

Математическая статистика

Практическое задание 3

В данном задании рассматриваются свойства условного математического ожидания. В частности, рассматривается модель смеси гауссовских распределений.

Правила:

- Выполненную работу нужно отправить на почту `probability.diht@yandex.ru`, указав тему письма "[номер группы] Фамилия Имя – Задание 3". Квадратные скобки обязательны. Вместо Фамилия Имя нужно подставить свои фамилию и имя.
- Прислать нужно ноутбук и его pdf-версию. Названия файлов должны быть такими: `3.N.ipynb` и `3.N.pdf`, где N - ваш номер из таблицы с оценками.
- Никакой код из данного задания при проверке запускаться не будет.
- Некоторые задачи отмечены символом ^{*}. Эти задачи являются дополнительными. Успешное выполнение большей части таких задач (за все задания) является необходимым условием получения бонусного балла за практическую часть курса.
- Баллы за каждую задачу указаны далее. Если сумма баллов за задание меньше 25% (без учета доп. задач), то все задание оценивается в 0 баллов.

Баллы за задание:

- Задача 1 - 3 балла
- Задача 2 - 1 балл
- Задача 3 - 2 балла
- Задача 4 - 7 баллов
- Задача 5^{*} - 10 баллов

```
In [110]: import pandas as pd
import numpy as np
import scipy as sp
import scipy.stats as sps
import seaborn as sns
from matplotlib import pyplot as plt
from matplotlib import cm
from sklearn.mixture import GaussianMixture
import itertools
from sklearn.metrics import accuracy_score
%matplotlib inline
```

Задача 1. На вероятностном пространстве $(\mathbb{R}_+, \mathcal{B}(\mathbb{R}_+), P)$, где P --- экспоненциальное распределение с параметром λ , задана случайная величина ξ по правилу $\xi(\omega) = \omega$. Сигма-алгебра \mathcal{G} порождена счетной системой событий $\{B_n\}_{n \geq 1}$, где $B_n = \{n - 1 \leq \omega < n\}$.. Для $\omega \in [0, 5]$ постройте графики

- плотности распределения P для $\lambda \in \{1, 3, 10\}$
- ξ и $E(\xi|\mathcal{G})$ как функции от ω для $\lambda \in \{1, 3, 10\}$
- ξ^2 и $E(\xi^2|\mathcal{G})$ как функции от ω для $\lambda \in \{1, 3, 10\}$

Используйте приведенный ниже шаблон. Одному и тому же значению λ во всех графиках должен соответствовать один и тот же цвет.

Из домашнего задания:

$$E(\xi|\mathcal{G}) = \frac{e^\lambda(\lambda(n - 1) + 1) - \lambda n - 1}{\lambda(e^\lambda - 1)},$$

и, совершенно аналогично:

$$E(\xi^2|\mathcal{G}) = \frac{e^\lambda(\lambda(n - 1)(\lambda(n - 1) + 2) + 2) - \lambda n(\lambda n + 2) - 2}{\lambda^2(e^\lambda - 1)}$$

```
In [111]: def UMO_x(n, lambd):
    return (np.exp(lambd) * (lambd * (n - 1) + 1) - lambd * n - 1) / (lambd * (np.exp(lambd) - 1))

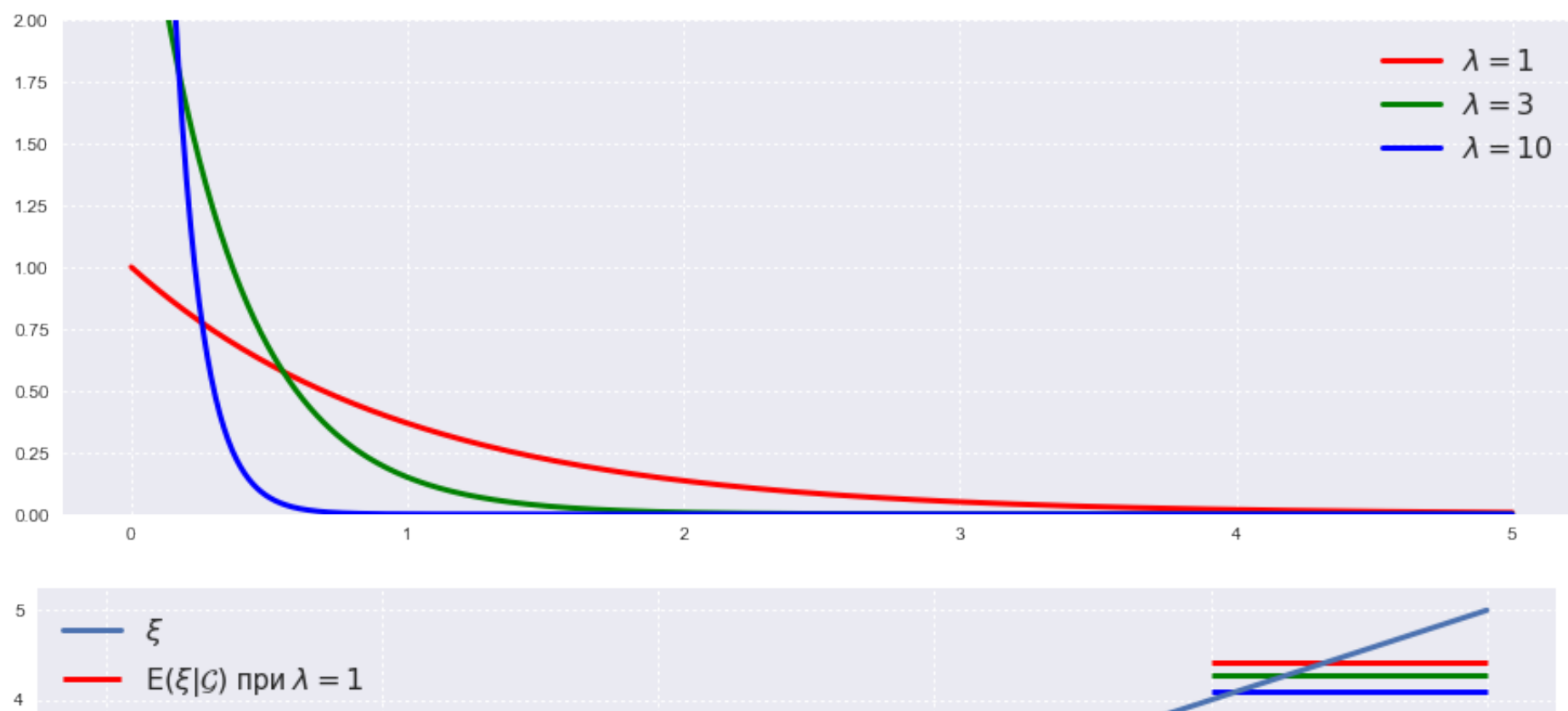
def UMO_sqr_x(n, lambd):
    up = np.exp(lambd) * (lambd * (n - 1) * (lambd * (n - 1) + 2) + 2) - lambd * n * (lambd * n + 2) - 2
    return up / (lambd**2 * (np.exp(lambd) - 1))
```

