

Байесовский выбор моделей: Гамильтоновы методы Монте-Карло по схеме марковских цепей (НМС)

Александр Адуенко

21е декабря 2025

Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса и формула полной вероятности;
- Определение априорных вероятностей и selection bias;
- (Множественное) тестирование гипотез
- Экспоненциальное семейства. Достаточные статистики.
- Наивный байес. Связь целевой функции и вероятностной модели.
- Линейная регрессия: связь МНК и $\mathbf{w}_{ML}$, регуляризации и $\mathbf{w}_{MAP}$.
- Свойство сопряженности априорного распределения правдоподобию.
- Прогноз для одиночной модели:

$$p(\mathbf{y}_{test} | \mathbf{X}_{test}, \mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}) = \int p(\mathbf{y}_{test} | \mathbf{w}, \mathbf{X}_{test}) p(\mathbf{w} | \mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}) d\mathbf{w}.$$

- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки $\mathbf{w}$ и связь априорного распределения с отбором признаков.
- ЕМ-алгоритм и отбор признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный ЕМ-алгоритм. Смесь моделей лог. регрессии.
- Гауссовские процессы. Учёт эволюции моделей во времени.
- Построение адекватных мультимodelей.
- Сэмплирование. Схема Гиббса.

Пусть имеется однородная марковская цепь с функцией плотности вероятности перехода между состояниями $q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$.

- Возьмем некоторое $p_0(\mathbf{Z})$ и сгенерируем $\mathbf{Z}_0 \sim p_0(\mathbf{Z})$;
- Генерируем $\mathbf{Z}_{i+1} \sim q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$, $i = 0, 1, \dots$;
- Выбрасываем первые m_0 наблюдений (и прореживаем, если нужна НОР (i.i.d) выборка).

Вопрос: при каких условиях такая схема приведет к получению выборки из $p(\mathbf{Z})$?

Условие 1: $p(\mathbf{Z})$ инвариантно относительно цепи, то есть

$$p(\mathbf{Z}_{i+1}) = \int p(\mathbf{Z}_i)q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)d\mathbf{Z}_i \text{ (стационарное распределение).}$$

Достаточное условие: $p(\mathbf{Z}_{i+1})q(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}_{i+1}) = p(\mathbf{Z}_i)q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$.

Условие 2: цепь эргодична, то есть стационарное распределение не зависит от начальных условий $\forall p_0(\mathbf{Z}) p_i(\mathbf{Z}_i) \rightarrow p(\mathbf{Z})$ при $i \rightarrow \infty$.

Достаточное условие: $\forall s \forall t : p(t) \neq 0 \ q(t|s) > 0$.

Схема Гиббса (Gibbs)

$$p(\mathbf{Z}) \propto \tilde{p}(\mathbf{Z}), \mathbf{Z} \in \mathbb{R}^n.$$

Считаем, что одномерные условные распределения $p(z_j | \mathbf{Z}_{\setminus j})$ легко нормируемы.

- Имеем $\mathbf{Z}_i$, хотим получить $\mathbf{Z}_{i+1}$;
- $z_{i+1}^1 \sim p(z^1 | z_i^2, \dots, z_i^n);$
 $z_{i+1}^2 \sim p(z^2 | z_{i+1}^1, z_i^3, \dots, z_i^n);$
...
- $z_{i+1}^n \sim p(z^n | z_{i+1}^1, z_{i+1}^2, \dots, z_{i+1}^{n-1}).$

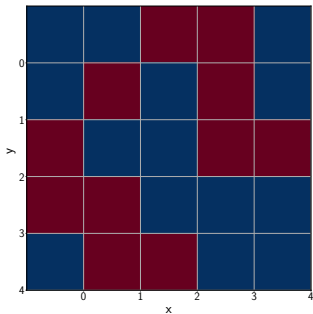
Упражнение: доказать инвариантность $p(\mathbf{Z})$ относительно такой марковской цепи.

Hint: доказать по индукции, что сэмплирование одной компоненты сохраняет $p(\mathbf{Z})$.

