Байесовский выбор моделей: байесовская линейная регрессия и понятие обоснованности (evidence)

Александр Адуенко

29е сентября 2021

- 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;
- Тестирование гипотез
  - Ошибка первого рода и мощность критерия;
  - Критическая область и как ее определить;
- Проблема множественного тестирования гипотез
  - Проблема ложных открытий при независимом одновременном тестировании множества гипотез;
  - FWER и FDR как обобщения вероятности ошибки первого рода;
  - Поправка Бонферрони как консервативное средство контроля FWER;
  - Поправка Бенджамини-Хохберга для контроля FDR для положительно регрессионно зависимых гипотез.
- Наивный байесовский классификатор. Связь целевой функции и вероятностной модели.

Экспоненциальное семейство распределений

Распределение $p(\mathbf{x})$ в экспоненциальном семействе, если плотность вероятности (функция вероятности) представима в виде
$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\Theta})} h(\mathbf{x}) \exp(\boldsymbol{\Theta}^\mathsf{T} \mathbf{u}(\mathbf{x})).$$

Распределение	Плотность	$\mathbf{u}(\mathbf{x})$	$\boldsymbol{\Theta}$	$Z(\boldsymbol{\Theta})$
$\mathrm{Be}(p)$	$p^x(1-p)^{1-x}$	x	$\log \frac{p}{1-p}$	$\frac{1}{1-p}$
$\mathrm{Poison}(\lambda)$	$\frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda}$	x	$\log \lambda$	e^λ
$\Gamma(\alpha,\ \beta)$	$\frac{\beta^\alpha x^{\alpha-1} e^{-\beta x}}{\Gamma(\alpha)}$	$[\log x,\ x]$	$[\alpha,\ -\beta]$	$\frac{\Gamma(\alpha)}{\beta^\alpha}$
$B(\alpha,\ \beta)$	$\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}$	$[\log x,\ \log(1-x)]$	$[\alpha,\ \beta]$	$\frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}$
$\mathrm{Dir}(\boldsymbol{\alpha})$	$\frac{\Gamma(\sum \alpha_i)}{\prod_j \Gamma(\alpha_j)} \prod_i p_i^{\alpha_i - 1}$	$[\log p_i]$	$\boldsymbol{\alpha}$	$\frac{\prod_j \Gamma(\alpha_j)}{\Gamma(\sum \alpha_i)}$
$\mathrm{N}(\mathbf{m},\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1})$	$\frac{\sqrt{\det \boldsymbol{\Sigma}}}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m})^\mathsf{T} \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{x}-\mathbf{m})}$	$[\mathbf{x},\ \mathbf{x}\mathbf{x}^\mathsf{T}]$	$[\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{m},\ -\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}]$	$\frac{(2\pi)^{n/2} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{m}^\mathsf{T}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{m}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{\Sigma}}}$

Пример: $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-m)^2} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma e^{\frac{m^2}{2\sigma^2}}}}_{Z(\boldsymbol{\Theta})} e^{\overbrace{x}^{u_1(x)} \cdot \overbrace{\frac{m}{\sigma^2}}^{\theta_1} + \overbrace{x^2}^{u_2(x)} \overbrace{\frac{-1}{2\sigma^2}}^{\theta_2}},$

$Z(\boldsymbol{\Theta}) = \sqrt{-\pi/\theta_2} e^{-\frac{\theta_1^2}{4\theta_2}}.$

Экспоненциальное семейство распределений. Достаточные статистики.

Статистика $T(\mathbf{x})$ называется **достаточной относительно параметра** $\boldsymbol{\Theta}$, если $p(\mathbf{x}|T(\mathbf{x})=t,\ \boldsymbol{\Theta}) = p(\mathbf{x}|T(\mathbf{x})=t)$.

Пример: $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = \dfrac{1}{Z^n(\boldsymbol{\Theta})}\exp(\theta_1\sum\limits_{i=1}^n x_i + \theta_2\sum\limits_{i=1}^n x_i^2)$.