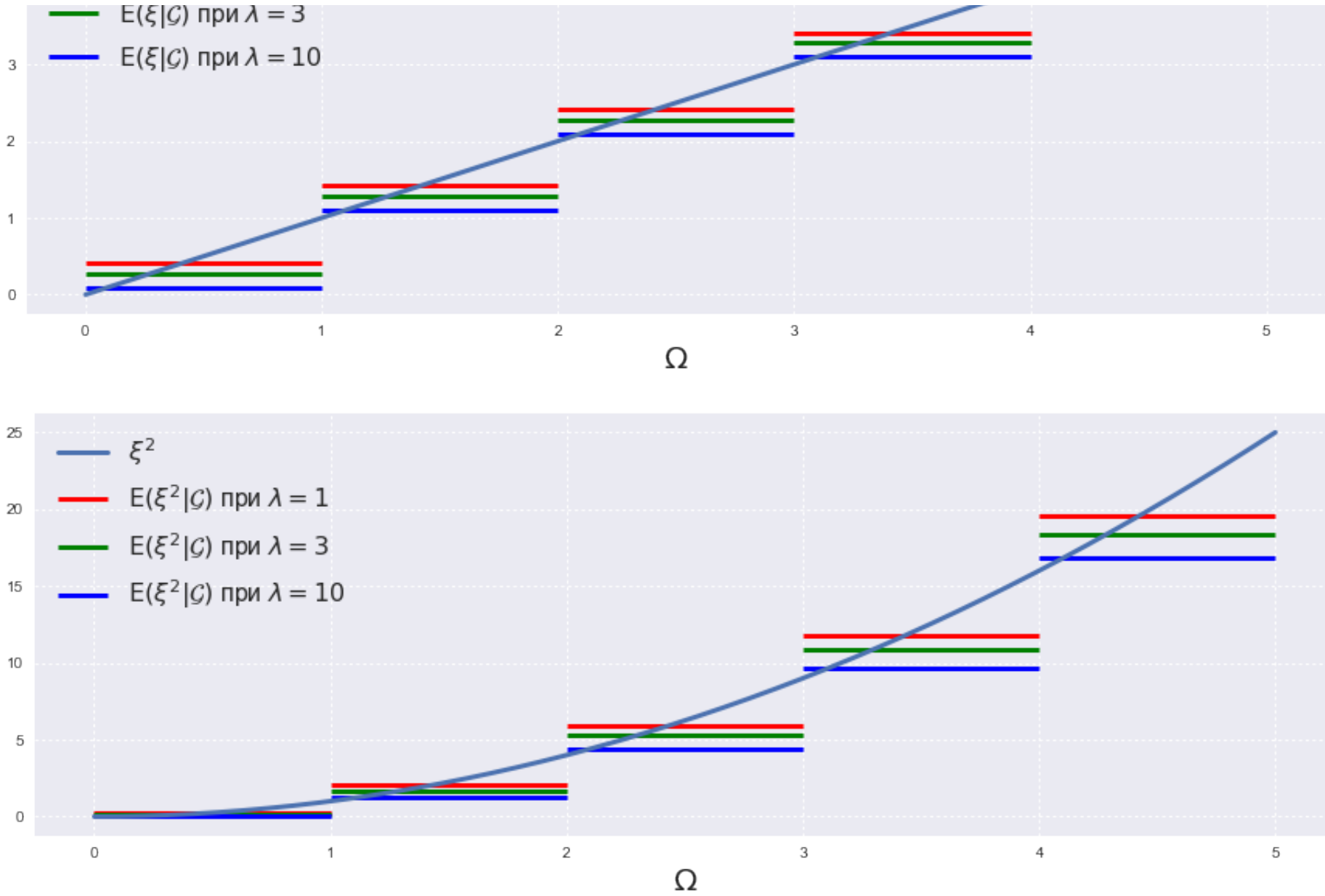
```
In [112]: lambdas_array = [1, 3, 10]
colors = ['red', 'green', 'blue']
omega = np.linspace(0, 5, 1000)

plt.figure(figsize=(15, 5))
for l, color in zip(lambdas_array, colors):
    # График 1
    plt.plot(omega, sps.expon.pdf(x=omega, scale=1/l), lw=3,
             color=color, label='$\\lambda={}$'.format(l))
    plt.legend(fontsize=16)
    plt.ylim((0, 2))
    plt.grid(ls=':')
plt.show()

# График 2
plt.figure(figsize=(15, 5))
plt.plot(omega, omega, lw=3, label='$\\xi$')
for l, color in zip(lambdas_array, colors):
    for i in [n for n in range(1, 6)]: # события из сигма-алгебры
        plt.hlines(UMO_x(i, l), i - 1, i, color=color, lw=3,
                   label=('$\\mathsf{E}(\\xi|\\mathcal{G})$ при $\\lambda = ' + str(l) + '$') if i == 1 else '')
plt.xlabel('$\\Omega$', fontsize=20)
plt.legend(fontsize=16)
plt.grid(ls=':')
plt.show()

# График 3
plt.figure(figsize=(15, 5))
plt.plot(omega, omega**2, lw=3, label='$\\xi^2$')
for l, color in zip(lambdas_array, colors):
    for i in [n for n in range(1, 6)]: # события из сигма-алгебры
        plt.hlines(UMO_sqr_x(i, l), i - 1, i, color=color, lw=3,
                   label=('$\\mathsf{E}(\\xi^2|\\mathcal{G})$ при $\\lambda = ' + str(l) + '$') if i == 1 else '')
plt.xlabel('$\\Omega$', fontsize=20)
plt.legend(fontsize=16)
plt.grid(ls=':')
plt.show()
```





Вывод: На последних двух графиках мы показали справедливость утверждения для значения УМО при некотором условии от счетного разбиения. Получили, что умо имеет константное значении на интервалах.

Понятно, что умо -- это усреднение, таким образом мы проверили свойство $E(E(\xi|G)) = E\xi$

****Задача 2.****
Пусть $\xi = (\xi_1, \xi_2) \sim \mathcal{N}(a, \Sigma)$, где $a=0$ и $\Sigma = \begin{pmatrix} 10 & 8 \\ 8 & 10 \end{pmatrix}$. Для $y \in \{-3, 0, 1, 5\}$ постройте графики условной плотности $f_{\xi_1|\xi_2}(x|y)$.

$$f_{\xi_1|\xi_2}(x|y) = \frac{p_{(\xi_1, \xi_2)}(x, y)}{p_{\xi_2}(y)}.$$

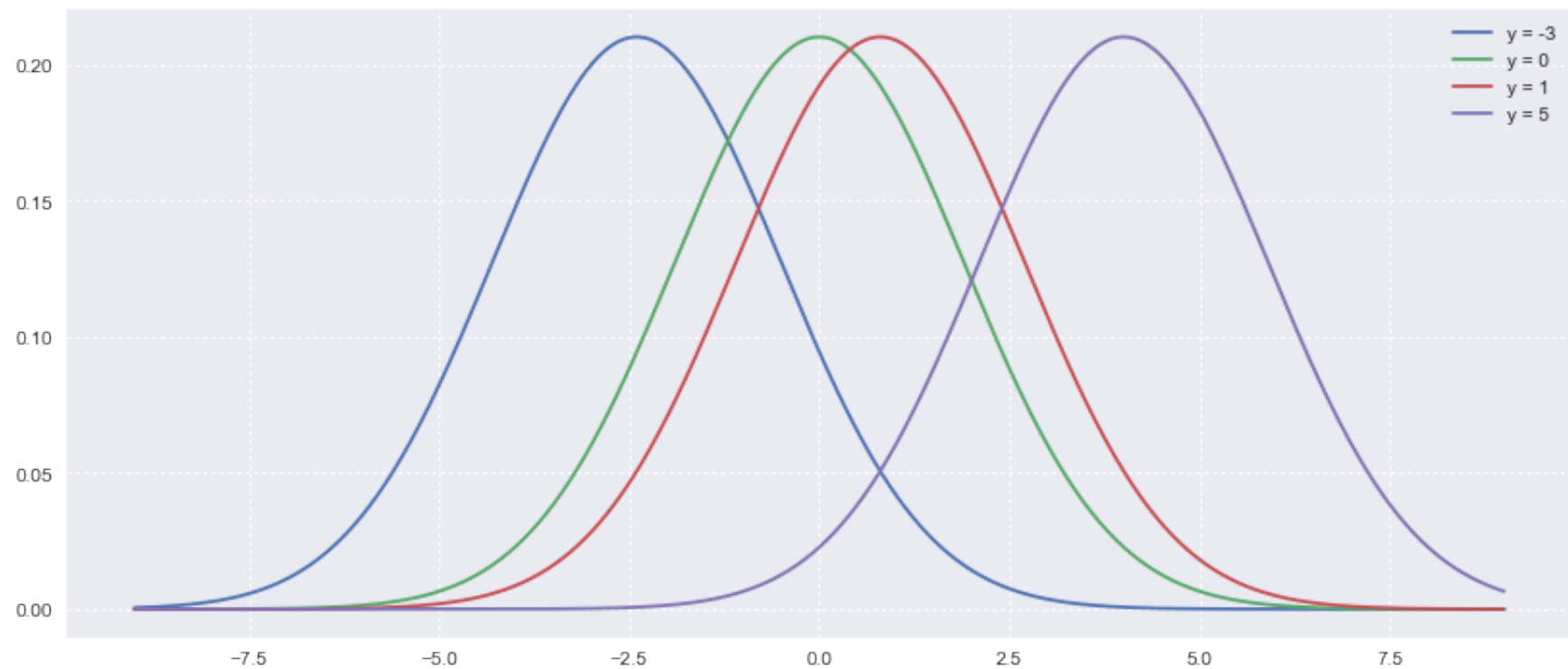
Знаем, что $p_{(\xi_1, \xi_2)}(x, y) = \frac{1}{2\pi|\Sigma|^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(\bar{x}-\mu)^T \Sigma^{-1}(\bar{x}-\mu)} = \frac{1}{12\pi} e^{-\frac{1}{36}(5x^2 - 8xy + 5y^2)}$

Тогда: $p_{\xi_2}(y) = \int_{-\infty}^{\infty} p_{(\xi_1, \xi_2)}(x, y) dx = \frac{1}{2\sqrt{5\pi}} e^{-\frac{1}{20}y^2}$

И в итоге: $f_{\xi_1|\xi_2}(x|y) = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{5}{\pi}} e^{-\frac{5}{36}x^2 + \frac{2}{9}xy - \frac{4}{45}y^2}$

```
In [57]: def cond_pdf(x, y):  
         return 1/6 * np.sqrt(5 / np.pi) * np.exp(-5/36 * x**2 + 2/9 * x*y - 4/45 * y**2)
```

```
In [58]: x = np.linspace(-9, 9, 1000)
plt.figure(figsize=(14, 6))
for y in [-3, 0, 1, 5]:
    plt.plot(x, cond_pdf(x, y), label="y = {}".format(y))
plt.legend(loc="best")
plt.grid(ls=':')
plt.show()
```



Вывод: После построения этих графиков, сразу становится видно, что $E(X_1|X_2 = y)$ имеет нормальное распределение с одной и той же дисперсией.

