Байесовский выбор моделей: введение

Александр Адуенко

4е сентября 2019

- Вводная лекция. Вспоминание результатов из теории вероятностей и статистики.
- Введение в байесовские методы. Базовые результаты и обозначения. Априорное распределение и неинформативные распределения (Jeffreys prior). Экспоненциальное семейство распределений.
- Байесовские модели классификации, регрессии, кластеризации, сокращения размерности.
- Понятие обоснованности в байесовском выборе моделей и его интерпретация.
- Построение интерпретируемых адекватных мультимоделей для описания сложных выборок.
- Построение и выбор моделей при анализе временных рядов.Гауссовские процессы.
- EM-алгоритм и вариационный вывод.
- Введение в графические модели.

Система оценивания

- 12 лекций + 3-4 небольших теста на них (суммарно до 100 баллов);
- 9 заданий:
  - 6 небольших (скорее теоретических) по 50 баллов,
  - 3 более крупных (скорее практических) по 100 баллов;
- Экзамен:
  - Письменная часть (200 баллов),
  - Устная часть (300 баллов).

Замечания:

- На оценку k требуется набрать $100k$ баллов;
- Экзамен можно пропустить только, если набрано не менее 550 баллов до экзамена;
- Задания содержат задачи более, чем на 50 / 100 баллов, поэтому можно выбрать, что выполнять;
- В каждом задании баллы лучшей работы удваиваются, если она оценена более, чем в 50 / 100 баллов (не более 125 / 250 баллов);
- За каждую неделю опоздания балл за задание снижается в 2 раза. Задание не принимается после его разбора или объявления об этом.

Задача. Пусть проводится эксперимент по угадыванию стороны выпадания честной монеты. Известно, что оракул прав с вероятностью $p_1 = 0.9$, а обычный человек с вероятностью $p_2 = 0.5$. Известно, что человек P оказался прав во всех $n = 10$ бросаниях. С какой вероятностью P является оракулом?

Совместное вероятность: $\mathsf{P}(A \cdot B) = \mathsf{P}(A)\mathsf{P}(B|A) = \mathsf{P}(B)\mathsf{P}(A|B)$.

Формула Байеса: $\mathsf{P}(A|B) = \dfrac{\mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A)}{\mathsf{P}(B)}$.

$A = [P - \text{оракул}]$, $B = [\text{n из n}]$.

Формула полной вероятности: $\mathsf{P}(B) = \mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A) + \mathsf{P}(B|\overline{A})\mathsf{P}(\overline{A})$,

$\mathsf{P}(B|A) = p_1^n$, $\mathsf{P}(B|\overline{A}) = p_2^n$.

$$\mathsf{P}(A|B) = \frac{\mathsf{P}(A)p_1^n}{\mathsf{P}(A)p_1^n + (1 - \mathsf{P}(A))p_2^n}.$$

Вопрос: Как определить $\mathsf{P}(A)$?

Определение априорного распределения

Идея: из предыдущего опыта и разумных соображений выбрать $\mathsf{P}(A)$.
Пример 1: отсутствие опыта (оракул и обычный неразличимы)
$\longrightarrow \mathsf{P}(A) = 0.5$
Пример 2: оракулов не бывает ($\mathsf{P}(A) = 0$) или "я ни одного за свою жизнь не видел, но может, бывают" ($\mathsf{P}(A) = 0.0001$).

Вопрос: только ли нашим опытом определяется априорное распределение? Может ли постановка эксперимента повлиять на априорное распределение?

Пример 3: Пусть человек Р хочет выглядеть оракулом в прогнозе результатов двухпартийных выборов между партиями "прелестных"и "замечательных". На первых выборах Р выбирает 1024 человека (вероятно, известных и уважаемых) и рассылает 512 из них прогноз «выиграют прелестные» , а 512 оставшихся - "выиграют замечательные". Пусть выиграли "замечательные". Тогда 512 людей знают, что Р верно предсказал исход выборов. Далее история повторяется 9 раз. Тогда в конце есть 1 человек, который знает, что Р угадал результат 10 выборов из 10.

Случай 1 (честный эксперимент, нет selection bias)
Пусть $\mathsf{P}(A) = 0.0001$ (основано на предыдущем опыте), тогда

$$\mathsf{P}_n(A|B) = \frac{\mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A)}{\mathsf{P}(B)} = \frac{0.0001 \cdot 0.9^n}{0.0001 \cdot 0.9^n + 0.9999 \cdot 0.5^n}.$$

$\mathsf{P}_{10}(A|B) = 0.0345$; $\mathsf{P}_{20}(A|B) = 0.9273$, $\mathsf{P}_{30}(A|B) = 0.9998$.
Замечание: для $\mathsf{P}(A) = 0.5$ $\mathsf{P}_{10}(A|B) = 0.9972$; $\mathsf{P}_{20}(A|B) = 0.999992$.