Теорема Фишера-Неймана о факторизации. $T(\mathbf{x})$ достаточна относительно параметра $\boldsymbol{\Theta} \Longleftrightarrow p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = h(\mathbf{x})g(\boldsymbol{\Theta},\ T(\mathbf{x}))$.

Экспоненциальное семейство: $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\Theta})}h(\mathbf{x})\exp(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}}\mathbf{u}(\mathbf{x}))$.

Свойство: $\mathsf{E}\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \nabla\log Z(\boldsymbol{\Theta})$, $\mathsf{E}\mathring{\mathbf{u}}\mathring{\mathbf{u}}^{\mathsf{T}} = \nabla\nabla\log Z(\boldsymbol{\Theta})$.

Пример (нормальное распределение): $Z(\boldsymbol{\Theta}) = \sqrt{-\pi/\theta_2 e}^{-\frac{\theta_1^2}{4\theta_2}}$.

$\mathsf{E}u_1(x) = \mathsf{E}x = -\frac{\theta_1}{2\theta_2} = m$, $\mathsf{E}x^2 = \frac{\theta_1^2}{4\theta_2^2} - \frac{1}{2\theta_2} = m^2 + \sigma^2$;

$\mathsf{E}\mathring{u}_1^2 = \mathsf{D}x^2 = \frac{1}{2\theta_2^2} - \frac{\theta_1^2}{2\theta_2^3} = 2\sigma^4 + 4m^2\sigma^2$.

Пример (гамма-распределение): $p(x) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)}x^{\alpha-1}e^{-\beta x}$.

$\log Z(\boldsymbol{\Theta}) = \log\frac{\Gamma(\alpha)}{\beta^\alpha} = \log\Gamma(\theta_1) - \theta_1\log(-\theta_2)$;

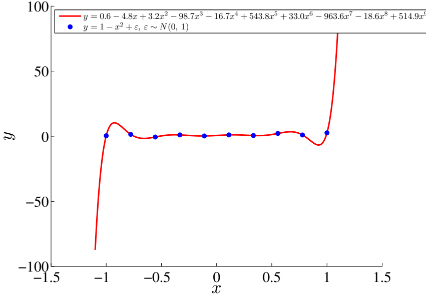
$\mathsf{E}\log x = \frac{\Gamma'(\theta_1)}{\Gamma(\theta_1)} - \log(-\theta_2) = \psi(\alpha) - \log\beta$; $\mathsf{E}x = -\frac{\theta_1}{\theta_2} = \frac{\alpha}{\beta}$.

Линейная регрессия: классический подход

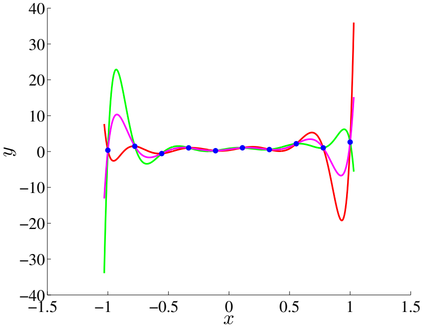
$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon}$, где $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$.

МНК (формула Гаусса): $\hat{\mathbf{w}} = \left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$.

Оптимизационный задача: $\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 \to \min\limits_{\mathbf{w}}$.



$n = d$



$n < d$

Вопросы:

- Что делать, если $n < d$ ($\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ вырождена)?
- Почему именно такая оптимизационная задача? Как связана с вероятностной моделью генерации данных?

Оптимизационный задача: $\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 \to \min\limits_{\mathbf{w}}$.

Пример. Пусть измеряется температура y_i в серверной комнате в момент времени x_i после включения отопления и считается, что нагрев происходит линейно, то есть $\mathbf{X} = [\mathbf{1},\ \mathbf{x}]$.

Предположим, что $\varepsilon_i = \mathcal{N}(0,\ 1)^\circ C / -500 + \mathcal{N}(0,\ 1)^\circ C$ с $p = 1/2$.