Из теоретического домашнего задания, $\xi_1, \xi_2 \sim \mathcal{N}(0, 10)$

$$E(\xi_1|\xi_2) = E(\alpha\xi_2 + Z|\xi_2)$$

Причем $cov(Z, \xi_2) = cov(\xi_1 - \alpha\xi_2, \xi_2) = 0$ Отсюда получаем $\alpha = 0.8$

$$Z = \xi_1 - 0.8\xi_2$$

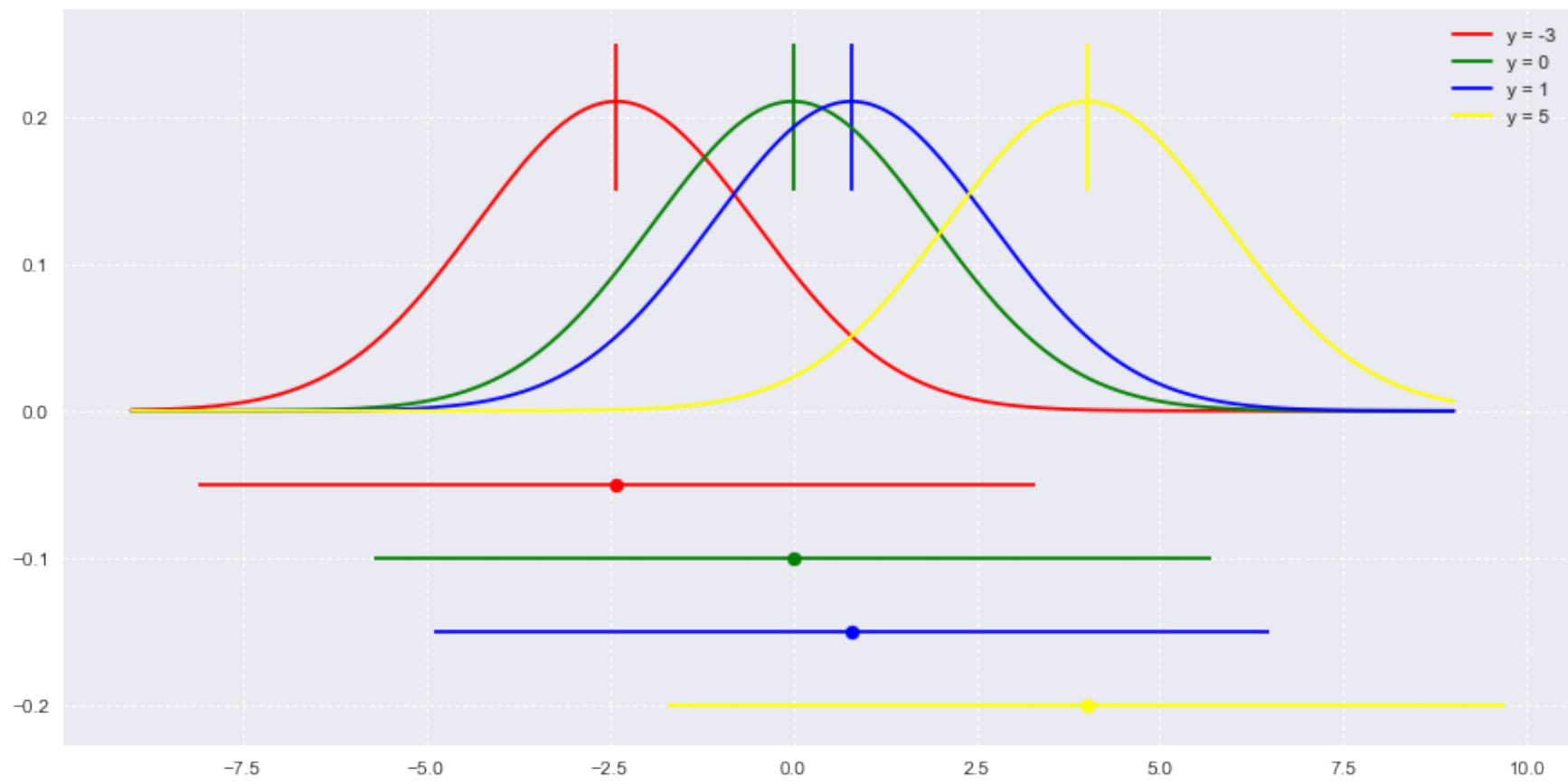
Проверим это при $y = 5$: из нашей матрицы ковариаций получаем, что $\sigma_1^2 = 10, \sigma_2^2 = 10, \rho = \frac{4}{5}$. Далее

$$E(\xi_1|\xi_2) = 0.8\xi_2 + EZ = 0.8\xi_2$$

что и показал нам график выше)

Их дисперсия равна $18/5$ (из функции условной плотности). Проверим и это

```
In [107]: x = np.linspace(-9, 9, 1000)
plt.figure(figsize=(14, 7))
colors = ['red', 'green', 'blue', 'yellow']
for i, y in enumerate([-3, 0, 1, 5]):
    plt.plot(x, cond_pdf(x, y), label="y = {}".format(y), color=colors[i])
    plt.vlines(4/5*y, 0.15, 0.25, color=colors[i])
    plt.hlines(-(i+1)*0.05, 4/5*y-3*np.sqrt(18/5), 4/5*y+3*np.sqrt(18/5), color=colors[i])
    plt.scatter(4/5*y, -(i+1)*0.05, color=colors[i])
plt.legend(loc="best")
plt.grid(ls=':')
plt.show()
```



Задача 3. Имеется множество серверов, которые периодически выходят из строя. Обозначим ξ_i время между i -м моментом выхода из строя сервера и $(i + 1)$ -м. Известно, что величины ξ_i независимы в совокупности и имеют экспоненциальное распределение с параметром λ .

Обозначим N_t --- количество серверов, которые вышли из строя к моменту времени t (в начальный момент времени $N_0 = 0$). В курсе случайных процессов будет доказано, что для любых $s < t$ величина $N_t - N_s \sim \text{Pois}(\lambda(t - s))$ и независима с N_s . При этом N_t как функция от t будет называться пуассоновским процессом интенсивности λ .

