Байесовский выбор моделей: введение

Александр Адуенко

11е сентября 2019

Содержание предыдущей лекции

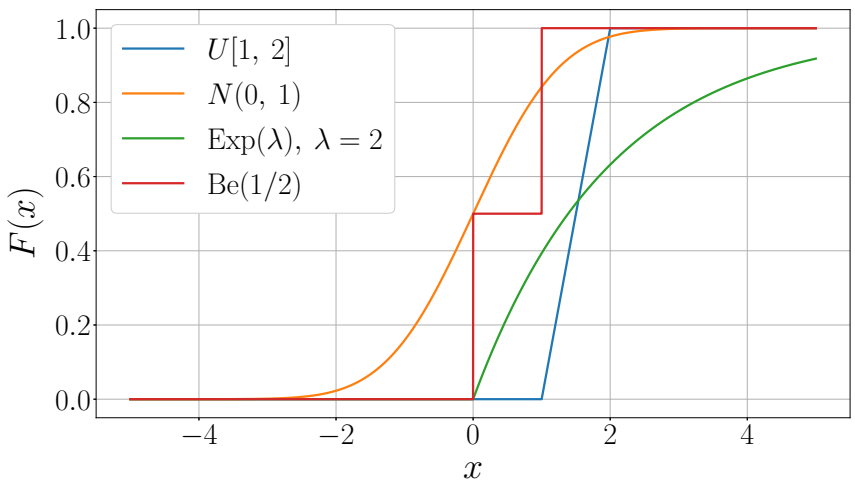
- Формула Байеса: $\mathrm{P}(A|B) = \dfrac{\mathrm{P}(B|A)\mathrm{P}(A)}{\mathrm{P}(B)}$;
- Формула полной вероятности: $\mathrm{P}(B) = \mathrm{P}(B|A)\mathrm{P}(A) + \mathrm{P}(B|\overline{A})\mathrm{P}(\overline{A})$;
- Определение априорных вероятностей и selection bias;
- Тестирование гипотез
  - 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;
- Зависимость формы классификатора от функции полезности.

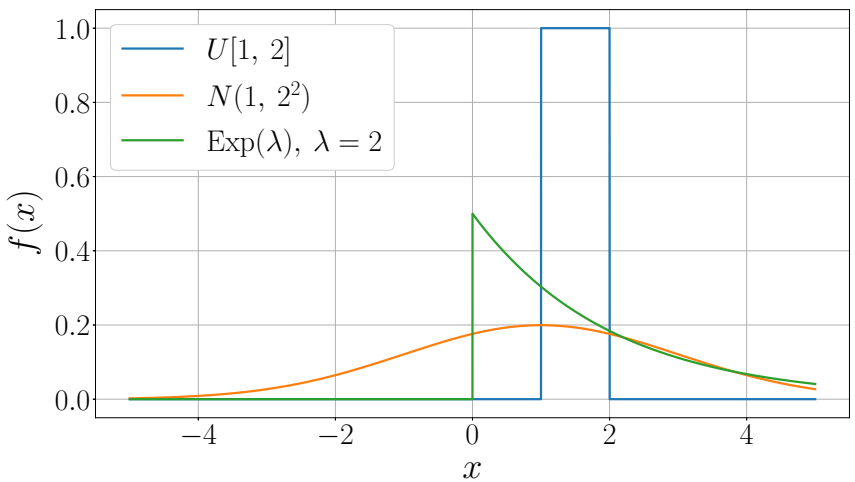
Случайные величины и их характеристики

Случайная величина – измеримая функция, заданная на некотором вероятностном пространстве.

Функция распределения: $F_\xi(\mathbf{x}) = \mathsf{P}(\xi < \mathbf{x}),\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Функция плотности распределения: $f_\xi(\mathbf{x}) = \dfrac{\partial F_\xi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$.