Замечание. Пусть $w = 1^\circ C/$час, а $w_0 = 20^\circ C$.

Выборка: $(0,\ 20.3),\ (1,\ -480.5),\ (2,\ 20.8),\ (3,\ -476.3)$.

МНК-оценка: $w_0 = -80.44;\ w_1 = -98.85$.

Вопрос: почему МНК не сработал?

Вероятностная модель линейной регрессии

$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon},\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \sigma^2\mathbf{I})$, где $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n,\ \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n\times d},\ \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$.

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \mathbf{w}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i)^2} = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sigma^n} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w}\|^2}.$$

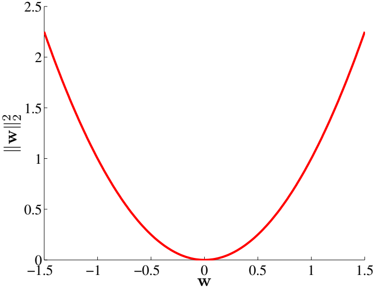
Принцип максимума правдоподобия: $\hat{\mathbf{w}}_{ML} = \arg\max\limits_{\mathbf{w}} p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w})$

$$\hat{\mathbf{w}}_{ML} = \arg\min_{\mathbf{w}} -\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) = \arg\min_{\mathbf{w}} \tfrac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2.$$

Регуляризация: классический подход

Квадратическая регуляризация

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \tau\|w\|_2^2 \to \min_{\mathbf{w}}$$



Свойства:

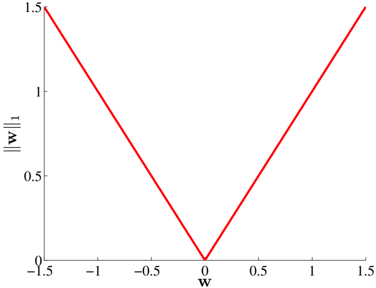
\+ Разрешимость

\+ Есть аналитическое решение

— Слабо поощряет разреженность

l_1–regularization

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \tau\|w\|_1 \to \min_{\mathbf{w}}$$



Свойства:

\+ Разрешимость

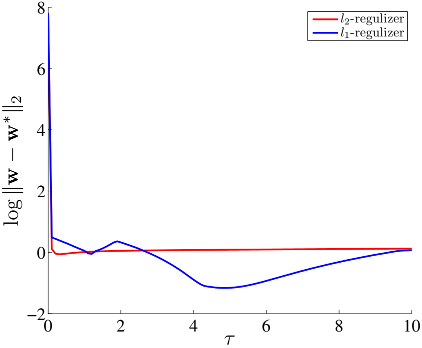
— Нет аналитического решения

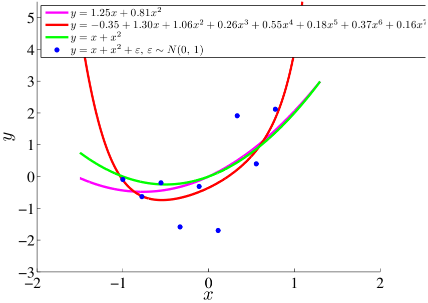
— Недифференцируемая целевая функция

\+ Поощряет разреженность

Данные

$y = x + x^2 + \varepsilon,\ \varepsilon \sim \mathcal{N}(0,\ 1),$
$y_i \sim p(y|x_i),\ i = 1,\ \ldots,\ 10,$ где $x_1,\ \ldots,\ x_{10}$
выбраны равномерно на $[-1,\ 1]$.