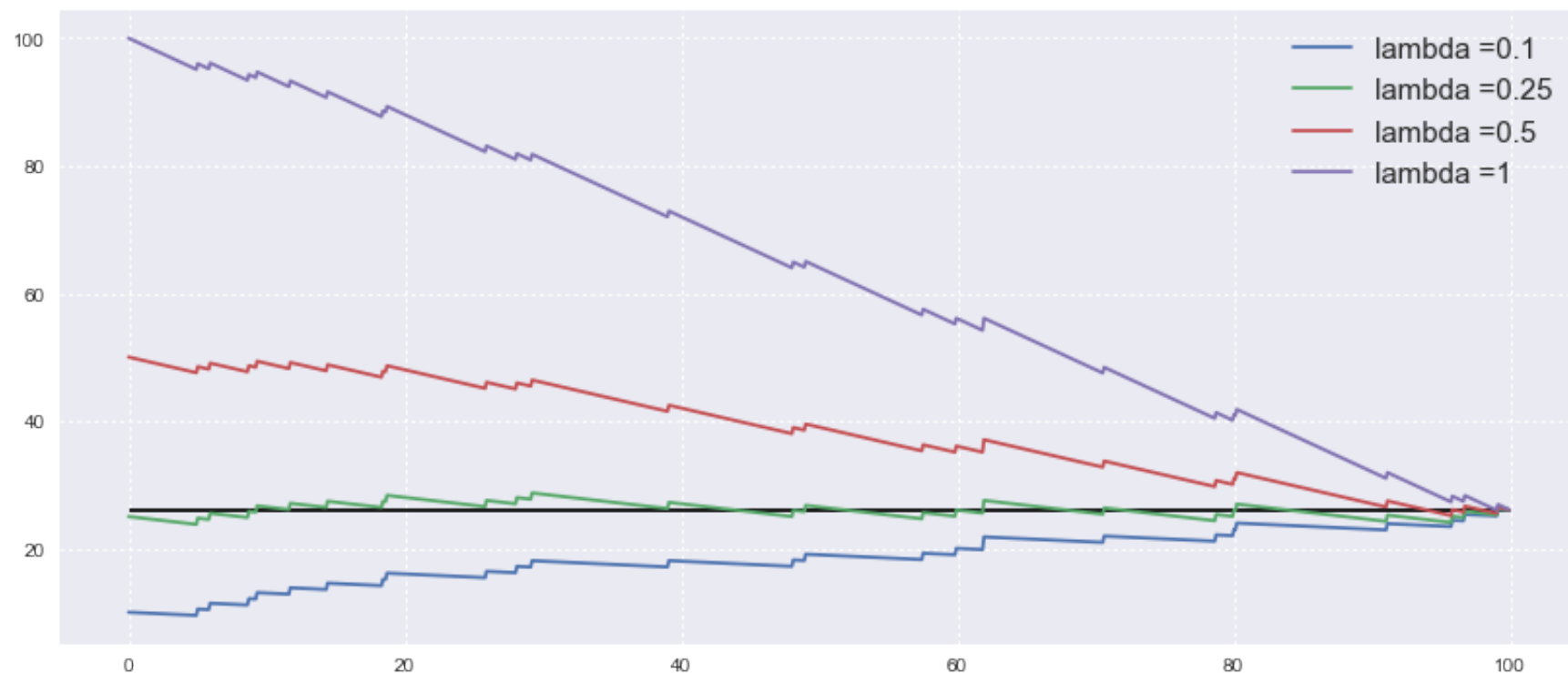
Вам нужно знать, сколько серверов нужно докупить к моменту времени t взамен вышедших из строя. В момент времени s предсказанием количества серверов, вышедших из строя к моменту времени t , будем считать величину $E(N_t | N_s)$.

Сгенерируйте выборку случайных величин ξ_i для $\lambda = 1/4$ в количестве, чтобы их сумма была больше 100. Для $t = 100$ постройте графики зависимости величины $E(N_t | N_s)$ от s в предположении, что условное математическое ожидание было посчитано при значении $\lambda \in \{1/10, 1/4, 1/2, 1\}$. Нарисуйте также на графике горизонтальную прямую уровня N_{100} .

$$E(N_t | N_s) = E(N_s + N_t - N_s | N_s) = N_s + E(N_t - N_s) = N_s + \lambda(t - s)$$

```
In [108]: lambd = 1/4
t = 100
sample = sps.expon.rvs(size=10, scale=1/lambd)
while np.sum(sample) < 120:
    sample = np.concatenate([sample, sps.expon.rvs(size=10, scale=1/lambd)])
```

```
In [109]: s = np.linspace(0, t, 1000, endpoint=False)
N_s = np.array(list(map(lambda s_once: len(sample[np.cumsum(sample) <= s_once]), s)))
plt.figure(figsize=(14, 6))
for lambd_iter in [1/10, 1/4, 1/2, 1]:
    plt.plot(s, N_s + lambd_iter*(t - s), label='lambda ={0}'.format(lambd_iter))
plt.hlines(len(sample[np.cumsum(sample) <= 100]), 0, 100)
plt.legend(loc='best', fontsize=15)
plt.grid(ls=':')
plt.show()
```



Вывод: В чем была задача? Для любого времени $s < t = 100$ мы нагенерили истинное значение количества сломанных серверов к этому моменту. Далее мы хотим предсказывать количество серверов, которые сломаются к моменту времени $t = 100$. Но с чем мы будем сравнивать? Конечно, с истинной оценкой, которую мы уже нагенерили.

Действительно проверили, что условное матожидание при $\lambda = \frac{1}{4}$ приближает истинное значение количества сломанных серверов в момент времени t . Наша формула с умом может достаточно точно предсказать количество сломанных серверов даже на 100 единиц времени вперед!

Задача 4. Рассмотрим модель смеси многомерных гауссовских распределений, то есть распределение, имеющее плотность

$$p(x) = \sum_{k=1}^K p_k(x)P(T = k),$$
 где T --- случайная величина, принимающая значения $\{1, \dots, K\}$ и имеющая смысл номера компоненты смеси, а $p_k(x)$ --- плотность распределения $N(a_k, \Sigma_k)$.

Загрузите датасет "Ирисы Фишера", используя следующий код.

```
In [61]: from sklearn.datasets import load_iris
data = load_iris()
X = data['data'] # выборка
y = data['target'] # номера компонент смеси
```

В предположении, что каждый класс имеет гауссовское распределение, оцените его параметры. Используйте для этого функции `numpy.mean` и `numpy.cov`. Проверьте, что матрица ковариаций получилась правильной --- возможно, придется предварительно поменять порядок осей (транспонировать). Напечатайте полученные оценки.

```
In [62]: sample_0, sample_1, sample_2 = X[y == 0], X[y == 1], X[y == 2]
mean_0, mean_1, mean_2 = np.mean(sample_0, axis=0), np.mean(sample_1, axis=0), np.mean(sample_2, axis=0)
cov_0, cov_1, cov_2 = np.cov(sample_0.T), np.cov(sample_1.T), np.cov(sample_2.T)
gauss_0 = sps.multivariate_normal(mean=mean_0, cov=cov_0)
gauss_1 = sps.multivariate_normal(mean=mean_1, cov=cov_1)
gauss_2 = sps.multivariate_normal(mean=mean_2, cov=cov_2)
print( '\nТип 0\nmean_0 = ', mean_0, '\n\ncov_matrix_0 = \n', cov_0)
print( '\nТип 1\nmean_1 = ', mean_1, '\n\ncov_matrix_1 = \n', cov_1)
print( '\nТип 2\nmean_2 = ', mean_2, '\n\ncov_matrix_2 = \n', cov_2)
```

Тип 0

```
mean_0 = [ 5.006  3.418  1.464  0.244]
```

```
cov_matrix_0 =
```

```
[[ 0.12424898  0.10029796  0.01613878  0.01054694]
 [ 0.10029796  0.14517959  0.01168163  0.01143673]
 [ 0.01613878  0.01168163  0.03010612  0.00569796]
 [ 0.01054694  0.01143673  0.00569796  0.01149388]]
```

Тип 1

```
mean_1 = [ 5.936  2.77  4.26  1.326]
```

```
cov_matrix_1 =
```

```
[[ 0.26643265  0.08518367  0.18289796  0.05577959]
 [ 0.08518367  0.09846939  0.08265306  0.04120408]
 [ 0.18289796  0.08265306  0.22081633  0.07310204]
 [ 0.05577959  0.04120408  0.07310204  0.03910612]]
```

