MODELOWANIE REGRESJI PORZĄDKOWEJ PRZY UŻYCIU PROCESU GAUSSOWSKIEGO

$\{f(x_i)\}_{i=1}^n$ - realizacja procesu gaussowskiego o średniej 0 i macierzy kowariancji $\boldsymbol{\Sigma}$ zadanej wzorem:

$$\boldsymbol{\Sigma} = (K(x_i, x_j))_{i,j=1\ldots n} = \left(e^{-\frac{\kappa}{2}\sum_{\xi=1}^d (x_i^\xi - x_i^\xi)^2}\right)_{i,j=1\ldots n},$$

gdzie $\kappa > 0$, a x_i^ξ to ξ-ty element x_i.

Wtedy $\mathbf{f}$ ma rozkład łączny o gęstości:

$$\mathbb{P}(\mathbf{f}) = \frac{1}{Z_f} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{f}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{f}},$$

gdzie $Z_f = (2\Pi)^{\frac{n}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}$, a $\mathbf{f} = [f(x_1), \ldots, f(x_n)]^T$.

Wtedy:

$$\mathbb{P}(\mathcal{D}|\mathbf{f}) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(y_i|f(x_i)),$$

gdzie $\mathcal{D} = \{y_1, \ldots, y_r\}$.

Intuicyjnie:

$$\mathbb{P}_{ideal}(y_i|f(x_i)) = \mathbb{I}\{f(x_i) \in (b_{y_i-1}, b_{y_i}]\},$$

gdzie $b_0 = -\infty, b_r = +\infty$.

Można wygodniej sparametryzować b_i jako: $b_1 \in \mathbb{R}$, $b_i = \sum_{t=2}^j \Delta_t + b_1$, gdzie $\Delta_t > 0$ oraz $j = 2, \ldots, r-1$.
Bardzo rzadko mamy jednak do czynienia z idealną sytuacją, dlatego będziemy budować model zakładając dodatkowy szum δ o rozkładzie $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Wtedy prawdopodobieństwo zmienia się następująco:

$$\mathbb{P}(y_i|f(x_i)) = \Phi\left(z_1^i\right) - \Phi\left(z_2^i\right),$$

gdzie $z_1^i := \frac{b_{y_i} - f(x_i)}{\sigma}$ oraz $z_2^i := \frac{b_{y_i-1} - f(x_i)}{\sigma}$.

Dowód

$$\mathbb{P}(y_i|f(x_i)) = \int \mathbb{P}_{ideal}(y_i|f(x_i) + \delta_i)d\delta_i = \int \mathbb{P}(\delta_i)\mathbb{I}\{f(x_i) + \delta_i \in (b_{y_i-1}, b_{y_i}]\}d\delta_i =$$

$$= \int \frac{1}{2\Pi\sigma}e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}}\mathbb{I}\{u \in (b_{y_i-1} - f(x_i), b_{y_i} - f(x_i)]\}du = \int_{b_{y_i}-f(x_i)}^{b_{y_i-1}-f(x_i)} \frac{1}{2\Pi\sigma}e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}}du =$$

$$= \int_{\frac{b_{y_i}-f(x_i)}{\delta}}^{\frac{b_{y_i-1}-f(x_i)}{\delta}} \frac{1}{2\Pi}e^{-\frac{u^2}{2}}du = \Phi\left(\frac{b_{y_i} - f(x_i)}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{b_{y_i-1} - f(x_i)}{\sigma}\right)$$

$\blacksquare$

Wprowadźmy następującą funkcję straty:

$$l(y_i, f(x_i)) := -\ln \mathbb{P}(y_i|f(x_i))$$

Jej pochodne to:

$$\frac{\partial l(y_i, f(x_i))}{\partial f(x_i)} = \frac{1}{\sigma} \frac{\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)}$$

$$\frac{\partial^2 l(y_i, f(x_i))}{\partial^2 f(x_i)} = \frac{1}{\sigma^2} \left(\frac{\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)} \right)^2 + \frac{1}{\sigma^2} \frac{z_1^i \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - z_2^i \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)}$$