Зависимость точности от параметра регуляризации τ

Наилучшие полиномы

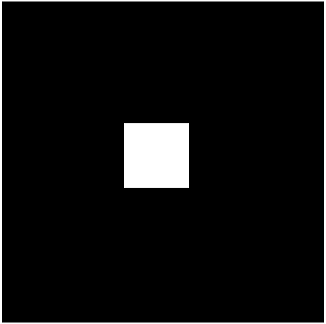
Постановка задачи

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

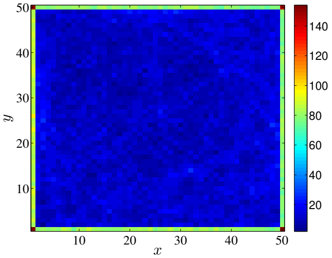
$\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n^2}$, $m < n^2$.

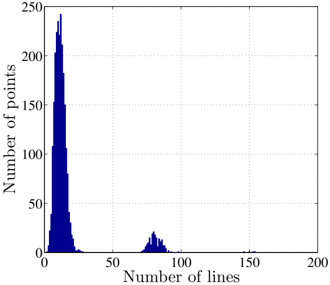
$\mathbf{w} \in [0,\ 1]^{n^2}$.

Параметры: $m = 1000$, $n = 50$.



Настоящий $\mathbf{w}$

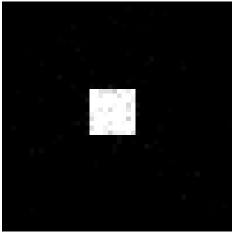




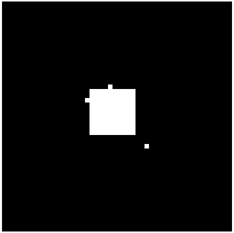
Распределение точек по числу линий

Пример "томография", $\beta = 100$

l_1–регуляризация

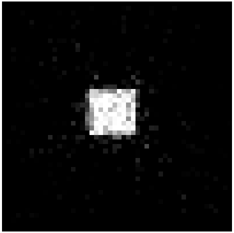


$\hat{\mathbf{w}}$

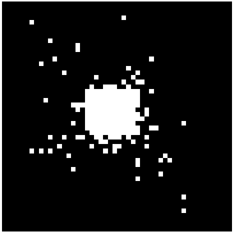


$[\hat{\mathbf{w}} > 0.05]$

Квадратическая регуляризация



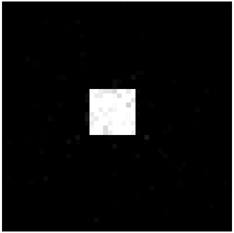
$\hat{\mathbf{w}}$



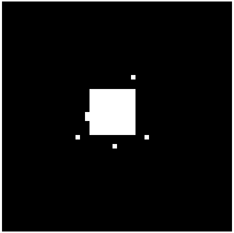
$[\hat{\mathbf{w}} > 0.05]$

Пример “томография”, $\beta = 4$

l_1–регуляризация

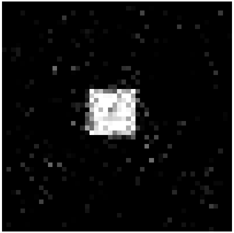


$\hat{\mathbf{w}}$

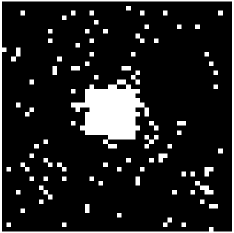


$[\hat{\mathbf{w}} > 0.05]$

Квадратическая регуляризация



$\hat{\mathbf{w}}$



$[\hat{\mathbf{w}} > 0.05]$

Вероятностная модель линейной регрессии

$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \sigma^2\mathbf{I})$, где $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n\times d}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$.

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \mathbf{w}^\mathsf{T}\mathbf{x}_i)^2} = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sigma^n} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w}\|^2}.$$

Байесовский подход.

Пусть теперь еще $\mathbf{w} \sim p(\mathbf{w}|\alpha)$, тогда $p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \alpha) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\alpha)$.