Тип 2

```
mean_2 = [ 6.588  2.974  5.552  2.026]
```

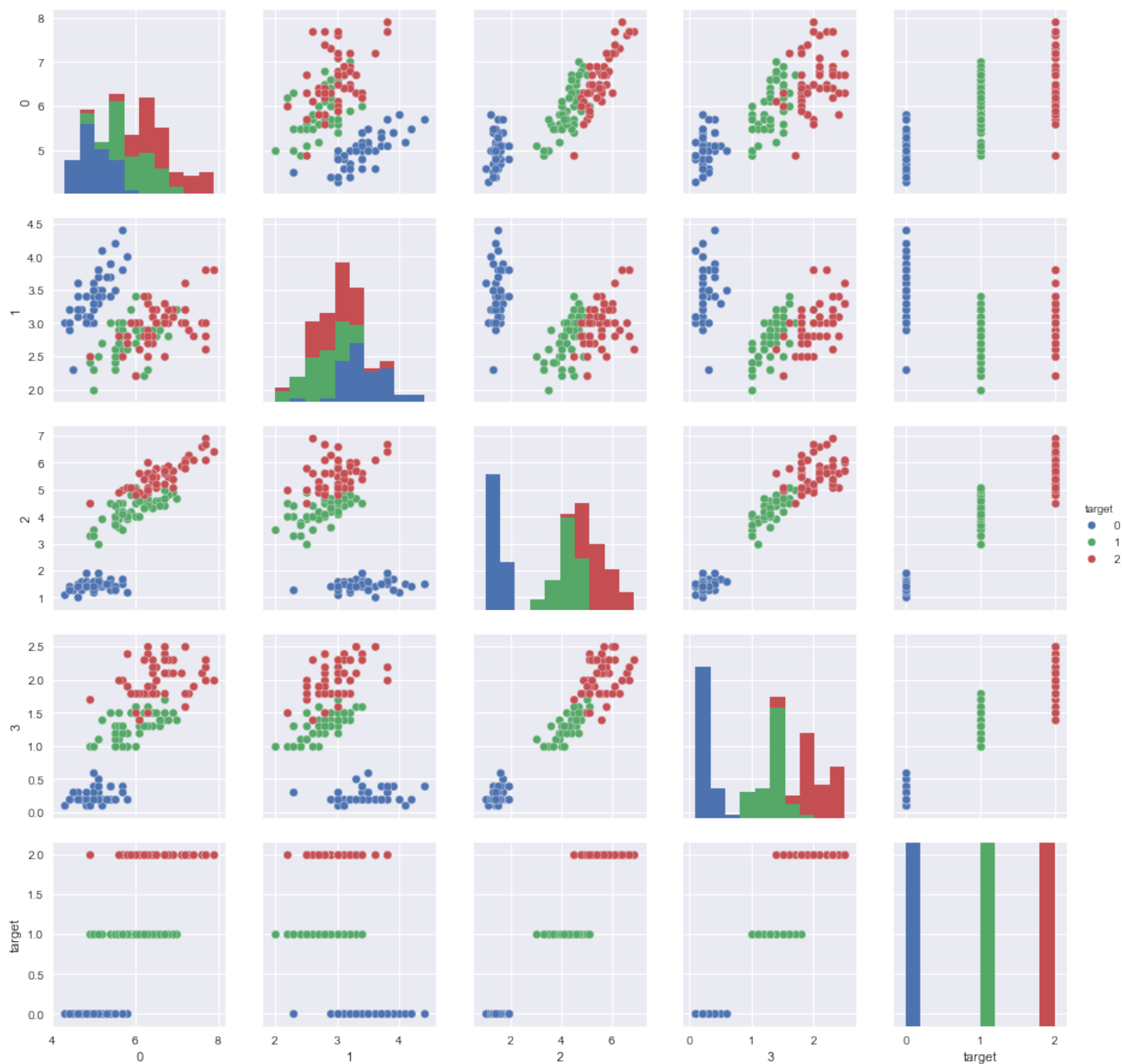
```
cov_matrix_2 =
```

```
[[ 0.40434286  0.09376327  0.3032898  0.04909388]
 [ 0.09376327  0.10400408  0.07137959  0.04762857]
 [ 0.3032898  0.07137959  0.30458776  0.04882449]
 [ 0.04909388  0.04762857  0.04882449  0.07543265]]
```



```
In [63]: df_data = pd.DataFrame(data['data'])
df_data['target'] = data['target']
sns.pairplot(df_data, hue='target')
```

Out[63]: <seaborn.axisgrid.PairGrid at 0x11ae6efd0>

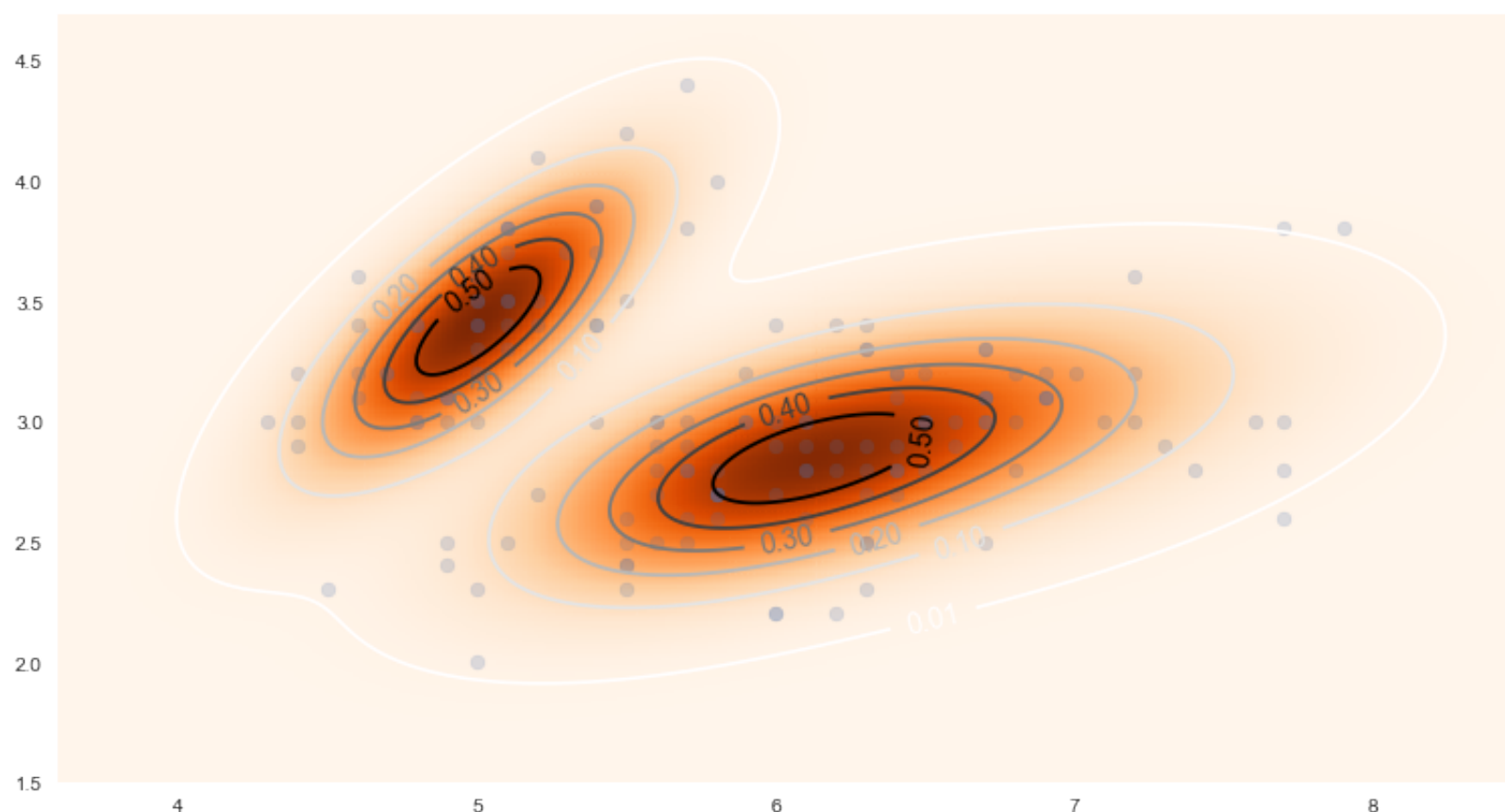


Нарисуйте график плотности (тепловую карту) в проекции на первые две координаты и нанесите на график точки выборки. При выполнении задания полезно вспомнить решение части 3 задачи 1 задания 1. Используйте шаблон ниже.

```
In [64]: def get_two_dim_density(mean, cov, ind_1, ind_2):
mean_two_dim = mean[[ind_1, ind_2]]
cov_two_dim = np.array([ [ cov[ind_1][ind_1], cov[ind_1][ind_2] ],
                        [ cov[ind_2][ind_1], cov[ind_2][ind_2] ] ])
return (mean_two_dim, cov_two_dim)
```



```
In [65]: I = np.array([0, 1]) # ЭТО МОЖНО ПЕРЕДАВАТЬ В КАЧЕСТВЕ ИНДЕКСОВ
grid = np.mgrid[3.6:8.5:1e-2, 1.5:4.7:1e-2]
pos = np.empty(grid[0].shape + (2,))
pos[:, :, 0] = grid[0]; pos[:, :, 1] = grid[1]
gauss_0_two_dim = sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_0, cov_0, *I))
gauss_1_two_dim = sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_1, cov_1, *I))
gauss_2_two_dim = sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_2, cov_2, *I))
density = 1/3 * (gauss_0_two_dim.pdf(pos) + gauss_1_two_dim.pdf(pos) + gauss_2_two_dim.pdf(pos))
plt.figure(figsize=(13, 7))
plt.pcolormesh(grid[0], grid[1], density, cmap='Oranges')
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], alpha=0.2)
CS = plt.contour(grid[0], grid[1], density, [0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5])
plt.clabel(CS, fontsize=14, inline=1, fmt='%1.2f', cmap='Set3')
plt.show()
```



Вычислите условное математическое ожидание $E(X|I\{T \neq k\} = 1)$ для всех $k = 1, 2, 3$, где X --- случайный вектор, имеющий распределение смеси. Постройте графики условной плотности $p_{X|I\{T \neq k\}}(x|1)$ в проекции на первые две координаты. Подберите хорошие значения линий уровня.

$$\begin{aligned} E(X|I\{T \neq r\}) &= \frac{EXI\{T = r\}}{P(T = r)}I\{T = r\} + \frac{EXI\{T \neq r\}}{P(T \neq r)}I\{T \neq r\} = \\ &= 3EXI\{T = r\}(1 - I\{T \neq r\}) + \frac{3}{2}(EXI\{T = r\} + EXI\{T = r\})I\{T \neq r\} \end{aligned}$$

