Байесовский выбор моделей: Байесовская логистическая регрессия. EM-алгоритм.

Александр Адуенко

24е октября 2023

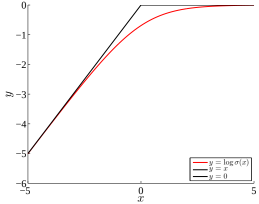
Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса: $\mathsf{P}(A|B) = \dfrac{\mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A)}{\mathsf{P}(B)}$;
- Формула полной вероятности: $\mathsf{P}(B) = \mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A) + \mathsf{P}(B|\overline{A})\mathsf{P}(\overline{A})$;
- 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
  $p(M_i|\mathbf{X}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}}) \propto p(M_i)p_i(\mathbf{y}_{\text{train}}|\mathbf{X}_{\text{train}})$.
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Байесовская логистическая регрессия (БЛР): введение и отбор признаков.

Байесовская логистическая регрессия

Пусть $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ – признаковая матрица, а $\mathbf{y} \in \{\pm 1\}^m$ – метки класса.

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A}), \text{ где } p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) = \prod_{j=1}^{m} \sigma(y_j \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j).$$

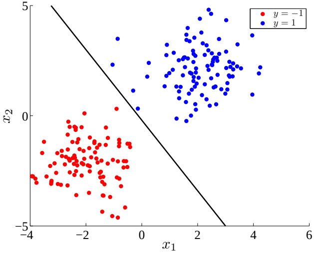


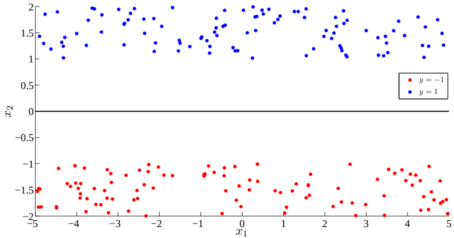
$$p(y_j|\mathbf{w}, \mathbf{x}_j) = \sigma(y_j \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j) = \frac{1}{1+\exp(-y_j \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j)}.$$

Вопрос 1: как выбрать $p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$?

Вопрос 2: Пусть $p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})$, $\mathbf{A} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{\alpha})$. Что происходит, когда $\alpha_i \to \infty$?

Примеры неоднозначности выбора разделительной прямой.





Вопрос 3: чему равна $\mathbf{w}_{\mathsf{ML}}$ для выборок на рис. выше?

Обоснованность для логистической регрессии

Пусть $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ – признаковая матрица, а $\mathbf{y} \in \{\pm 1\}^m$ – метки класса.

$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$, где $p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) = \prod_{j=1}^{m} \sigma(y_j \mathbf{w}^\mathsf{T} \mathbf{x}_j)$.

Идея: выбрать модель с максимальной обоснованностью.

Вопрос 1: чем отличаются разные модели байесовской логистической регрессии, описанные выше?

Вычисление обоснованности.

Пусть далее $p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})$, $\mathbf{A} = \operatorname{diag}(\boldsymbol{\alpha})$.

Тогда $\mathbf{A}^* = \arg\max_{\mathbf{A}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = \arg\max_{\mathbf{A}} \int \underbrace{p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})}_{Q(\mathbf{w})} d\mathbf{w}$.

Проблема: интеграл аналитически не вычисляется.

Аппроксимация Лапласа

$$\log Q(\mathbf{w}) \approx \log Q(\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}}) + \frac{1}{2}(\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\mathsf{MAP}})^\mathsf{T} \overbrace{\nabla\nabla \log Q(\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}})}^{-\mathbf{H}^{-1}} (\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\mathsf{MAP}}).$$

$$\mathbf{A}^* = \arg\max_{\mathbf{A}} \left(Q(\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}}) \int e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}})^\mathsf{T} \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{w}-\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}})} d\mathbf{w} \right).$$

Вопрос 2: Как определяется $\mathbf{w}_{\mathsf{MAP}}$?

Определение. $g(x,\, \xi)$ вариационная нижняя оценка для $f(x) \Longleftrightarrow$

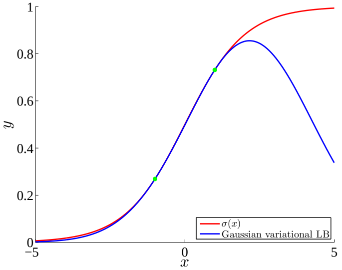
1. $f(x) \geq g(x,\, \xi)\; \forall\, x,\, \xi$
2. $f(\xi) = g(\xi,\, \xi)$.