$p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) = \dfrac{p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \alpha)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \alpha)}$ – апостериорное распределение.

$$\mathbf{w}_{MAP} = \arg\max_{\mathbf{w}} p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) = \arg\min_{\mathbf{w}}(-\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) - \log p(\mathbf{w}|\alpha)).$$

Примеры:

- $p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \tau^{-1}\mathbf{I})$
  $\mathbf{w}_{MAP} = \arg\min_{\mathbf{w}} \left(\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{\tau}{2}\|\mathbf{w}\|^2\right)$.
- $p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathrm{Laplace}(\mathbf{0},\ \tau^{-1}\mathbf{I})$
  $\mathbf{w}_{MAP} = \arg\min_{\mathbf{w}} \left(\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \tau\|\mathbf{w}\|_1\right)$.

Вопрос 1: А как получить ML оценку $\mathbf{w}_{ML} = \arg\min_{\mathbf{w}}(-\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}))$?

Вопрос 2: Получили ли мы что-то новое?

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) = \frac{p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}|\mathbf{X},\ \alpha)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \alpha)} = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\alpha)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \alpha)} \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\alpha).$$

Тогда $\log p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) \propto \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\ \mathbf{w}) + \log p(\mathbf{w}|\alpha)$.

Нормальное априорное распределение.

Рассмотрим $p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \tau^{-1}\mathbf{I})$, тогда

$-\log p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) \propto \frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \frac{\tau}{2}\|\mathbf{w}\|^2 = \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{y}^\mathsf{T}\mathbf{y} - \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{y}^\mathsf{T}\mathbf{X}\mathbf{w} + \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{w}^\mathsf{T}\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{X}\mathbf{w} + \frac{\tau}{2}\mathbf{w}^\mathsf{T}\mathbf{w} \propto \frac{1}{2}\left(\mathbf{w}^\mathsf{T}(\tau\mathbf{I} + \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{X})\mathbf{w} - \frac{2}{\sigma^2}\mathbf{y}^\mathsf{T}\mathbf{X}\mathbf{w}\right) \propto \frac{1}{2}(\mathbf{w} - \mathbf{m})^\mathsf{T}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{w} - \mathbf{m})$, где

$\mathbf{m} = \left(\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{X} + \tau\sigma^2\mathbf{I}\right)^{-1}\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{y},\ \boldsymbol{\Sigma} = \left(\tau\mathbf{I} + \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{X}\right)^{-1}.$

Таким образом, $p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha) \propto e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{w}-\mathbf{m})^\mathsf{T}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{w}-\mathbf{m})}$.

Вопрос 1: Что мы можем сказать про распределение $p(\mathbf{w}|\mathbf{X},\ \mathbf{y},\ \alpha)$?

Вопрос 2: Что получилось бы, если бы в качестве $p(\mathbf{w}|\alpha)$ было взято $\mathrm{Laplace}(\mathbf{0},\ \tau\mathbf{I})$?

Вопрос 3: Что получилось бы, если бы в качестве $p(\mathbf{w}|\alpha)$ была взята смесь нормальных распределений $\sum_k \pi_k\mathcal{N}(\mathbf{m}_k,\ \boldsymbol{\Sigma}_k)$?

Экспоненциальное семейство распределений

Распределение $p(\mathbf{x})$ в экспоненциальном семействе, если плотность вероятности (функция вероятности) представима в виде

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\Theta})} h(\mathbf{x}) \exp(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}} \mathbf{u}(\mathbf{x})).$$

Вопрос 1: как выбрать априорное распределение $p(\boldsymbol{\Theta})$, чтобы апостериорное распределение осталось в том же экспоненциальном семействе? (свойство сопряженности правдоподобия $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta})$ и априорного распределения $p(\boldsymbol{\Theta})$)

