

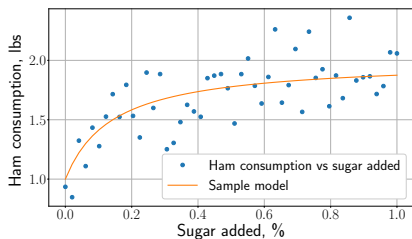
# Байесовский выбор моделей: введение

Александр Адуенко

17е сентября 2024

- Формула Байеса:  $P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$ ;
- Формула полной вероятности:  $P(B) = P(B|A)P(A) + P(B|\bar{A})P(\bar{A})$ ;
- 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.

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.

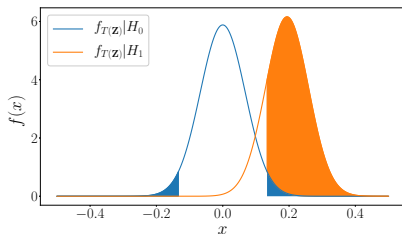
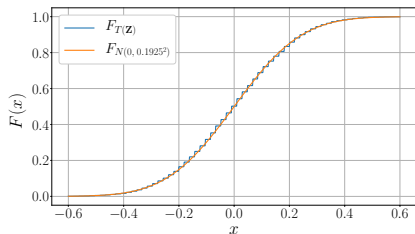
**Идеальная положительная монотонная зависимость:**

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

**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  $F_{\xi\eta}(a, b) = F_\xi(a)F_\eta(b)$ .

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

$$ET(\mathbf{Z})|H_0 = 0, \quad DT(\mathbf{Z})|H_0 = \frac{2(2n+5)}{9n(n-1)}.$$



Гипотеза  $H_0$ : монотонной зависимости нет.

Контроль вероятности ошибки первого рода:

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

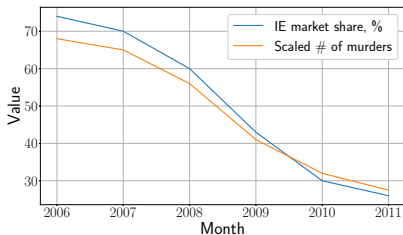
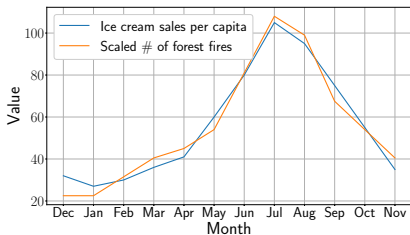
Мощность критерия:  $P(H_0 \text{ отвергнута} | \overline{H_0}) \rightarrow \max.$

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

# Множественное тестирование гипотез

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

	# 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:

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

# Поправки для учета эффекта множественных проверок

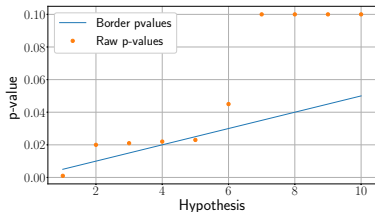
**Поправка Бонферрони.** Заменяем достигаемые уровни значимости  $p_1, \dots, p_m$  на поправленные (adjusted) уровни значимости  $\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_m$ , где  $\tilde{p}_i = \min(1, mp_i)$ .

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

**Доказательство.**  $\text{FWER} = P(V \geq 1) = P\left(\bigcup_{j=1}^{m_0} \{p_{i_j} \leq \alpha/m\}\right) \leq$

$$\sum_{j=1}^{m_0} P(p_{i_j} \leq \alpha/m) \leq \frac{m_0\alpha}{m} \leq \alpha.$$

**Поправка Бенджамини-Хохберга.**



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

# Наивный байесовский классификатор

Пусть имеется  $K$  классов  $C = \{C_1, \dots, C_K\}$  и  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ .

Требуется построить классификатор  $f(\cdot) : \mathbb{R}^n \rightarrow C$ .

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

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

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

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

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

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

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

**Пример:**  $K = 2$ ,

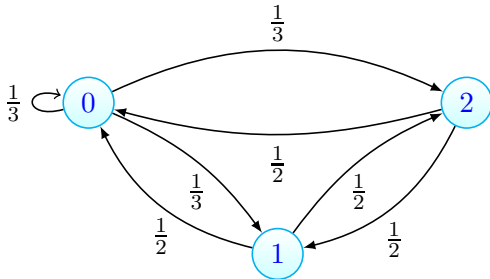
$$p(\mathbf{x}|C_1) = \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right), \quad p(\mathbf{x}|C_2) = \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\right).$$



# Наивный байесовский классификатор: продолжение

**Пример.** Классификация пользователей по интересующему атрибуту (например, полу, возрасту, достатку, интересу к некоторому товару) по истории  $x$  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).



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

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

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

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

# Экспоненциальное семейство распределений

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

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

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

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

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

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

**Пример:**  $p(\mathbf{x}|\Theta) = \frac{1}{Z^n(\Theta)} \exp(\theta_1 \sum_{i=1}^n x_i + \theta_2 \sum_{i=1}^n x_i^2)$ .

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

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

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

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

$$Eu_1(x) = Ex = -\frac{\theta_1}{2\theta_2} = m, \quad Ex^2 = \frac{\theta_1^2}{4\theta_2^2} - \frac{1}{2\theta_2} = m^2 + \sigma^2;$$

$$E\dot{u}_1^2 = Dx^2 = \frac{1}{2\theta_2^2} - \frac{\theta_1^2}{2\theta_2^3} = 2\sigma^4 + 4m^2\sigma^2.$$

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

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

$$E \log x = \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)} - \log \beta = \psi(\alpha) - \log \beta; \quad Ex = \frac{\alpha}{\beta}.$$

- 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 Agresti, Alan. Analysis of ordinal categorical data. Vol. 656. John Wiley & Sons, 2010.
- 6 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
- 7 Кобзарь, Александр Иванович. Прикладная математическая статистика. Физматлит, 2006.