Вместо $f(x) \to \max\limits_x$ рассмотрим $g(x,\, \xi) \to \max\limits_{x,\,\xi}$

1. $\xi^n = \arg\max\limits_{\xi} g(x^{n-1},\, \xi)$
2. $x^n = \arg\max\limits_{x} g(x,\, \xi^n)$

VLB для сигмоидной функции

$$\sigma(x) \geq \sigma(\xi) \exp\left(-\frac{1}{4\xi}(2\sigma(\xi) - 1)(x^2 - \xi^2) + \frac{x - \xi}{2}\right).$$



Вопрос: в чем преимущество использования VLB при максимизации обоснованности в логистической регрессии?

LB для обоснованности в логистической регрессии

$$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}) = \prod_{j=1}^{m} \sigma(y_j \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j) \frac{\sqrt{\det \mathbf{A}}}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}} \geq \mathrm{VLB}(\mathbf{w},\ \boldsymbol{\xi},\ \mathbf{A}) =$$

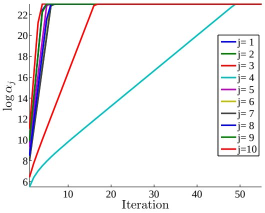
$$\frac{\sqrt{\det \mathbf{A}}}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}} \prod_{j=1}^{m} \sigma(\xi_j) \exp\left(-\frac{2\sigma(\xi_j)-1}{4\xi_j}(\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_j\mathbf{x}_j^{\mathsf{T}}\mathbf{w} - \xi_j^2) + \frac{y_j\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_j - \xi_j}{2}\right) =$$

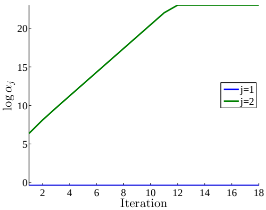
$$\frac{\sqrt{\det \mathbf{A}}}{(2\pi)^{n/2}} \prod_{j=1}^{m} \sigma(\xi_j) e^{\frac{2\sigma(\xi_j)-1}{4\xi_j}\xi_j^2 - \frac{\xi_j}{2}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}'\mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{v}},$$ где

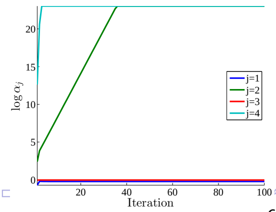
$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \sum_{j=1}^{m} \frac{2\sigma(\xi_j)-1}{2\xi_j}\mathbf{x}_j\mathbf{x}_j^{\mathsf{T}},\quad \mathbf{v} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m} y_j\mathbf{x}_j.$$

Тогда $p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}) \geq \mathrm{LB}(\mathbf{A},\ \boldsymbol{\xi}) = \int \mathrm{VLB}(\mathbf{w},\ \boldsymbol{\xi},\ \mathbf{A})d\mathbf{w} \to \max\limits_{\mathbf{A},\ \boldsymbol{\xi}}.$

Иллюстрация отбора признаков в логистической регрессии







$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$, где $p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) = \prod\limits_{j=1}^{m} \sigma(y_j \mathbf{w}^\mathsf{T} \mathbf{x}_j)$.

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \mathbf{A}) = \frac{p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A})}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{A})} = \frac{\prod_{j=1}^{m} \sigma(y_j \mathbf{w}^\mathsf{T} \mathbf{x}_j)\mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0},\ \mathbf{A}^{-1})}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{A})}.$$

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

Вопрос 1: Как определить $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$? Единственное ли решение?

$q(\mathbf{w}) = -\log p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}) = -\log p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) - \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) =$
$q(\mathbf{w}_{\text{MAP}}) + \frac{1}{2}(\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}})^\mathsf{T}\mathbf{H}(\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}}) + O(\|\mathbf{w} - \mathbf{w}_{\text{MAP}}\|^3)$, где
$\mathbf{H} = \mathbf{A} + \mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{R}\mathbf{X}$, где $\mathbf{R} = \operatorname{diag}(\sigma(\mathbf{w}_{\text{MAP}}^\mathsf{T}\mathbf{x}_j)\sigma(-\mathbf{w}_{\text{MAP}}^\mathsf{T}\mathbf{x}_j))$.