Случай 2 (предварительно выбран лучший из 100 случайно взятых людей по $k = 100$ попыткам)
Вопрос: сколько оракулов среди этих 100 случайно выбранных людей?
а) $\mathsf{P}(\tilde{A}) = 0.5$; б) $\mathsf{P}(\tilde{A}) = 0.0001$.

Эффективно при таком эксперименте меняется $\mathsf{P}(A)$:
а) $\mathsf{P}(A) \approx 1$; б) $\mathsf{P}(A) = 0.01$.

$$\mathsf{P}_n(A|B) = \frac{\mathsf{P}(B|A)\mathsf{P}(A)}{\mathsf{P}(B)} = \frac{0.01 \cdot 0.9^n}{0.01 \cdot 0.9^n + 0.99 \cdot 0.5^n}.$$

$\mathsf{P}_{10}(A|B) = 0.7829$; $\mathsf{P}_{20}(A|B) = 0.9992$, $\mathsf{P}_{30}(A|B) = 0.999998$.

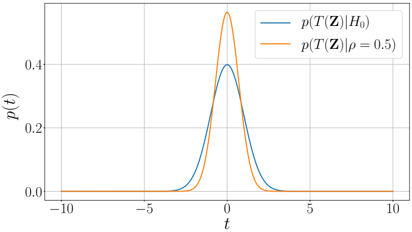
Пусть имеется выборка $\{x_1, \ldots, x_n\}$.
$H_0: p(x_1, \ldots, x_n) \in P$, где P – некоторое множество распределений.
Требуется: проверить гипотезу H_0 на уровне значимости
$\mathsf{P}(H_0 \text{ отвергнута} | H_0) \leq \alpha$.

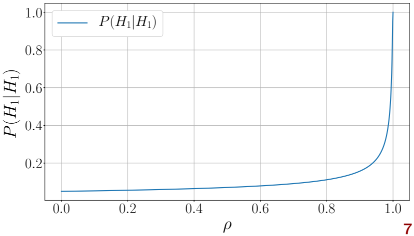
Пример: Пусть имеется выборка пар $\mathbf{z}_i = (x_i, y_i)$, $i = \overline{1, n}$,

$$\mathbf{z}_i \sim N\left(\mathbf{z}_i | (0, 0)^\mathsf{T}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}\right).$$

Гипотеза $\mathbf{H_0}$ $: \rho = 0$

$$T(\mathbf{Z}) = \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i) \sim N(0, 1 - \rho).$$



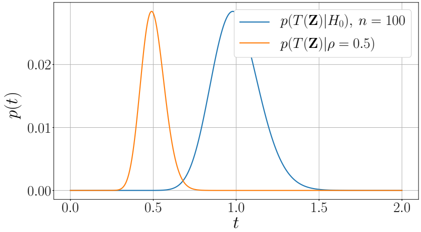


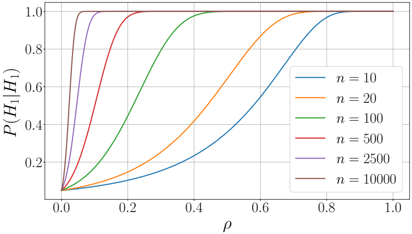
Тестирование гипотез: продолжение

$$T(\mathbf{Z}) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - y_i)^2 = \frac{1-\rho}{n}\xi,\ \xi \sim \chi^2(n).$$

$$\frac{x_i - y_i}{\sqrt{2(1-\rho)}} \sim N(0,\ 1) \implies \frac{(x_i - y_i)^2}{2(1-\rho)} \sim \chi^2(1).$$

Мощность критерия: $\mathsf{P}(H_0 \text{ отвергнута} | \overline{H_0})$

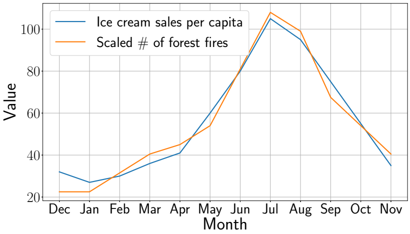


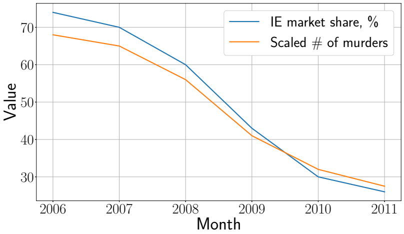


Вариант статистики: $T(\mathbf{Z}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$