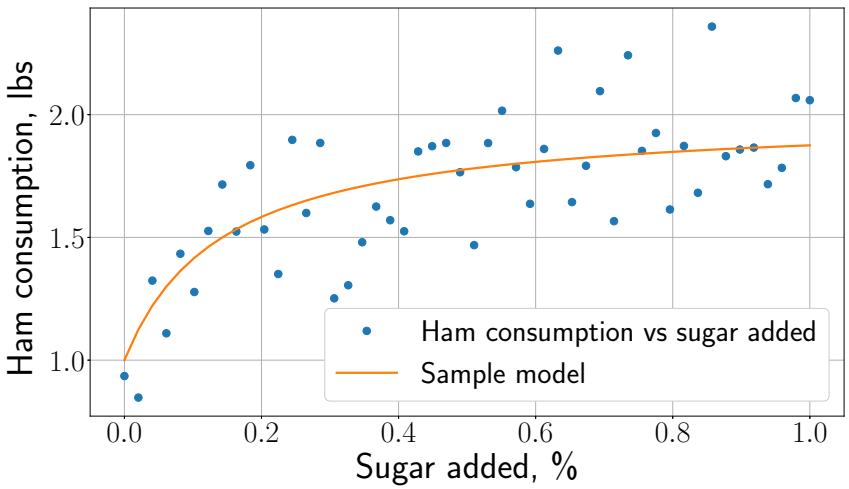


10%-ная квантиль (для одномерной с.в.) – $x : \ F(x) = 0.1$.

Важные характеристики: мат. ожидание, дисперсия, стандартное отклонение, медиана, мода, коэффициент асимметрии (skewness), коэффициент эксцесса (kurtosis).

Тестирование гипотез

Статистика – измеримая функция выборки (тоже случайная величина). Пусть требуется проверить утверждение: «чем больше сахара добавлено в продукт, тем больше его душевое потребление».



Пусть даны НОР пары $\mathbf{z}_i = (x_i,\, y_i),\ i = \overline{1,\, n}$, показывающие для ветчины, сколько сахара добавлено, и сколько её продано на одного человека.

Гипотеза H_0: монотонной зависимости нет.

Требуется: построить статистику $T(\mathbf{Z})$ и на уровне значимости $\alpha = 0.05$ проверить гипотезу.

Идеальная положительная монотонная зависимость:

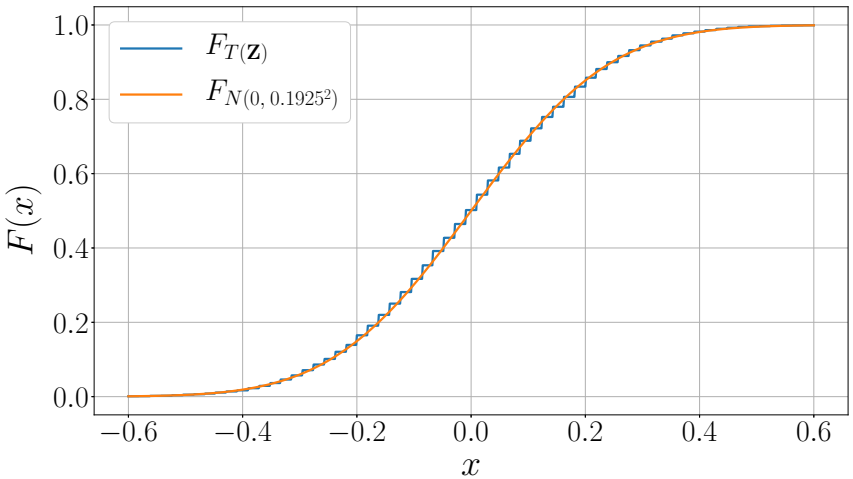
$x_{i_1} > x_{i_2} \Longrightarrow y_{i_1} > y_{i_2}$.

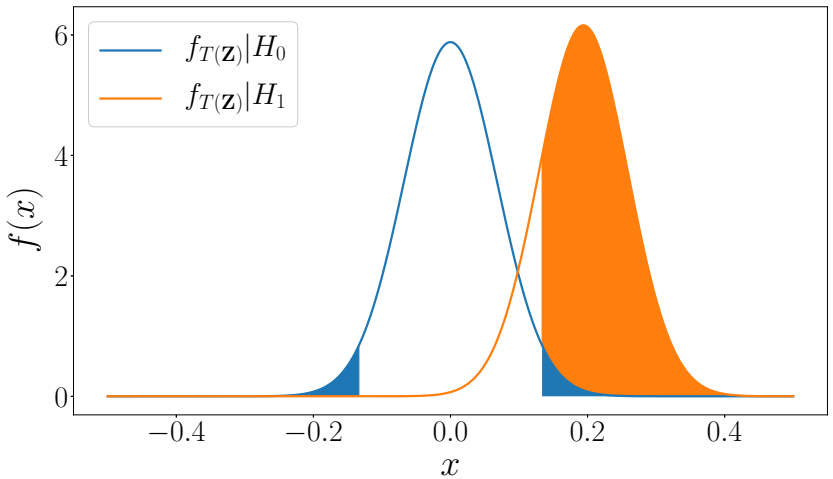
Идея: введем $\xi_i = F_x(x_i),\ \eta_i = F_y(y_i),\ \xi_i,\ \eta_i \sim U[0,\, 1]$. Скажем, что монотонной зависимости нет, если $F_{\xi\eta}(a,\, b) = F_\xi(a)F_\eta(b)$.