Модель Изинга (Ising model)

Пусть в каждой точке есть магнитный момент $x_i \in \{\pm 1\}$ и $p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\mathbf{x})/T)$, где $E(\mathbf{x}) = - \sum_{(i,j) \in \varepsilon} x_i x_j - \sum_i h_i x_i$.

Реализация магнитных моментов



Вариационное приближение

$$p(\mathbf{x}) \approx q(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^N q_i(x_i).$$

$$\log q_i(x_i) \propto \mathbb{E}_{q_{\setminus i}} \log p(\mathbf{x}) = -\frac{1}{T} \mathbb{E}_{q_{\setminus i}} E(\mathbf{x}).$$

$$q_i(x_i = 1) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{2}{T} \left(h_i + \sum_{j: (i,j) \in \varepsilon} \mathbb{E}_{q_j} x_j\right)\right)}.$$

Вопрос 2: Насколько хороша вариационная аппроксимация?

Вопрос 3: Какую альтернативу можно предложить?

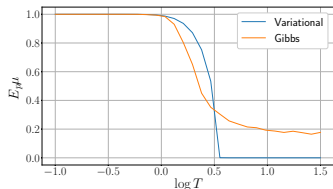
Намагниченность: $\mu = \left| \frac{1}{N} \sum_i x_i \right|$,

где N – число атомов в решетке.

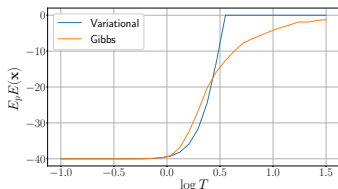
Вопрос 1: Как оценить среднюю намагниченность: $\mathbb{E}_p \mu$?

Сравнение вариационной аппроксимации и схемы Гиббса

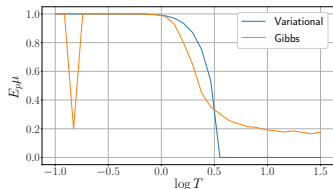
Намагниченность с температурой



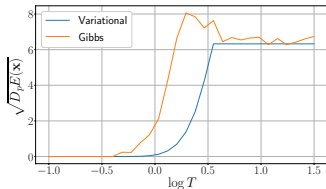
Средняя энергия с температурой



Намагниченность с температурой (проблема)



Стандартная ошибка энергии с температурой



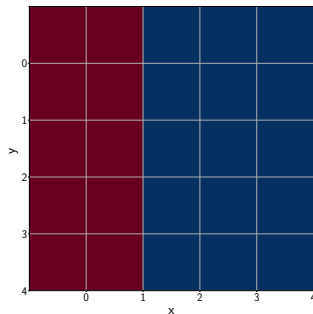
Вопрос: Что вызывает провал графика намагниченности?

Проблемы и преимущества схемы Гиббса

Свойства:

- (+) Подходит и для дискретных, и для непрерывных распределений;
- (+) Нет настраиваемых параметров;
- (-) Неэффективна в пространствах большой размерности;
- (-) Возможна очень долгая сходимость цепи к стационарному распределению.

Реализация магнитных моментов



Вопрос: Что произойдет, если начальный элемент MCMC такой и $T \ll 1$?

Схема Метрополиса-Хастингса (Metropolis-Hastings)

$p(\mathbf{Z}) \propto \tilde{p}(\mathbf{Z})$, $r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$ – предположеное распределение.

- Имеем $\mathbf{Z}_i$, сэмплируем $\mathbf{Z}^* \sim r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$;
- Вычисляем $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min \left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)r(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_i)} \right)$
- $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}^*$ с вероятностью $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$,
 $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}_i$ с вероятностью $1 - P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$.