$H_0 = \cup_{i \in M} H_0^i,\ M = \{1, \ldots, m\},\ M_0 = \{i:\ H_0^i\ -\ \text{верна}\},$
$R = \{i:\ H_0^i\ -\ \text{отвергнута}\}.$

	# верных	# неверных	Всего
# принятых H_0	U	T	$m - R$
# отвергнутых H_0	V	S	R
Всего	m_0	$m - m_0$	m





Меры качества:

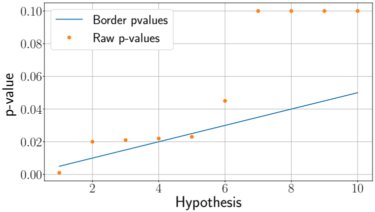
$$\text{FWER} = \mathsf{P}(V \geq 1) \leq \alpha,\ \text{FDR} = \mathsf{E}\left(\frac{V}{R} I(R > 0)\right).$$

Поправка Бонферрони. Заменим достигаемые уровни значимости $p_1, \ldots, p_m$ на поправленные (adjusted) уровни значимости $\tilde{p}_1, \ldots, \tilde{p}_m$, где $\tilde{p}_i = \min(1, mp_i)$.

Теорема. Поправка Бонферрони обеспечивает $\mathrm{FWER} \leq \frac{m_0\alpha}{m} \leq \alpha$.

Доказательство. $\mathrm{FWER} = \mathsf{P}(V \geq 1) = \mathsf{P}\left(\cup_{j=1}^{m_0}\{p_{i_j} \leq \alpha/m\}\right) \leq \sum_{j=1}^{m_0} \mathsf{P}(p_{i_j} \leq \alpha/m) \leq \frac{m_0\alpha}{m} \leq \alpha.$

Поправка Бенджамини-Хохберга.



Пусть $p_{(1)} \leq p_{(2)} \leq \ldots \leq p_{(m)}$, тогда при положительной регрессионной зависимости для $p(p_1, \ldots, p_m)$ при
$\tilde{p}_{(m)} = \min(1, p_{(m)})$,
$\tilde{p}_{(m-i)} = \min\left(1, \frac{m}{m-i}p_{(m-i)}, \tilde{p}_{(m-i+1)}\right)$
обеспечивается $\mathrm{FDR} \leq \frac{m_0}{m}\alpha$.

Наивный байесовский классификатор

Пусть имеется K классов $C = \{C_1, \ldots, C_K\}$ и $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.
Требуется построить классификатор $f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to C$.

$$p(C_k|\mathbf{x}) = \frac{p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k)}{p(\mathbf{x})} \propto p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k).$$

$$p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k) = p(C_k)p(\mathbf{x}_1|C_k)p(x_2|x_1, C_k) \cdot \ldots \cdot p(x_n|x_1, \ldots, x_{n-1}, C_k).$$

«Наивность»: $p(x_i|x_1, \ldots, x_{i-1}, C_k) = p(x_i|C_k)$.

$$p(C_k|\mathbf{x}) = \frac{p(C_k)\prod_{i=1}^n p(x_i|C_k)}{p(\mathbf{x})}.$$

Классификатор: $f(\mathbf{x}) = \arg\max_k \left(p(C_k)\prod_{i=1}^n p(x_i|C_k)\right)$.

Вопросы:

- Как определить $p(C_k)$ и $p(x_i|C_k)$?
- Насколько плоха «наивность», и зачем она вводится?
- Почему классификатор такого вида?

Вопрос: как определить $p(C_k)$ и $p(x_i|C_k)$?

1. Определяем $p(C_k)$ частотно по выборке, а для $p(x_i|C_k)$ строим параметрическую модель и используем ML-оценки ее параметров по выборке;
2. Аналогично п.1, но используем непараметрическое оценивание плотностей;
3. Вводим априорное распределение на вектор вероятностей $[p(C_1), \ldots, p(C_K)]^{\mathsf{T}}$, параметрическую модель на $p(x_i|C_k)$ с неизвестыми параметрами, и априорное распределение на параметры моделей.

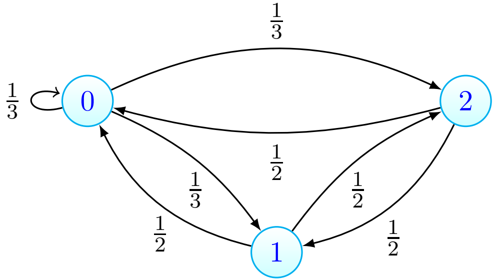
Вопрос: насколько плоха «наивность», и зачем она вводится?