Тестирование гипотез: продолжение

$$T(\mathbf{Z}) = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i<j} \operatorname{sign}(x_i - x_j)\operatorname{sign}(y_i - y_j).$$

$$\mathsf{E}T(\mathbf{Z})|H_0 = 0,\ \mathsf{D}T(\mathbf{Z})|H_0 = \frac{2(2n+5)}{9n(n-1)}.$$





Гипотеза H_0: монотонной зависимости нет.

Контроль вероятности ошибки первого рода:

$\mathsf{P}(H_0 \text{ отвергнута}|H_0) \leq \alpha.$

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

Критическая область: $|T(\mathbf{Z})| > t_\alpha.$

Экспоненциальное семейство распределений

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

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

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

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

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

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 $\boldsymbol{\Theta} \iff p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = h(\mathbf{x})g(\boldsymbol{\Theta}, T(\mathbf{x}))$.

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

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

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

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?

Наивный байесовский классификатор: продолжение

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 $[p(C_1), \ldots, p(C_K)]^T$, параметрическую модель на $p(x_i|C_k)$ с неизвестыми параметрами, и априорное распределение на параметры моделей.

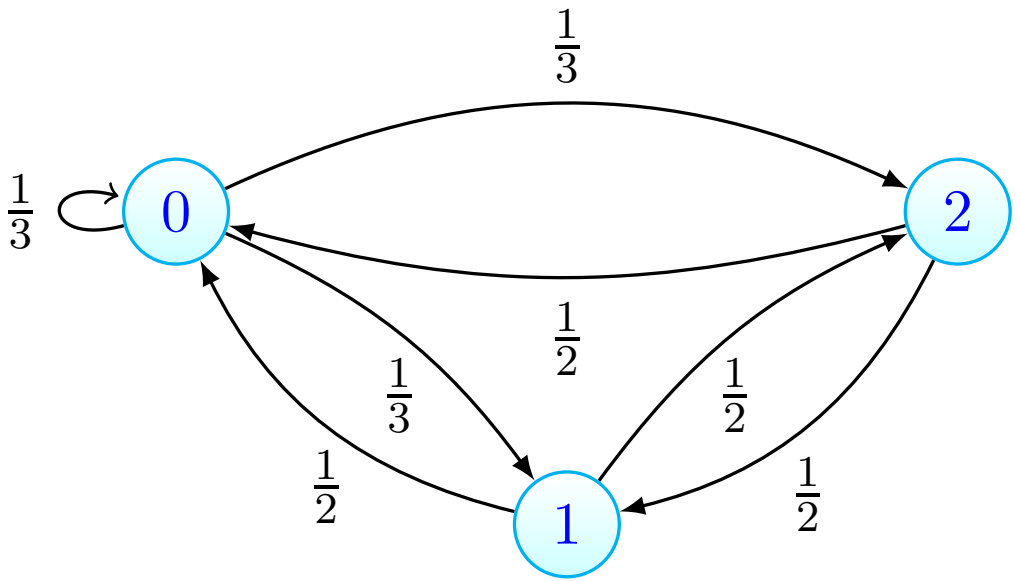
Вопрос: насколько плоха «наивность», и зачем она вводится?
Пример: $K = 2$,

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

Наивный байесовский классификатор: продолжение

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. $p_{11} = -1$, $p_{22} = -100$, $p_{12} = 1$, $p_{21} = 1$.

Пояснения

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 $F(p_1, \ldots, p_m)$.

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. Kendall, Maurice G. "A new measure of rank correlation."Biometrika 30.1/2 (1938): 81-93.
6. Agresti, Alan. Analysis of ordinal categorical data. Vol. 656. John Wiley & Sons, 2010.
7. Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
8. Кобзарь, Александр Иванович. Прикладная математическая статистика. Физматлит, 2006.