Dowód

$$\frac{\partial l(y_i, f(x_i))}{\partial f(x_i)} = -\ln\left[\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)\right] = -\frac{1}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)} \cdot \Phi'(z_1^i) \cdot \left(-\frac{1}{\sigma}\right) - \Phi'(z_2^i) \cdot \left(-\frac{1}{\sigma}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sigma} \frac{\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)}$$

$$\frac{\partial^2 l(y_i, f(x_i))}{\partial^2 f(x_i)} = \frac{\partial}{\partial f(x_i)} \left(\frac{\partial l(y_i, f(x_i))}{\partial f(x_i)} \right) = \frac{\partial}{\partial f(x_i)} \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sigma} \frac{1}{[\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)]^2} \left\{ [\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)] \cdot \right.$$

$$\cdot \left[\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} \left(-\frac{1}{2} \cdot 2 z_1^i\right) \left(-\frac{1}{\sigma}\right) - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}} \left(-\frac{1}{2} \cdot 2 z_2^i\right) \left(-\frac{1}{\sigma}\right) \right] -$$

$$\left. - \left(\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}} \right) \cdot \left(-\frac{1}{\sigma}\right) \cdot \left(\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}} \right) \right\} =$$

$$= \frac{1}{\sigma^2} \left(\frac{\frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)} \right)^2 + \frac{1}{\sigma^2} \frac{z_1^i \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_1^{i2}}{2}} - z_2^i \frac{1}{2\Pi} e^{-\frac{z_2^{i2}}{2}}}{\Phi(z_1^i) - \Phi(z_2^i)}$$

∎

Prawdopodobieństwo a posteriori wygląda następująco:

$$\mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D}) = \frac{\mathbb{P}(\mathbf{f}) \prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i|f(x_i))}{\mathbb{P}(\mathcal{D})},$$

gdzie $\mathbb{P}(\mathcal{D}) = \int \mathbb{P}(\mathcal{D}|\mathbf{f})\mathbb{P}(\mathbf{f})d\mathbf{f}$.

Dowód

$$\mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D}) = \frac{\mathbb{P}(\mathbf{f}, \mathcal{D})}{\mathbb{P}(\mathcal{D})} = \frac{\mathbb{P}(\mathcal{D}|\mathbf{f})\mathbb{P}(\mathbf{f})}{\int \mathbb{P}(\mathbf{f}, \mathcal{D})d\mathbf{f}} = \frac{\mathbb{P}(\mathbf{f}) \prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i|f(x_i))}{\int \mathbb{P}(\mathbf{f}, \mathcal{D})d\mathbf{f}}$$

∎

Parametry, które chcemy estymować oznaczmy wektorem $\mathbf{\Theta} = [\kappa, \sigma, b_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{r-1}]^T$.
Szukamy takiego $\mathbf{f}$, które:

$$\mathbf{f}_{MAP} := \underset{\mathbf{f}}{\operatorname{argmax}}\{\mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D})\} \equiv \underset{\mathbf{f}}{\operatorname{argmax}}\{\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D})\} \equiv \underset{\mathbf{f}}{\operatorname{argmin}}\{-\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D})\}$$

Zdefiniujmy:

$$S(\mathbf{f}) := -\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D})$$

Wtedy:

$$S(\mathbf{f}) \propto \sum_{i=1}^{n} l(y_i, f(x_i)) + \frac{1}{2}\mathbf{f}^T \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{f}$$

Dowód

$$S(f) = -\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}|\mathcal{D}) = -\ln \left[\frac{\mathbb{P}(\mathbf{f}) \prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i|f(x_i))}{\mathbb{P}(\mathcal{D})} \right] = -\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}) + \ln \mathbb{P}(\mathcal{D}) - \ln \left[\prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i|f(x_i)) \right] \propto$$

$$\propto -\ln \mathbb{P}(\mathbf{f}) - \ln \left[\prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i|f(x_i)) \right] = -\ln \left[\frac{1}{Z_f} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{f}^T \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{f}} \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[-\ln \mathbb{P}(y_i|f(x_i)) \right] =$$

$$= \frac{1}{2}\mathbf{f}^T \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{f} + \ln Z_f + \sum_{i=1}^{n} l(y_i|f(x_i)) \propto \sum_{i=1}^{n} l(y_i|f(x_i)) + \frac{1}{2}\mathbf{f}^T \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{f}$$

∎

Policzmy pochodne $S(f)$:

$$\frac{\partial S(\mathbf{f})}{\partial \mathbf{f}} = \mathbf{f}^T \mathbf{\Sigma}^{-1} + \left[\frac{\partial l(y_1, f(x_1))}{\partial f(x_1)}, \dots, \frac{\partial l(y_n, f(x_n))}{\partial f(x_n)} \right]$$

$$\frac{\partial^2 S(\mathbf{f})}{\partial \mathbf{f} \partial \mathbf{f}^T} = \mathbf{\Sigma}^{-1} + \mathbf{\Lambda},$$

gdzie

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 l(y_1, f(x_1))}{\partial^2 f(x_1)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{\partial^2 l(y_n, f(x_n))}{\partial^2 f(x_n)} \end{bmatrix}$$

Korzystając z przybliżenia Laplace'a otrzymujemy:

$$\mathbb{P}(\mathcal{D}|\mathbf{\Theta})$$