Нормальная аппроксимация: $p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \mathbf{A}) \approx \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{w}_{\text{MAP}},\ \mathbf{H}^{-1})$.

Пример. Пусть $n = 1$, $\mathbf{w}_{\text{MAP}} = 1$.
Вопрос 2: Что можно сказать про принадлежность объектов с $x = 0;\ 1;\ -1;\ 5;\ -5$ к классу 1?
Вопрос 3: Как результат зависит от неопределенности h^{-1}? Что происходит при $h \to 0$ и при $h \to \infty$?

Нелинейная разделяющая поверхность

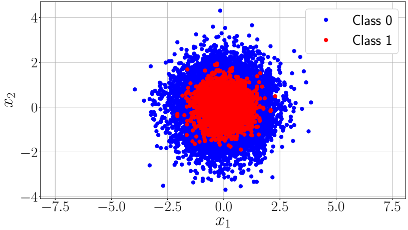
$$p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{X}_{\text{test}},\ \mathbf{X}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{w},\ \mathbf{X}_{\text{test}})p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}})d\mathbf{w}.$$

Прогноз вероятности класса 1 в зависимости от неопределенности h^{-1}

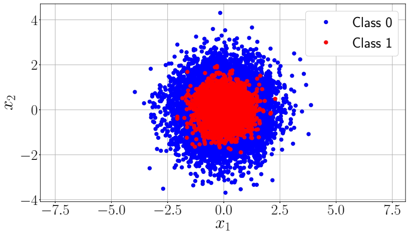
	$x=-5$	$x=-1$	$x=0$	$x=1$	$x=5$
$h=\infty$	0.0067	0.269	0.5	0.731	0.9933
$h=1$	0.169	0.301	0.5	0.699	0.831
$h=0$	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5

Вопрос 1: как учесть в модели, что классы не сбалансированы?

Вопрос 2: $p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}})$ не сопрягается с $p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{w},\ \mathbf{X}_{\text{test}})$. Что делать?



Вопрос 3: что делать, если разделяющая поверхность нелинейна?



Вопрос 1: что делать, если разделяющая поверхность нелинейна?

Идея:

$\mathbf{x} \mapsto \varphi(\mathbf{x}) = [K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), i = 1, \ldots, m]$.

Вопрос 2: Чему соответствует отбор признаков при замене $\mathbf{x} \mapsto \varphi(\mathbf{x}) = [K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i), i = 1, \ldots, m]$?

Вопрос 3: Что если значения части признаков не заданы или некорректны? Что происходит при замене на среднее / медиану?

Исходная модель: $p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$.

Пусть $\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{X}} + \mathbf{Z}$, $\tilde{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{Z} = \mathbf{0}$, где $\mathbf{Z}$ – матрица значений пропусков.

Новая модель: $p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{Z}|\tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) = p(\mathbf{y}|\tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{Z}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})p(\mathbf{Z}|\tilde{\mathbf{X}})$.

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) \propto p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A}) = \int p(\mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{Z}|\tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{A})d\mathbf{Z} =$$

$$\int p(\mathbf{y}|\tilde{\mathbf{X}}, \mathbf{Z}, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathbf{A})\underbrace{p(\mathbf{Z}|\tilde{\mathbf{X}})}_{\text{вес}}d\mathbf{Z}.$$

Пусть $\mathbf{D} = (\mathbf{X},\ \mathbf{y})$ – наблюдаемые переменные, $\mathbf{Z}$ – скрытые переменные.
$p(\mathbf{D},\ \mathbf{Z}|\mathbf{\Theta}) = p(\mathbf{D}|\mathbf{Z},\ \mathbf{\Theta})p(\mathbf{Z}|\mathbf{\Theta})$.

Вопрос 1: как решить задачу $p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) = \int p(\mathbf{D},\ \mathbf{Z}|\mathbf{\Theta})d\mathbf{Z} \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$?