Отсюда $q(\mathbf{Z}_{n+1}|\mathbf{Z}_n) = \begin{cases} r(\mathbf{Z}_{n+1}|\mathbf{Z}_n)P(\mathbf{Z}_{n+1}, \mathbf{Z}_n), & \mathbf{Z}_{n+1} \neq \mathbf{Z}_n, \\ 1 - \int r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_n)P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_n)d\mathbf{Z}^*, & \mathbf{Z}_{n+1} = \mathbf{Z}_n. \end{cases}$

Достаточное условие эргодичности: $\forall s \forall t : \tilde{p}(t) > 0, q(t|s) > 0$.

Замечание 1: для выполнения этого требования достаточно $r(t|s) > 0 \forall s \forall t$.

Достаточное условие инвариантности: $\forall s \forall t \tilde{p}(s)q(t|s) = \tilde{p}(t)q(s|t)$.

Замечание 2: Убеждаемся в выполнении условия подстановкой.

Для $s = t$ очевидно. Пусть $s \neq t$, тогда $\tilde{p}(s)q(t|s) =$

$$\tilde{p}(s)r(t|s) \min \left(1, \frac{\tilde{p}(t)r(s|t)}{\tilde{p}(s)r(t|s)} \right) = \min(\tilde{p}(s)r(t|s), \tilde{p}(t)r(s|t)) = \tilde{p}(t)q(s|t).$$

Схема Метрополиса-Хастингса (продолжение)

- Имеем $\mathbf{Z}_i$, сэмплируем $\mathbf{Z}^* \sim r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$;
- Вычисляем $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min \left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)r(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_i)} \right)$
- $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}^*$, $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$,
 $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}_i$, $1 - P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$.

Если $r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}^*)$, то
 $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min \left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)} \right)$.

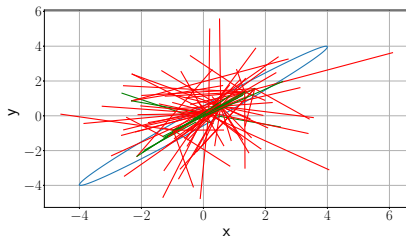
Пример

$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{N} \left(\mathbf{0}, \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0.95 \\ 0.95 & 1 \end{pmatrix} \right),$$

$$\sigma = 2,$$

$$r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = \mathcal{N}(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}, \sigma^2\mathbf{I}).$$

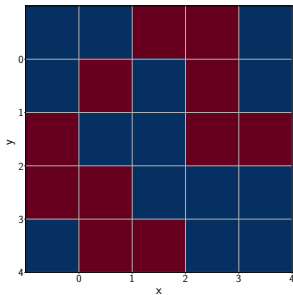
Результат сэмплирования



Релаксация модели Изинга

Пусть в каждой точке есть магнитный момент $x_i \in [-1, 1]$ и $p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\mathbf{x})/T)$, где $E(\mathbf{x}) = - \sum_{(i,j) \in \epsilon} x_i x_j - \sum_i h_i x_i$.

Реализация магнитных моментов



Намагниченность: $\mu = \left| \frac{1}{N} \sum_i x_i \right|$,

где N – число атомов в решетке.

Вопрос 1: как оценить среднюю намагниченность: $E_p \mu$?

Уравнения Гамильтона

Пусть есть частица, которая движется в поле с потенциалом $U(\mathbf{x})$.

$\mathbf{x}$, $\mathbf{p}$ – координаты и импульс частицы.

$K(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^T \mathbf{p}}{2m}$ – кинетическая энергия.

$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = U(\mathbf{x}) + K(\mathbf{p})$ – гамильтониан.

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}.$$

Вопрос 2: зачем нам уравнения Гамильтона?

Свойства гамильтоновой динамики (HD)

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad \text{— уравнения Гамильтона}$$

$$\frac{dz}{dt} = \mathbf{J} \nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z}), \quad \text{где } \mathbf{z} = (\mathbf{x}, \mathbf{p}), \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_n & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & \mathbf{0}_n \end{pmatrix}.$$

Закон сохранения полной энергии: $\frac{dH(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{dt} = 0$.