Пример: $K = 2$,

$$p(\mathbf{x}|C_1) = N\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right), \; p(\mathbf{x}|C_2) = N\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\right).$$

Пример. Классификация пользователей по интересующему атрибуту (например, полу, возрасту, достатку, интересу к некоторому товару) по истории $\mathbf{x}$ переходов между веб-страницами.

Предположение: переходы между страницами для каждого класса C_k описываются марковской цепью с некоторыми вероятностями перехода (разными для разных классов) между состояниями (веб-страницами).



$$p(C_k|\mathbf{x}) = \frac{p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k)}{p(\mathbf{x})} \propto p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k).$$

$$p(C_k)p(\mathbf{x}|C_k) = p(C_k)p(\mathbf{x}_1|C_k)p(x_2|x_1, C_k) \cdot \ldots \cdot p(x_n|x_1, \ldots, x_{n-1}, C_k) = p(C_k)p(x_1|C_k)p(x_2|x_1, C_k) \cdot \ldots \cdot p(x_n|x_{n-1}, C_k).$$

Вопрос: как оценить $p(x_1|C_k)$, $p(C_k)$ и $p(x_i|x_{i-1}, C_k)$?

Наивный байесовский классификатор: продолжение

Классификатор:

$$f(\mathbf{x}) = \arg\max_k p(C_k|\mathbf{x}) = \arg\max_k \left(p(C_k) \prod_{i=1}^{n} p(x_i|C_k) \right).$$

Вопрос. Пусть $p(C_k|\mathbf{x})$ известна точно. Какой классификатор оптимален?

Пусть $K = 2$ и $P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}$ есть матрица штрафа.

Пример 1. $p_{11} = p_{22} = 0$, $p_{12} = 0$, $p_{21} = 1$;
Пример 2. $p_{11} = p_{22} = 0$, $p_{12} = 1$, $p_{21} = 1$;
Пример 3. $p_{11} = p_{22} = 0$, $p_{12} = 1$, $p_{21} = 10$;
Пример 4. $p_{11} = -1$, $p_{22} = -100$, $p_{12} = 1$, $p_{21} = 1$.

Положительная регрессионная зависимость.
Пусть $\mathbf{p} = [p_1, \ldots, p_m]^\mathsf{T}$ вектор достигаемых уровней значимости в задаче множественной проверки гипотез, а $D \subseteq \mathbb{R}^m$ – возрастающее множество $(\mathbf{x} \in D, \mathbf{y} \geq \mathbf{x} \Longrightarrow \mathbf{y} \in D)$, тогда если
$\mathsf{P}(\mathbf{p} \in D | p_{i_1} = x_1, \ldots, p_{i_j} = x_j)$ не убывает по $(x_1, \ldots, x_j)$ для любого набора $(i_1, \ldots, i_j)$, то имеет место положительная регрессионная зависимость для совместного распределения $F(p_1, \ldots, p_m)$.

Положительная регрессионная зависимость по каждому элементу из подмножества M_0.
Пусть $\mathbf{p} = [p_1, \ldots, p_m]^\mathsf{T}$ вектор достигаемых уровней значимости в задаче множественной проверки гипотез, а $D \subseteq \mathbb{R}^m$ – возрастающее множество $(\mathbf{x} \in D, \mathbf{y} \geq \mathbf{x} \Longrightarrow \mathbf{y} \in D)$, тогда если
$\mathsf{P}(\mathbf{p} \in D | p_i = x_i)$, $i \in M_0$ не убывает по x_i, то имеет место положительная регрессионная зависимость по каждому и подмножества M_0 для совместного распределения $F(p_1, \ldots, p_m)$.

Основные понятия и формулы

- Формула Байеса и формула полной вероятности;
- Априорная вероятность и как ее выбирать; правдоподобие данных;
- Тестирование гипотез: гипотеза, уровень значимости, мощность критерия, вероятность ошибки первого и второго рода;
- Множественное тестирование гипотез: FWER, FDR, поправки Бонферрони и Бенджамини-Хохберга;
- Наивный байесовский классификатор: откуда брать $p(C_k)$ и $p(\mathbf{x}|C_k)$, ограничения «наивности», учёт функции полезности.

Литература

1. Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006).
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. Benjamini, Yoav, and Daniel Yekutieli. "The control of the false discovery rate in multiple testing under dependency."Annals of statistics (2001): 1165-1188.
6. Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
7. Кобзарь, Александр Иванович. Прикладная математическая статистика. Физматлит, 2006.