Пусть $p(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{H(\alpha,\, \mathbf{v})}{Z(\boldsymbol{\Theta})^{\alpha}} \exp(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}} \mathbf{v})$. Тогда $p(\boldsymbol{\Theta}|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta})p(\boldsymbol{\Theta})}{p(\mathbf{x})} =$

$$\frac{1}{Z(\boldsymbol{\Theta})^{n} p(\mathbf{x})} \prod_{i=1}^{n} h(x_i) \exp(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{u}(x_i)) \cdot \frac{H(\alpha,\, \mathbf{v})}{Z(\boldsymbol{\Theta})^{\alpha}} \exp(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}} \mathbf{v}) =$$

$$\frac{1}{Z(\boldsymbol{\Theta})^{n+\alpha}} \left(H(\alpha,\, \mathbf{v}) \prod_{i=1}^{n} h(x_i)/p(\mathbf{x}) \right) \exp\left(\boldsymbol{\Theta}^{\mathsf{T}} \left(\mathbf{v} + \sum_{i=1}^{n} \mathbf{u}(x_i) \right) \right).$$

Вопрос 2: Зачем нам свойство сопряженности?

Обоснованность (evidence)

Модель M_i: $p_i(T,\ \theta|X) = p_i(T|X,\ \theta)p(\theta)$

Шаг	Наблюдаемые	Скрытые	Результат
Обучение	$(X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})$	θ	$p(\theta|X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})$
Контроль	X_{test}	T_{test}	$p(T_{\text{test}}|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})$

$$p(\theta|X_{\text{train}},\ T_{\text{train}}) = \frac{p(T_{\text{train}},\ \theta|X_{\text{train}})}{\int p(T_{\text{train}},\ \theta^*|X_{\text{train}})d\theta^*}$$

$$p(T_{\text{test}}|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}}) = \int p(T_{\text{test}},\ \theta|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})d\theta =$$

$$\int p(T_{\text{test}}|\theta,\ X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})p(\theta|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})d\theta =$$

$$\int p(T_{\text{test}}|\theta,\ X_{\text{test}})p(\theta|X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})d\theta$$

Обоснованность (evidence)

Модель M_i: $p_i(T,\, \theta | X) = p_i(T | X,\, \theta) p_i(\theta)$

Пусть имеется $K > 1$ моделей.

Процесс порождения выборки:

- Природа выбирает модель из K доступных моделей с априорными вероятностями $p(M_i)$, $i = 1,\, \ldots,\, K$.
- Для выбранной модели i^* природа сэмплирует вектор параметров θ^* из априорного распределения $p_{i^*}(\theta)$
- Имея i^*, θ^* природа выбирает X_{train} и сэмплирует T_{train} из $p_{i^*}(T | X_{\text{train}},\, \theta^*)$
- $(X_{\text{train}},\, T_{\text{train}})$ даны наблюдателю.
- Природа выбирает X_{test} и сэмплирует T_{test} из $p_{i^*}(T | X_{\text{test}},\, \theta^*)$

Модель M_i: $p_i(T,\ \theta|X) = p_i(T|X,\ \theta)p_i(\theta)$
Общая модель M: $p(T,\ \theta,\ M_i|X) = p(M_i)p_i(\theta)p_i(T|X,\ \theta)$

$$p(T_{\text{test}}|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}}) = \sum_{i=1}^{K} p_i(T_{\text{test}}|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})p(M_i|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}}) = \sum_{i=1}^{K} p_i(T_{\text{test}}|X_{\text{test}},\ X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})p(M_i|X_{\text{train}},\ T_{\text{train}})$$

$$p(M_i|X_{\text{train}},\ T_{\text{train}}) = \frac{p(T_{\text{train}},\ M_i|X_{\text{train}})}{P(T_{\text{train}}|X_{\text{train}})} \propto p(T_{\text{train}}, M_i|X_{\text{train}}) = \int p(T_{\text{train}},\ \theta,\ M_i|X_{\text{train}})d\theta = p(M_i)p_i(T_{\text{train}}|X_{\text{train}})$$

Пример выбора модели

a – applicant, r – reviewer

$$a,\ r = \begin{cases} 0, & \text{нет PhD}, \\ 1, & \text{PhD}. \end{cases}$$

d – decision

$$d = \begin{cases} 1, & \text{принять}, \\ 0, & \text{отвергнуть}. \end{cases}$$

