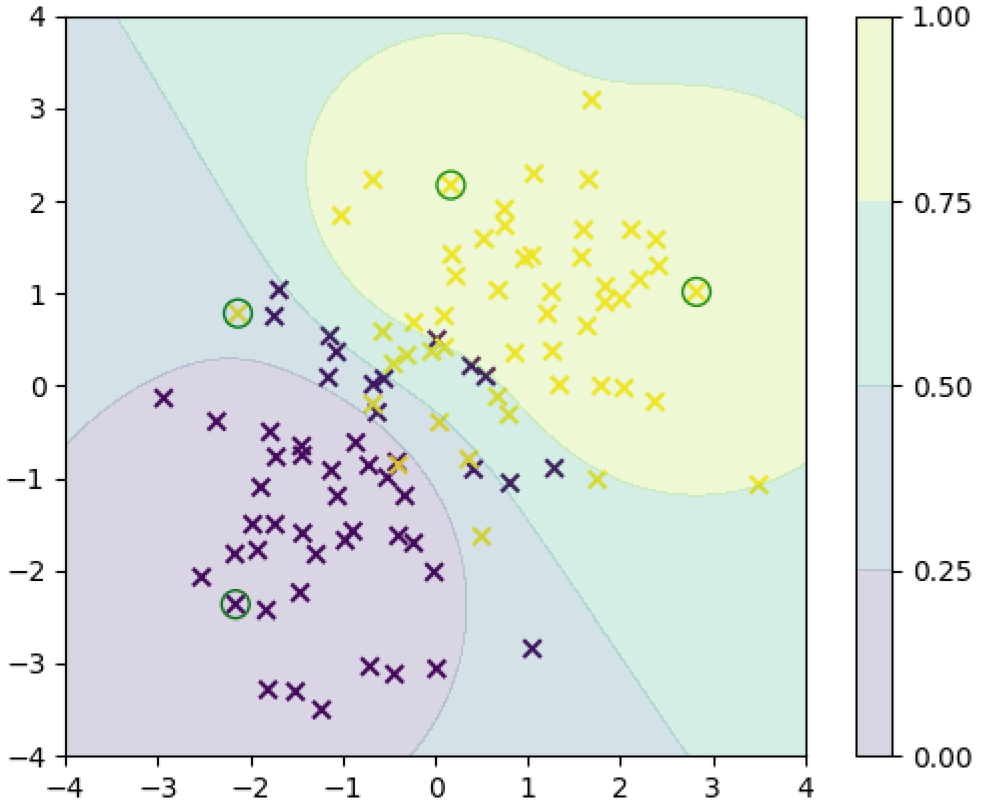
SVM

$$\sum_i \max[1-y_iw^{\mathrm{T}}x,0]+\alpha w^{\mathrm{T}}w\to\min$$

RVM

$$\sum_i \log(1+\exp(-y_iw^{\mathrm{T}}x))+w^{\mathrm{T}}\,\mathrm{diag}(\alpha)w\to\min$$

RVM (метод релевантных векторов) для классификации



опять автоматический подбор параметров

разреженное решение

обучение медленнее SVM

не рассматриваем вывод

https://sklearn-rvm.readthedocs.io/en/latest/auto_examples/plot_rvm_for_classification.html

Что такое случайность

Частотный подход (frequentism)	Байесовский подход (Bayesianism)
– объективная неопределённость	– мера нашего незнания
=> делаем серию экспериментов (в пределе истина)	переход от априорной информации (формализует незнание) к апостериорной (учитывая эксперимент)
параметры делятся на детерминированные и случайные	ВСЕ параметры – случайные (они же неизвестны!)
Частота связана с вероятностью! Если событие не повторяется, то говорить о вероятности бессмысленно	Можно говорить о любых событиях, например, о вероятности поражения в финале ЧМ.
Типичный метод – MLE (доказана оптимаьность) обычно несмещённая оценка, но большой разброс	Формула Байеса + другие ф-лы MAP – обычно смещённая, но малый разброс
хорошо при $m \to \infty$	Что-то разумное при малых m при m=0 априорное распределение = апостериорному

Bayesian learning

- обучает целое распределение параметров
- более робастное решение за счёт постериорного усреднения (posterior averaging)
- позволяет оценить достоверность/уверенность (confidence) предсказания модели
- позволяет обучать гиперпараметры по данным
- позволяет обучаться с пропущенными значениями
- связь с логическим выводом (Modus Ponens)

$$\frac{A,\ A\to B}{A\,\&\,B} \qquad \frac{p(A),\ p(B\,|\,A)}{p(A\,\&\,B)}$$

Камни в огород Байесианцев

Можно поверить в распределения объектов
(в конце концов, мы хотим узнать, как пространство объектов устроено),
но параметры модели…

Большинство примеров «искусственные» – для хороших распределений

Утверждается, что байесовский подход работает даже при отсутствии выборки (экспериментов). Тогда априорное распределение = апостериорному…
но откуда взять априорное?!
Удобно вносить свои знания с помощью распределения,
но можем внести и заблуждения…

Методы вычислительно ресурсоёмкие

Оптимизационный подход к МО

- **выбрать модель** (предполагаем, что достаточно хорошо описывает данные)
- **выбрать метрику качества** (которая формалирует «хорошесть» решения)
- **оптимизировать метрику варьируя параметры модели**

Вероятностный подход к МО

- **выбрать вероятностную модель данных** (предполагаем, что достаточно хорошо описывает данные)
- **в вероятностных терминах сформулировать «хорошесть» решения** (MLE или MAP)
- **оптимизировать вероятностный критерий** (MLE или MAP)

Источники

Bishop C. M. Pattern recognition and machine learning. – Springer, 2006

Буре В.М., Грауэр Л.В. Лекция «Байесовский подход» // ШАД СПб, 2013
https://compscicenter.ru/media/slides/math_stat_2013_spring/2013_05_22_math_stat_2013_spring.pdf

Материалы DeepBayes-2017 // http://deepbayes.ru/2017/

Учебное пособие по Байесовскому подходу
http://www.machinelearning.ru/wiki/images/4/43/BayesML-2007-textbook-2.pdf

Байесовский подход
https://dyakonov.org/2018/07/30/байесовский-подход/

Сайт Типпинга
http://www.miketipping.com/sparsebayes.htm