

Байесовский выбор моделей: Методы Монте-Карло по схеме марковских цепей (MCMC)

Александр Адуенко

9е 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 байесовский классификатор. Связь целевой функции и вероятностной модели.
- Линейная регрессия: связь МНК и $\mathbf{w}_{\text{ML}}$, регуляризации и $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$.
- Свойство сопряженности априорного распределения правдоподобию.
- Прогноз для одиночной модели:

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

- 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.

ЕМ и вариационный ЕМ-алгоритм (воспоминание)

Пусть $\mathbf{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$ – наблюдаемые переменные, $\mathbf{Z}$ – скрытые переменные.
 $p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta) = p(\mathbf{D}|\mathbf{Z}, \Theta)p(\mathbf{Z}|\Theta)$.

Вопрос 1: Как решить задачу $p(\mathbf{D}|\Theta) = \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} \rightarrow \max_{\Theta}$?

ЕМ-алгоритм

Введем $F(q, \Theta) = - \int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} = \log p(\mathbf{D}|\Theta) - D_{\text{KL}}(q\|p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta))$.

Идея 1: $p(\mathbf{D}|\Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$ заменим на $F(q, \Theta) \rightarrow \max_{q, \Theta}$.

Идея 2: Пошагово оптимизируем по Θ и q , то есть

1 Е-шаг: $q^s = F(q, \Theta^{s-1}) \rightarrow \max_{q \in Q}$;

2 М-шаг: $\Theta^s = F(q^s, \Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$.

Вариационный ЕМ-алгоритм: $Q = \left\{ q(\mathbf{Z}) : q(\mathbf{Z}) = \prod_{k=1}^K q(\mathbf{z}_k) \right\}$.

Прогноз:

$$p(y|\mathbf{x}, \mathbf{D}, \Theta) = \int p(y, \mathbf{Z}|\mathbf{x}, \mathbf{D}, \Theta)d\mathbf{Z} = \int p(y|\mathbf{x}, \mathbf{Z})p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)d\mathbf{Z}.$$

Вопрос 2: Как быть с $p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta) = \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)}{p(\mathbf{D}|\Theta)}$?

Необходимость сэмплирования

Пусть есть некоторая переменная $\mathbf{Z}$ с распределением $p(\mathbf{Z})$.

- Найти $P(f(\mathbf{Z}) > 0)$;
 - $P(\mathbf{w}^T \mathbf{x} > B)$, где $\mathbf{w}$ – веса признаков, $\mathbf{x}$ – признаковое описание, а $\mathbf{w}^T \mathbf{x}$ – ожидаемый доход.
- $E f(\mathbf{Z}) = \int f(\mathbf{Z}) p(\mathbf{Z}) d\mathbf{Z} \approx \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(\mathbf{Z}_i)$;
- $p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{A}) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}) p(\mathbf{w}|\mathbf{A}) d\mathbf{w}$ в лог. регрессии;
- $E_{q(\mathbf{Z})} \log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\Theta)$ на M шаге EM-алгоритма.

Вопрос 1: Что делать, если $p(\mathbf{Z})$ известно с точностью до константы, то есть $p(\mathbf{Z}) \propto \tilde{p}(\mathbf{Z})$?

Вопрос 2: Что делать для решения задачи $p(\mathbf{Z}) \rightarrow \max_{\mathbf{Z}}$, если $p(\mathbf{Z})$ известно, но задача максимизации аналитически не решается?

Метод обратной функции ($p(z)$ известно, $z \in \mathbb{R}$)

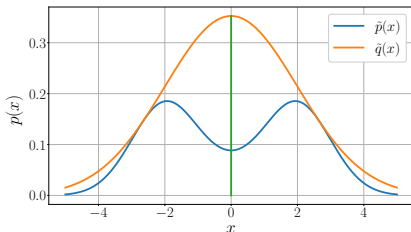
ξ – непрерывная случайная величина, тогда $\eta = F_\xi(\xi) \sim U[0, 1]$.

Генерируем $x_1, \dots, x_m$ как $x_i = F_\xi^{-1}(y_i)$, где $y_i \sim U[0, 1]$.

Выборка с отклонением (rejection sampling)

Замечание: $p(\mathbf{Z}) \propto \tilde{p}(\mathbf{Z})$ известно с точностью до константы.