$r = 0$	$d = 0$	$d = 1$
$a = 0$	9	0
$a = 1$	132	19

$r = 1$	$d = 0$	$d = 1$
$a = 0$	97	6
$a = 1$	52	11

Случаи:

1. $p(d|a,\ r) = p(d)$
2. $p(d|a,\ r) = p(d|a)$
3. $p(d|a,\ r) = p(d|r)$
4. $p(d|a,\ r) = p(d|a,\ r)$

1) $p(d|a,\, r) = p(d)$

Поэтому $p(d|\theta) = \mathrm{Be}(\theta)$. $\textbf{Prior}:\ p(\theta) = U[0,\, 1]$

$$p(T|X) = \int p(T|X,\, \theta)p(\theta)d\theta = \int_0^1 C_9^0(1-\theta)^9$$

$$C_{103}^{97}\theta^6(1-\theta)^{97}C_{151}^{132}\theta^{19}(1-\theta)^{132}C_{63}^{52}\theta^{11}(1-\theta)^{52}d\theta = 2.8\cdot 10^{-51}CCCC$$

2) $p(d|a,\, r) = p(d|a)$

Поэтому $p(d|a=0) = \mathrm{Be}(\theta_1)$, $p(d|a=1) = \mathrm{Be}(\theta_2)$.

$\textbf{Prior}:\ p(\theta_1) = U[0,\, 1]$, $p(\theta_2) = U[0,\, 1]$

$$p(T|X) = \int p(T|X,\, \theta_1,\, \theta_2)p(\theta_1)p(\theta_2)d\theta_1 d\theta_2 = \int_0^1\int_0^1 C_9^0(1-\theta_1)^9 C_{103}^{97}$$

$$\theta_1^6(1-\theta_1)^{97}C_{151}^{132}\theta_2^{19}(1-\theta_2)^{132}C_{63}^{52}\theta_2^{11}(1-\theta_2)^{52}d\theta_1 d\theta_2 = 4.7\cdot 10^{-51}CCCC$$

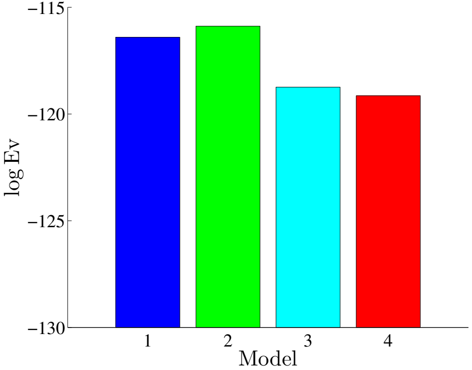
3)$p(d|a,\ r) = p(d|r)$
Поэтому $p(d|r=0) = \mathrm{Be}(\theta_1)$, $p(d|r=1) = \mathrm{Be}(\theta_2)$.
$\mathbf{Prior}:\ p(\theta_1) = U[0,\ 1]$, $p(\theta_2) = U[0,\ 1]$

$$p(T|X) = 0.27 \cdot 10^{-51} CCCC$$

4) $p(d|a,\ r) = p(d|a,\ r)$
Поэтому $p(d|a=0,\ r=0) = \mathrm{Be}(\theta_1)$, $p(d|a=0,\ r=1) = \mathrm{Be}(\theta_2)$,
$p(d|a=1,\ r=0) = \mathrm{Be}(\theta_3)$, $p(d|a=1,\ r=1) = \mathrm{Be}(\theta_4)$.
$\mathbf{Prior}:\ p(\theta_1) = U[0,\ 1]$, $p(\theta_2) = U[0,\ 1]$,
$p(\theta_3) = U[0,\ 1]$, $p(\theta_4) = U[0,\ 1]$