Пример 1. $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon},\ \mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0},\ \mathbf{A}^{-1}),\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \beta^{-1}\mathbf{I})$
$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w},\ \beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$.
$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \underbrace{\mathbf{A},\ \beta^{-1}}_{\mathbf{\Theta}}) \propto -\frac{1}{2}\log\det(\beta^{-1}\mathbf{I}+\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}) - \frac{1}{2}\mathbf{y}^{\mathsf{T}}(\beta^{-1}\mathbf{I}+\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}})^{-1}\mathbf{y}$.

EM-алгоритм

Введем $F(q,\ \mathbf{\Theta}) = -\int q(\mathbf{Z})\log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z})\log p(\mathbf{D},\ \mathbf{Z}|\mathbf{\Theta})d\mathbf{Z} =$

$$-\int q(\mathbf{Z})\log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z})\log p(\mathbf{Z}|\mathbf{D},\ \mathbf{\Theta})d\mathbf{Z} + \int \log p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta})q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} =$$

$$\log p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) - \int q(\mathbf{Z})\log\frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{Z}|\mathbf{D},\mathbf{\Theta})}d\mathbf{Z} = \log p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) - D_{\mathrm{KL}}(q\|p(\mathbf{Z}|\mathbf{D},\ \mathbf{\Theta})).$$

Идея 1: $p(\mathbf{D}|\mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$ заменим на $F(q,\ \mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{q,\ \mathbf{\Theta}}$.

Идея 2: Пошагово оптимизируем по $\mathbf{\Theta}$ и q, то есть

1. E-шаг: $q^s = F(q,\ \mathbf{\Theta}^{s-1}) \to \max\limits_{q}$;
2. M-шаг: $\mathbf{\Theta}^s = F(q^s,\ \mathbf{\Theta}) \to \max\limits_{\mathbf{\Theta}}$.

EM-алгоритм для максимизации обоснованности

$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon},\ \mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0},\ \mathbf{A}^{-1}),\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \beta^{-1}\mathbf{I})$

$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w},\ \beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) =.$

$\log p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) \propto \frac{m}{2}\log\beta - \frac{\beta}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2}\log\det\mathbf{A} - \frac{1}{2}\mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}.$

$F(q,\ \mathbf{A},\ \beta) = -\int q(\mathbf{w})\log q(\mathbf{w})d\mathbf{w} + \int q(\mathbf{w})\log p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta)d\mathbf{w} =$

$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) - D_{\mathrm{KL}}(q(\mathbf{w})\|p(\mathbf{w}|\mathbf{y},\ \mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta)) \to \max\limits_{q,\ \mathbf{A},\ \beta}.$

Е-шаг (считаем $\mathbf{A},\ \beta$ фиксированными)

$F(q,\ \mathbf{A},\ \beta) \to \max\limits_{q} \Longleftrightarrow q(\mathbf{w}) = p(\mathbf{w}|\mathbf{y},\ \mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{w}_0,\ \boldsymbol{\Sigma}_0^{-1})$, где

$\boldsymbol{\Sigma}_0 = \mathbf{A} + \beta\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X},\ \mathbf{w}_0 = \beta\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}.$

М-шаг (считаем $q(\mathbf{w})$ фиксированным)

$\mathsf{E}_{q(\mathbf{w})}\log p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta) = \int q(\mathbf{w})\log p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{A},\ \beta)d\mathbf{w} \to \max\limits_{\mathbf{A},\ \beta}.$

$\tilde{F}(\mathbf{A},\ \beta) = \frac{m}{2}\log\beta - \frac{\beta}{2}\mathsf{E}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\log\alpha_j - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathsf{E}w_j^2 \to \max\limits_{\mathbf{A},\ \beta}.$

$\frac{\partial F}{\partial\alpha_j} = \frac{1}{2\alpha_j} - \frac{1}{2}\mathsf{E}w_j^2 = 0 \Longleftrightarrow \alpha_j = \frac{1}{\mathsf{E}w_j^2}.$

Hint: $1 = \alpha_j(\mathsf{E}^2 w_j + \mathsf{D}w_j) \Longrightarrow \alpha_j^{\text{new}} = \frac{1 - \alpha_j^{\text{old}}\mathsf{D}w_j}{\mathsf{E}^2 w_j}.$

$\frac{\partial F}{\partial\beta} = \frac{m}{2\beta} - \frac{1}{2}\mathsf{E}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 = 0 \Longleftrightarrow \beta = \frac{m}{\mathsf{E}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2}.$

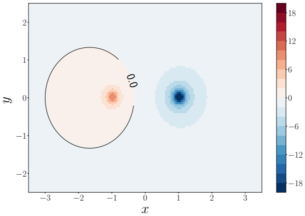
Потенциал поля точечного заряда: $\varphi = k\frac{q}{r}$.