Пусть $q(\mathbf{Z})$ – некоторое предположное (proposal) распределение и $\tilde{p}(\mathbf{Z}) \leq \tilde{q}(\mathbf{Z}) = \alpha q(\mathbf{Z})$.



- Сгенерируем выборку $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ из $q(\mathbf{Z})$;
- Сгенерируем $t_1, \dots, t_n \sim U[0, 1]$;
- Принимаем те точки выборки, где $t_i < \frac{\tilde{p}(\mathbf{x}_i)}{\tilde{q}(\mathbf{x}_i)}$.

Вопрос 1: При каких условиях rejection sampling эффективен?

Вопрос 2: Как сэмплировать из многомерного нормального распределения $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, если есть генератор из $\mathcal{N}(0, 1)$?

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: $\forall s \forall \mathbf{t} : p(\mathbf{t}) \neq 0 \implies q(\mathbf{t}|s) > 0$.

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

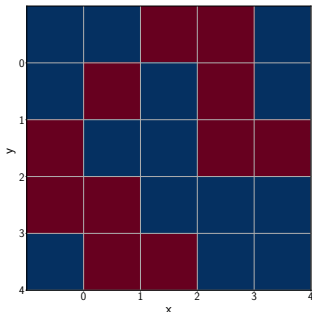
Упражнение: доказать инвариантность $p(\mathbf{Z})$ относительно такой марковской цепи.

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



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

где N – число атомов в решетке.

Вопрос 1: Как оценить среднюю

намагниченность: $E_p \mu$?

Вариационное приближение

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

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

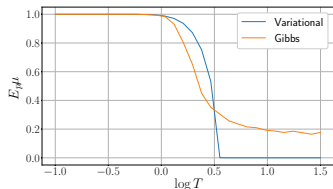
$$q_i(x_i = 1) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{2}{T} (h_i + \sum_{j: (i,j) \in \varepsilon} E_{q_j} x_j)\right)}.$$

Вопрос 2: Насколько хороша вариационная аппроксимация?

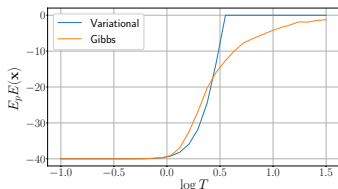
Вопрос 3: Какую альтернативу можно предложить?

Сравнение вариационной аппроксимации и схемы Гиббса

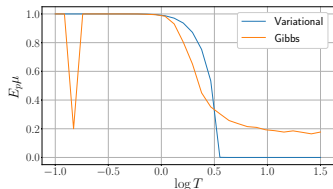
Намагниченность с температурой



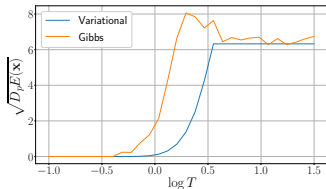
Средняя энергия с температурой



Намагниченность с температурой (проблема)



Стандартная ошибка энергии с температурой

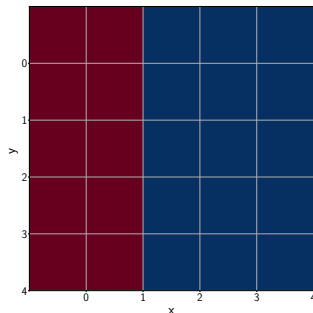


Вопрос: Что вызывает провал графика магнетизации?

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)

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

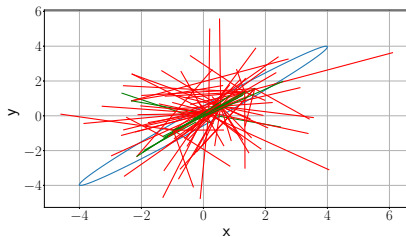
Пример

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

$$\sigma = 2,$$

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

Результат сэмплирования



- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 523-556.
- 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 Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.
- 6 Carlo, Chain Monte. "Markov chain monte carlo and gibbs sampling." Lecture notes for EEB 581 (2004): 540.
- 7 Andrieu, Christophe, Arnaud Doucet, and Roman Holenstein. "Particle markov chain monte carlo methods." Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology) 72.3 (2010): 269-342.