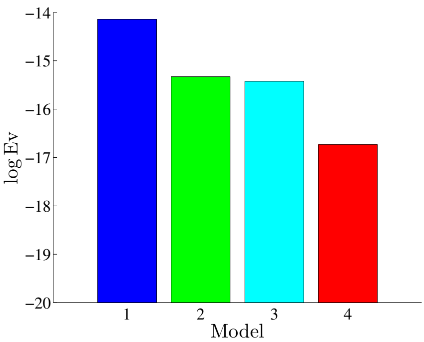
$$p(T|X) = 0.18 \cdot 10^{-51} CCCC$$

Пример выбора модели

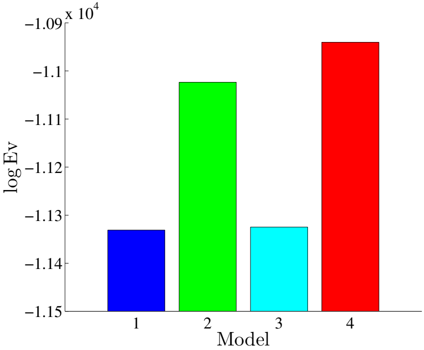


Сравнение обоснованностей, 326 объектов в выборке

Выбор модели: зависимость от размера выборки



Сравнение обоснованностей, 33 объекта в выборке



Сравнение обоснованностей, 32600 объектов в выборке

Простое понимание обоснованности

$$\text{Evidence}: p_i(T|X) = \int p_i(T|X,\ \theta)p_i(\theta)d\theta$$

$$p_i(\theta|X,\ T) = \frac{p_i(T|X,\theta)p_i(\theta)}{p(T|X)}.$$

Предположения:

- θ одномерный
- Априорное распределение $p_i(\theta)$ плоское с шириной $\Delta\theta_{\text{prior}}$
- Апостериорное распределение $p_i(\theta|X,\ T)$ сконцентрировано вокруг θ_{MP} с шириной $\Delta\theta_{\text{post}}$

Тогда: $\log p_i(T|X) \approx \log p_i(T|X,\ \theta_{MP}) + \log\left(\frac{\Delta\theta_{\text{post}}}{\Delta\theta_{\text{prior}}}\right).$

Для M-мерного θ: $\log p_i(T|X) \approx \log p_i(T|X,\ \theta_{MP}) + M\log\left(\frac{\Delta\theta_{\text{post}}}{\Delta\theta_{\text{prior}}}\right).$

$t_i = t + \varepsilon_i,\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(\varepsilon|0,\ \beta^{-1})$

$$t_1,\ \ldots,\ t_n \sim \mathcal{N}(t|\theta,\ \beta^{-1}),\ \theta \sim \mathcal{N}(\theta|0,\ \alpha^{-1}).$$

Evidence: $p(t|\alpha,\ \beta)$

$$p(t|\alpha,\ \beta) = \frac{\beta^{n/2}\alpha^{1/2}}{(2\pi)^{n/2}\sqrt{n\beta+\alpha}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta\sum_{i=1}^{n} t_i^2 + \frac{\beta^2(\sum_{i=1}^{n} t_i)^2}{2(n\beta+\alpha)}\right)$$

$(\alpha^*,\ \beta^*) = \arg\max\limits_{\alpha,\ \beta} p(t|\alpha,\ \beta).$

$$\alpha^* = \begin{cases} \dfrac{n^2\beta}{\beta(\sum_{i=1}^{n} t_i)^2 - n}, & \beta\left(\sum\limits_{i=1}^{n} t_i\right)^2 > n, \\ +\infty, & \text{иначе.} \end{cases} \qquad \beta^* = \frac{n-1}{\sum_{i=1}^{n}(t_i - \overline{t})^2}.$$

Литература

1. Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 113-120, 161-171.
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. Agresti, Alan. Analysis of ordinal categorical data. Vol. 656. John Wiley & Sons, 2010.
6. Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
7. Conjugate priors: https://people.eecs.berkeley.edu/ jordan/courses/260-spring10/other-readings/chapter9.pdf