Введем матожидания компонент смеси как μ_p, μ_q, μ_r

где $\{p, q, r\} = \{1, 2, 3\}$

Далее:

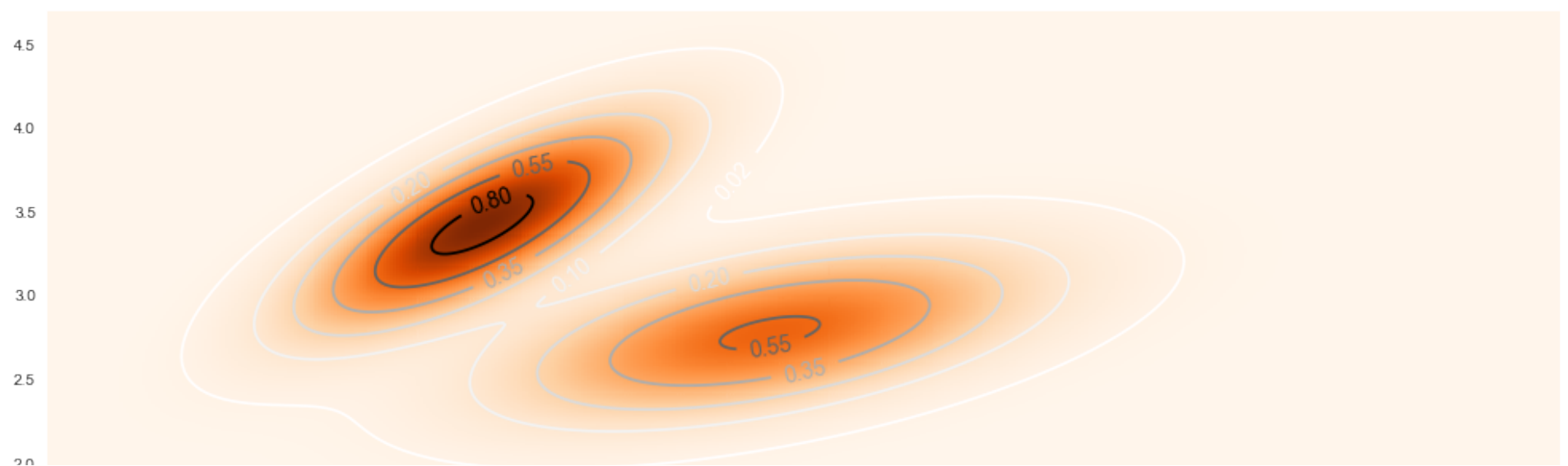
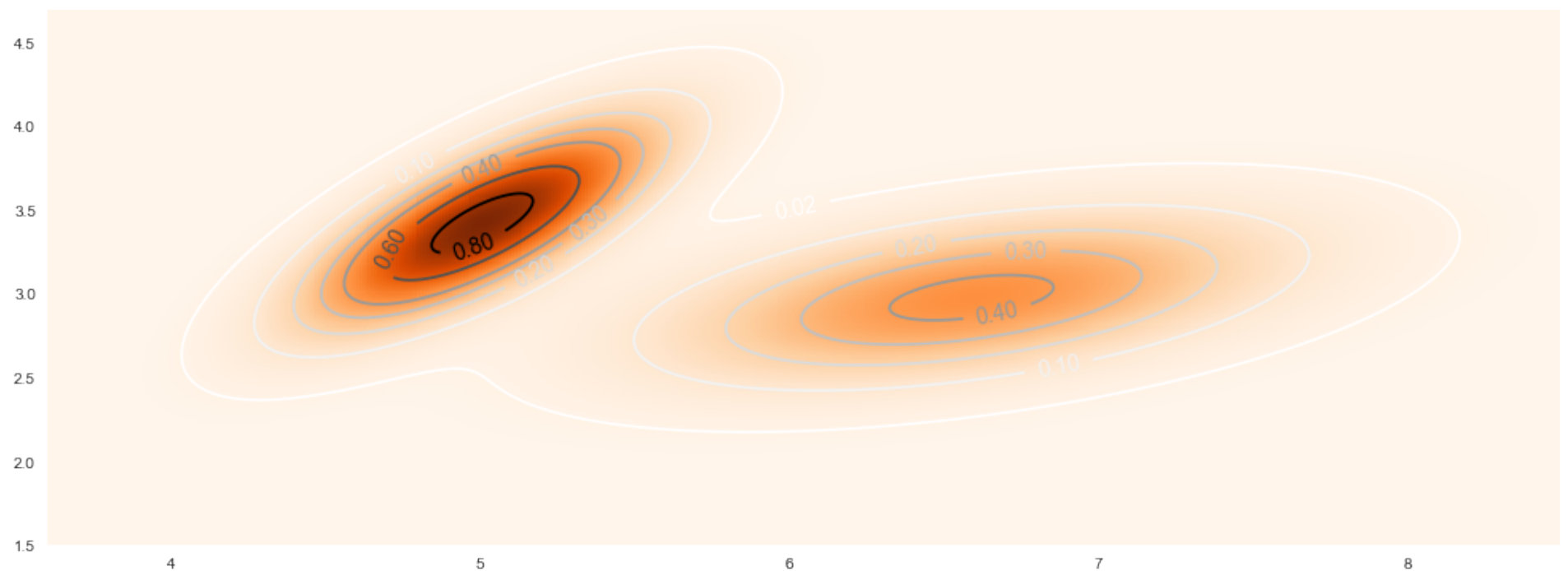
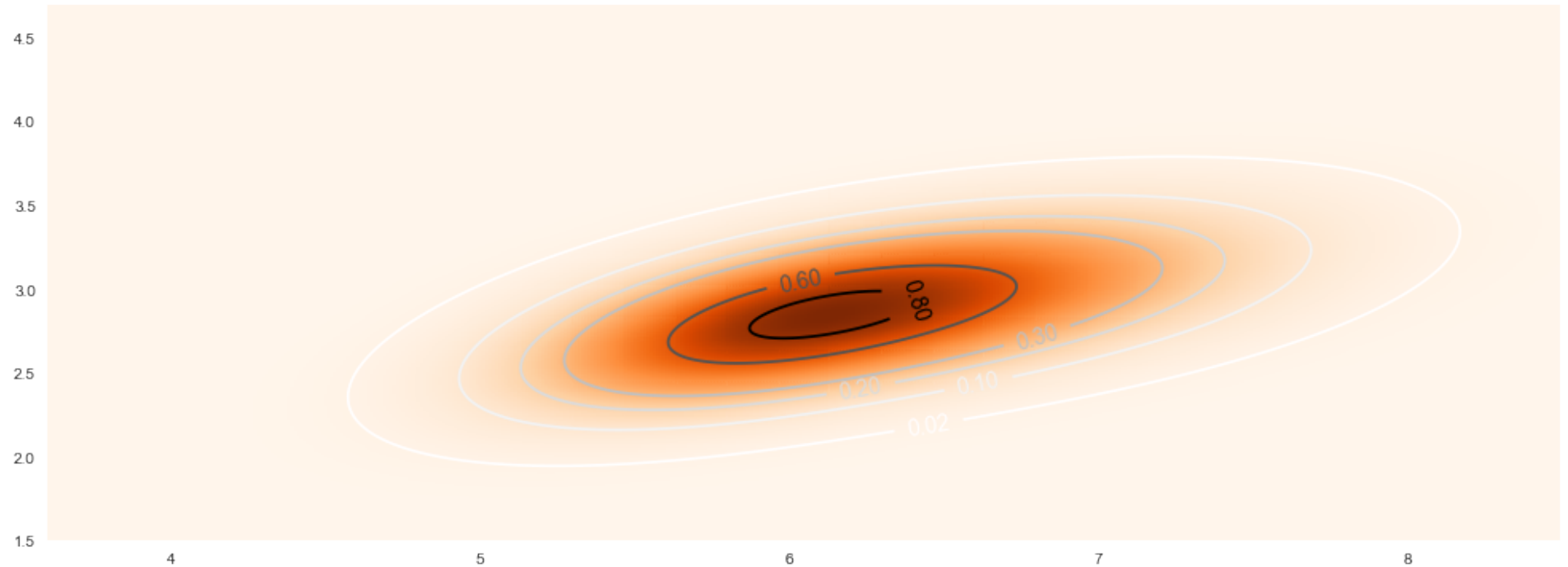
$$E(X|I\{T \neq r\} = 1) = \frac{1}{2}(\mu_p + \mu_q)$$