Обратимость: $[\mathbf{x}(t+s), \mathbf{p}(t+s)] = \text{HD}(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t), s)$;

$[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] = \text{HD}(\mathbf{x}(t+s), \mathbf{p}(t+s), -s)$;

$[\mathbf{x}(t), -\mathbf{p}(t)] = \text{HD}(\mathbf{x}(t+s), -\mathbf{p}(t+s), s)$.

Сохранение фазового объема: $d\mathbf{p}d\mathbf{x} = \text{const}$.

Симплектичность: $\mathbf{B}^\top \mathbf{J}^{-1} \mathbf{B} = \mathbf{J}^{-1}$, где $\mathbf{B}$ — якобиан HD по паре $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$.

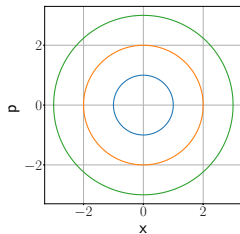
Пример

$$U(x) = \frac{x^2}{2}, \quad K(p) = \frac{p^2}{2}.$$

$$\frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -x.$$

$$x(t) = r \sin(t + \varphi),$$

$$p(t) = r \cos(t + \varphi).$$



Гамильтоновы методы Монте-Карло (НМС)

$p(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z} \exp(-U(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\mathbf{p}^T \mathbf{p})$, $U(\mathbf{x}) = -\log \tilde{p}(\mathbf{x})$ (считаем $m = 1$).

Идея: сэмплируем $(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1), \dots, (\mathbf{x}_m, \mathbf{p}_m)$ из $p(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ и выбрасываем $\mathbf{p}_i$.

Схема сэмплирования НМС:

- 1 Выбираем $\mathbf{x}^0$;
- 2 На шаге $j \geq 1$ сэмплируем $\mathbf{p}^j = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$;
- 3 Решаем уравнения Гамильтона за интервал $\Delta t = T\varepsilon$, стартуя из $(\mathbf{x}^{j-1}, \mathbf{p}^j)$ и получаем $(\mathbf{x}^j, \mathbf{p}_{\text{new}}^j)$, переворачиваем импульс: $(\mathbf{x}^j, -\mathbf{p}_{\text{new}}^j)$;
- 4 Принимаем новую точку с вероятностью $A = \min(1, \exp(-H(\mathbf{x}^j, -\mathbf{p}_{\text{new}}^j) + H(\mathbf{x}^{j-1}, \mathbf{p}^j)))$;
- 5 Переходим на шаг 2.

Замечание: НМС есть частный случай схемы Метрополиса-Хастингса.

Вопрос 1: Чем задается предположное распределение в НМС?

Вопрос 2: Зачем переворачивать знак импульса?

Вопрос 3: Что было использовано при получении формулы шага 4?

Вопрос 4: Какие значения может принимать $-H(\mathbf{x}^1, \mathbf{p}_{\text{new}}^1) + H(\mathbf{x}^0, \mathbf{p}^1)$?

Вопрос 5: Гарантируется ли эргодичность для такой цепи?

Решение уравнений Гамильтона

$$\boxed{\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}}$$

– уравнения Гамильтона.

Настройка НМС

- $\mathbf{x}_0 : U(\mathbf{x}_0) \approx \max_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x})$;
- Запуск нескольких цепей;
- Выбор шага $\varepsilon : A(1 - A) \gg 0$;
- Оценка эффективной размерности выборки.

Вопрос 1: Зачем

$$U(\mathbf{x}_0) \approx \max_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x})?$$

Вопрос 2: Как определить, что цепь сошлась?

Вопрос 3: Что дает условие $A(1 - A) \gg 0$ на вероятность принятия объекта?

Вопрос 4: Как оценить эффективную размерность?

Метод Эйлера

$$\begin{cases} p_i(t + \varepsilon) = p_i(t) - \varepsilon \frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i}, \\ x_i(t + \varepsilon) = x_i(t) + \varepsilon p_i(t). \end{cases}$$

Проблема: Невязка через время T есть $O(T\varepsilon)$ (метод первого порядка).