Пусть имеется несколько зарядов $q_1, \ldots, q_l$ в точках $\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_l$.

Тогда $\varphi(\mathbf{x}) = k\sum\limits_{i=1}^{l} \frac{q_l}{\|\mathbf{x}-\mathbf{z}_l\|}$. По набору точек $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m$ и измеренным

$$y_i = \varphi(\mathbf{x}_i) - \underbrace{\varphi(\infty)}_{=0} + \varepsilon_i,\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0,\ \beta^{-1})$$

требуется оценить $\varphi(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x}$ из тестовой выборки.



$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\Phi}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon},\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \beta^{-1}\mathbf{I}), \text{ где}$$
$$\boldsymbol{\Phi} = \left\| \frac{1}{\delta + \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right\|,\ i,\ j = \overline{1,\ m};$$
$$\mathbf{w} \sim p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0},\ \mathbf{A}^{-1}).$$

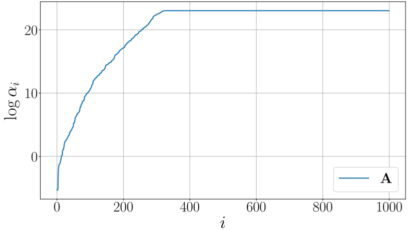
Шаг 1: $p(\mathbf{y}_{\text{train}}|\boldsymbol{\Phi}_{\text{train}},\ \mathbf{A},\ \beta) \to \max\limits_{\mathbf{A},\, \beta}$ позволит отобрать признаки.

Шаг 2: Прогноз для тестовой выборки:

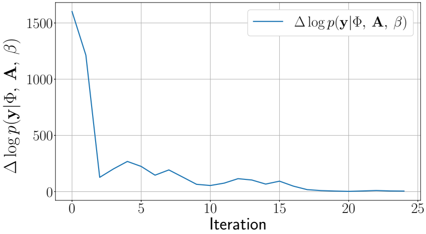
$$p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\boldsymbol{\Phi}_{\text{test}},\ \boldsymbol{\Phi}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{w},\ \boldsymbol{\Phi}_{\text{test}})p(\mathbf{w}|\boldsymbol{\Phi}_{\text{train}},\ \mathbf{y}_{\text{train}})d\mathbf{w}$$

Результаты для задачи восстановления потенциала

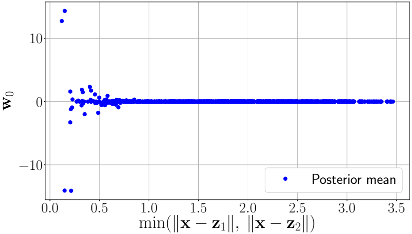
Оптимальный $\boldsymbol{\alpha}$



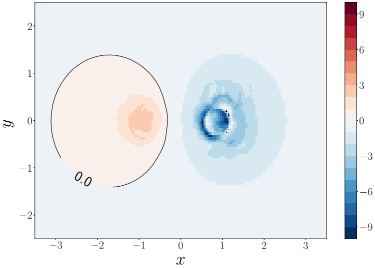
Обоснованность по итерациям



Среднее апостериорного распределения $\mathbf{w}_0$



Восстановленный потенциал



Литература

1. Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 113-120, 161-171, 498-505.
2. MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
3. Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
4. Chen, Ming-Hui, and Joseph G. Ibrahim. "Conjugate priors for generalized linear models."Statistica Sinica (2003): 461-476.
5. Fahrmeir, Ludwig, and Heinz Kaufmann. "Consistency and asymptotic normality of the maximum likelihood estimator in generalized linear models."The Annals of Statistics (1985): 342-368.
6. Baghishani, Hossein, and Mohsen Mohammadzadeh. "Asymptotic normality of posterior distributions for generalized linear mixed models."Journal of Multivariate Analysis 111 (2012): 66-77.
7. Jaakkola, Tommi, and Michael Jordan. "A variational approach to Bayesian logistic regression models and their extensions."Sixth International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics. Vol. 82. No. 4. 1997