-- среднее арифметическое матожиданий двух других компонент

Тогда и условная плотность: $p_{X|I\{T \neq k\}}(x|1) = \frac{p_{X|I\{T=k\}}(x|2) + p_{X|I\{T=k\}}(x|3)}{2}$ -- среднее арифметическое плотностей двух других компонент

```
In [78]: grid = np.mgrid[3.6:8.5:1e-2, 1.5:4.7:1e-2]
pos = np.empty(grid[0].shape + (2,))
pos[:, :, 0] = grid[0]; pos[:, :, 1] = grid[1]
density_0 = 1/2 * (gauss_1_two_dim.pdf(pos) + gauss_2_two_dim.pdf(pos))
density_1 = 1/2 * (gauss_0_two_dim.pdf(pos) + gauss_2_two_dim.pdf(pos))
density_2 = 1/2 * (gauss_0_two_dim.pdf(pos) + gauss_1_two_dim.pdf(pos))
```

```
plt.figure(figsize=(17, 21))
boards = ([0.02, 0.1, 0.2, 0.3, 0.6, 0.8],
          [0.02, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8],
          [0.02, 0.1, 0.2, 0.35, 0.55, 0.8])
for i, zip_ in enumerate(zip([density_0, density_1, density_2], boards)):
    density, board = zip_
    plt.subplot(3, 1, i + 1)
    plt.pcolormesh(grid[0], grid[1], density, cmap='Oranges')
    # plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], alpha=0.2)
    CS = plt.contour(grid[0], grid[1], density, board)
    plt.clabel(CS, fontsize=14, inline=1, fmt='%1.2f', cmap='Set3')
plt.show()
```





Классифицируйте все пространство по принципу $k = \arg \max_k p_{X|I\{T=k\}}(x|I)$. Посчитайте долю ошибок на выборке. Нарисуйте классификацию всего пространства в проекции на пары координат (0, 1), (1, 3) и (2, 3), где закрасьте разными цветами области, которые образовались в результате классификации.

```
In [67]: get_argmax_k = lambda x: np.argmax(np.array([gauss_0.pdf(x), gauss_1.pdf(x), gauss_2.pdf(x)]))
```

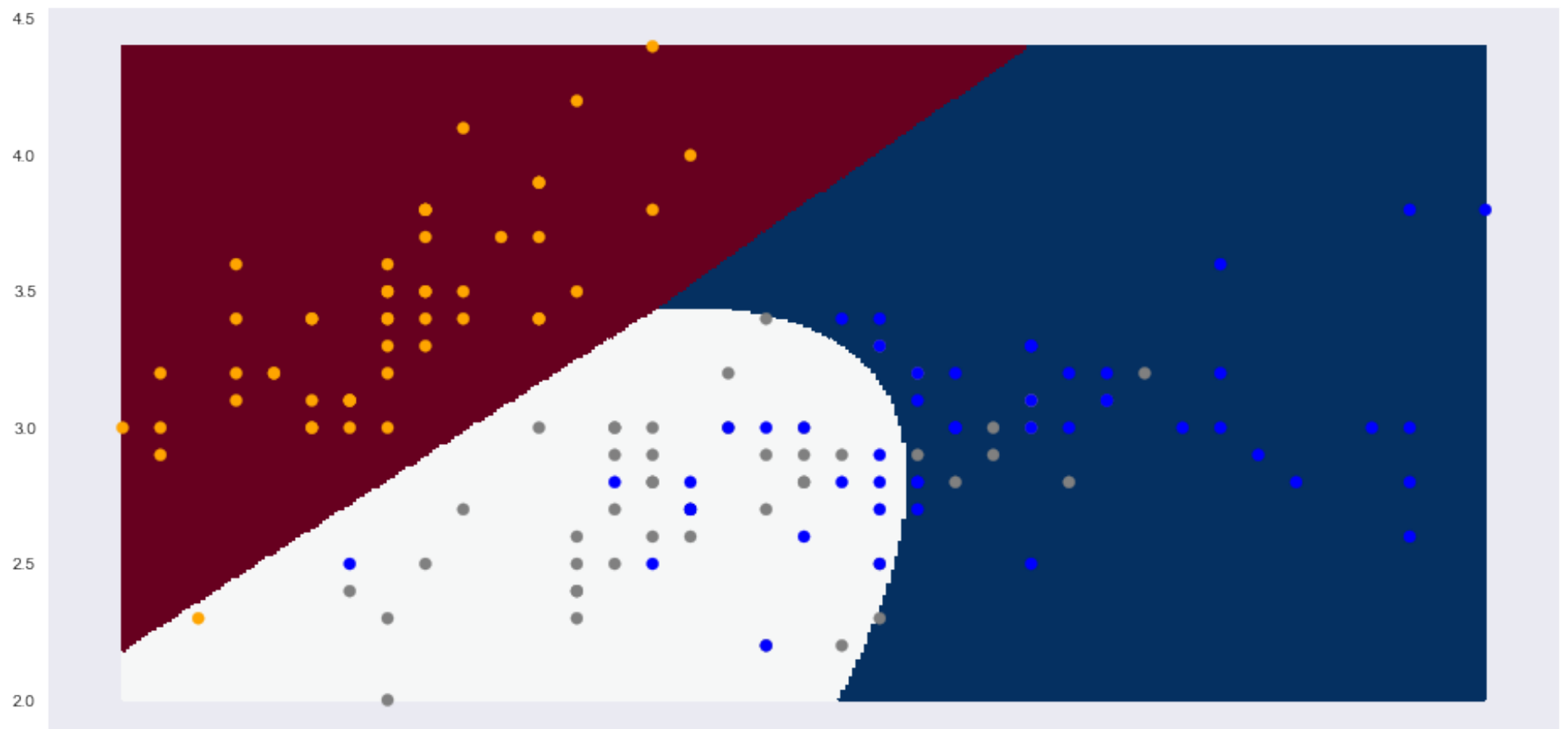
```
In [68]: y_pred = np.array(list(map(lambda x: get_argmax_k(x), X)))
accuracy_score(y_pred, y)
```