Метод leapfrog

$$\begin{cases} p_i(t + \frac{\varepsilon}{2}) = p_i(t) - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i}, \\ x_i(t + \varepsilon) = x_i(t) + \varepsilon p_i(t + \frac{\varepsilon}{2}), \\ p_i(t + \varepsilon) = p_i(t + \frac{\varepsilon}{2}) - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial U(\mathbf{x}(t + \varepsilon))}{\partial x_i}. \end{cases}$$

Замечание 1: Невязка через время T есть $O(T\varepsilon^2)$ (метод II порядка).

Замечание 2: Метод обратим: если сначала идти вперед по времени T , а затем назад, то через T вернемся в исходную точку.

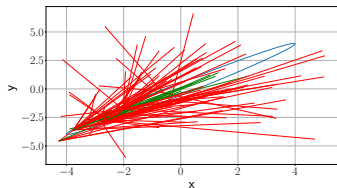
Замечание 3: Сохраняет фазовый объем и модифицированную полную энергию.

Сравнение HD со схемой Метрополиса-Хастингса с диагональным предположным распределением

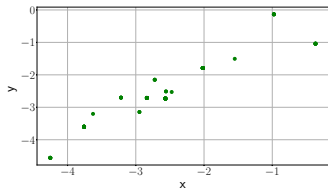
$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 1 \end{pmatrix}\right), \sigma = 2.$$

Метрополис-Хастингс

$$r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = \mathcal{N}(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}, \sigma^2\mathbf{I})$$

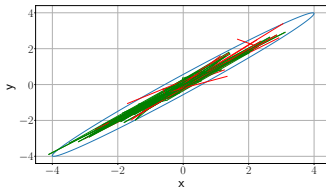


Сгенерированные сэмплы

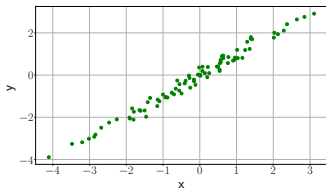


Гамильтонов МС

Leapfrog, $\varepsilon = 0.25$, $T = 6.25$.



Сгенерированные сэмплы



Методы Монте-Карло по Ланжевену (Langevin Monte-Carlo)

Эквивалентная запись метода leapfrog:

$$\begin{cases} x_i(t + \varepsilon) = x_i(t) - \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} + \varepsilon p_i(t), \\ p_i(t + \varepsilon) = p_i(t) - \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} + \frac{\partial U(\mathbf{x}(t+\varepsilon))}{\partial x_i} \right). \end{cases} \quad .$$

Схема сэмплирования ЛМС:

- 1 Выбираем $\mathbf{x}_0$;
- 2 На шаге $j \geq 1$ сэмплируем $\mathbf{p}^j = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$;
- 3 Решаем уравнения Гамильтона за интервал малый интервал ε :
$$\begin{cases} \mathbf{x}^j = \mathbf{x}^{j-1} - \frac{\varepsilon^2}{2} \nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^{j-1}) + \varepsilon \mathbf{p}^j, \\ \mathbf{p}_{\text{new}}^j = \mathbf{p}^j - \frac{\varepsilon}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^{j-1}) + \nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^j)) \end{cases}$$

и переворачиваем импульс $(\mathbf{x}^j, -\mathbf{p}_{\text{new}}^j)$;
- 4 Принимаем новую точку с вероятностью 1 в силу малости шага ε ;
- 5 Переходим на шаг 2.

Замечание 1: Обычно ЛМС работает хуже, чем общий НМС.

Вопрос 1: В чём преимущество НМС по сравнению со схемой Гиббса?

Hint: Подумайте, может ли НМС генерировать из разных мод

мультимодального распределения?

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 523-556.
- 2 Steve Brooks et al. «Handbook of Markov Chain Monte Carlo», Chapter 5. URL: <http://www.mcmchandbook.net/HandbookChapter5.pdf>
- 3 MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
- 4 MacKay, David JC. "The evidence framework applied to classification networks." Neural computation 4.5 (1992): 720-736.
- 5 Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
- 6 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.