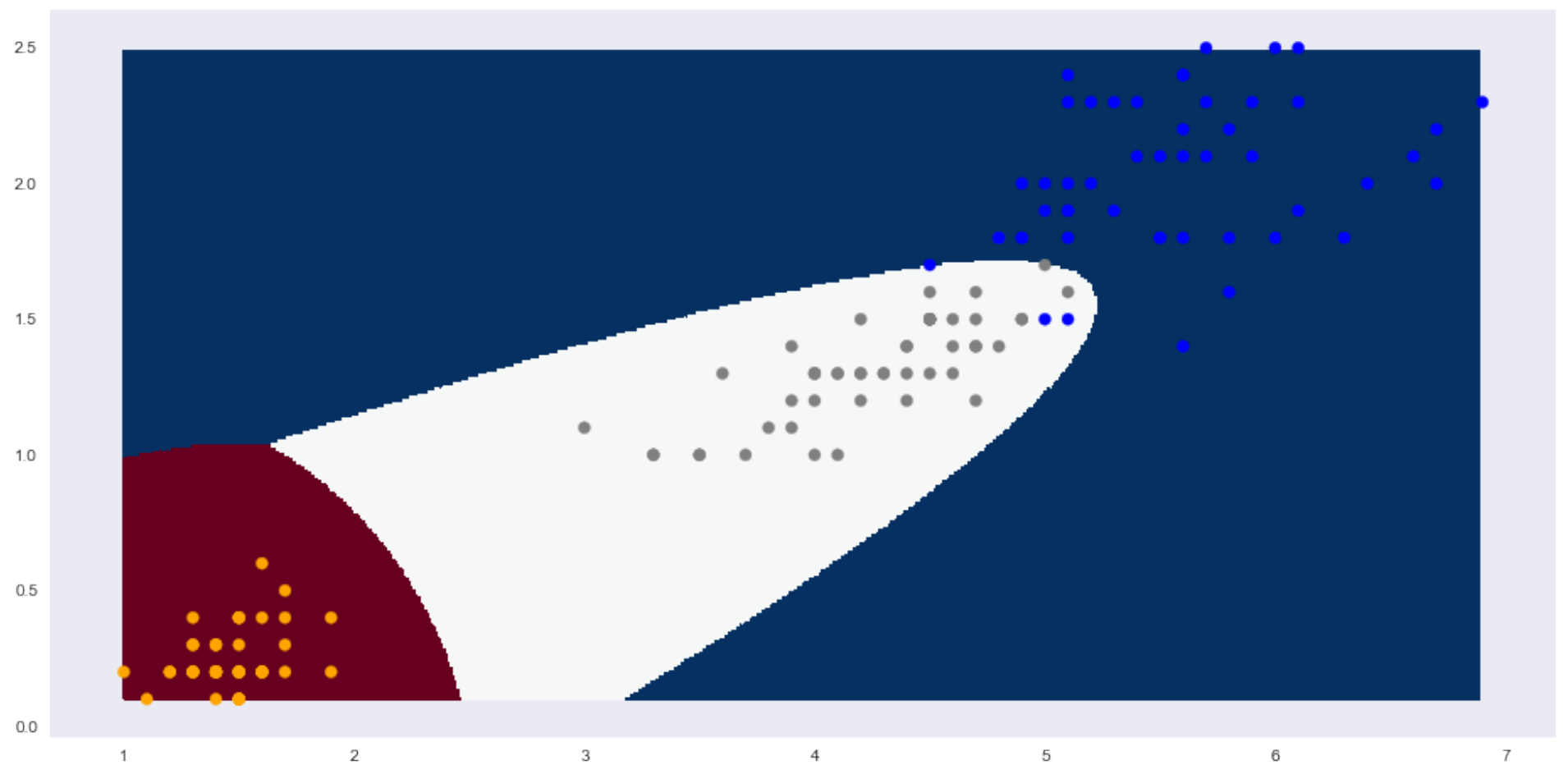
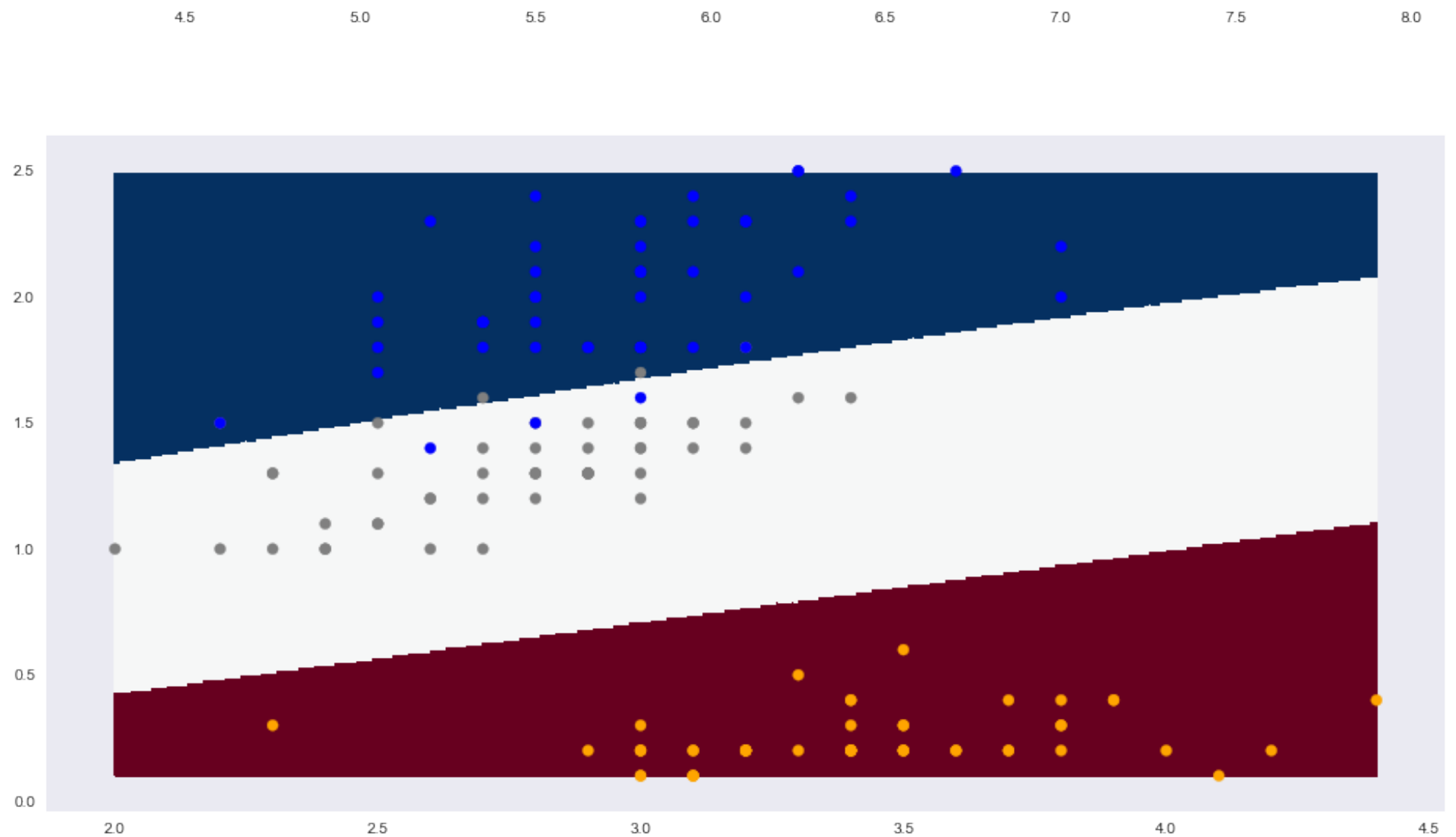
```
Out[68]: 0.97999999999999998
```

```
In [69]: def get_image(grid, densuty_1, densuty_2, densuty_3):
    pos = np.empty(grid[0].shape + (2,))
    pos[:, :, 0] = grid[0]; pos[:, :, 1] = grid[1]
    colors = np.array(list(map(lambda x: np.argmax(x),
                                np.hstack((densuty_1.pdf(pos).reshape(-1, 1),
                                             densuty_2.pdf(pos).reshape(-1, 1),
                                             densuty_3.pdf(pos).reshape(-1, 1))))))
    return colors.reshape(grid[0].shape)
```

```
In [70]: def get_bounds(X_1, X_2):
    return [np.min(X_1), np.max(X_1), np.min(X_2), np.max(X_2)]
```

```
In [71]: plt.figure(figsize=(16, 27))
for i, indexes in enumerate([(0, 1), (1, 3), (2, 3)]):
    x_min, x_max, y_min, y_max = get_bounds(X[:, indexes[0]], X[:, indexes[1]])
    grid = np.mgrid[x_min:x_max:1e-2, y_min:y_max:1e-2]
    colors = get_image(grid, sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_0, cov_0, *indexes)),
                        sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_1, cov_1, *indexes)),
                        sps.multivariate_normal(*get_two_dim_density(mean_2, cov_2, *indexes)))
    plt.subplot(3, 1, i + 1)
    plt.pcolormesh(grid[0], grid[1], colors, cmap='RdBu')
    #plt.imshow(z, extent=get_bounds(X[:, indexes[0]], X[:, indexes[1]]))
    colors_map = ['orange', 'gray', 'blue']
    plt.scatter(X[:, indexes[0]], X[:, indexes[1]],
                color=list(map(lambda y_once: colors_map[y_once], y)))
plt.show()
```





Вывод: Действительно, мы сделали большу работу. Самое главное, мы поняли, что классификация пространства по принципу $k = \arg \max_k p_{X|I\{T=k\}}(x|I)$ -- это очень клевая штука!

Задача 5*. В предыдущей задаче информация о принадлежности наблюдения конкретной компоненте смеси была известна заранее. Как быть в случае, если такой информации нет? Задача оценки параметров распределения смеси может быть решена с помощью итерационного EM-алгоритма.

Опишите, как работает EM-алгоритм (это обязательное условие, при котором эта задача будет проверяться). Затем примените EM-алгоритм к Ирисам Фишера и к некоторым искусственно сгенерированным датасетам. Исследуйте, как результат зависит от параметров алгоритма. Сделайте вывод.

Разобраться в EM-алгоритме помогут:

<https://basegroup.ru/community/articles/em> (<https://basegroup.ru/community/articles/em>)

<http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=%D0%95%D0%9C-%D0%B0%D0%BB%D0%B3%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%82%D0%BC> (<http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=%D0%95%D0%9C-%D0%B0%D0%BB%D0%B3%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%82%D0%BC>)

https://en.wikipedia.org/wiki/Expectation%E2%80%93maximization_algorithm
(https://en.wikipedia.org/wiki/Expectation%E2%80%93maximization_algorithm)

Bishop, C.M. Pattern Recognition and Machine Learning, глава 9.

Реализация EM-алгоритма для смеси гауссовских распределений:

<http://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.mixture.GaussianMixture.html#sklearn.mixture.GaussianMixture> (<http://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.mixture.GaussianMixture.html#sklearn.mixture.GaussianMixture>)

EM-алгоритм -- алгоритм кластеризации данных. В основе этого алгоритма лежит предположение о том, что множество признаков может быть смоделировано смесью k распределений (в частном случае -- смесью многомерных нормальных распределений).

$$p(x) = \sum_{j=1}^k w_j p_j(x), \quad \sum_{j=1}^k w_j = 1, \quad w_j \geq 0,$$

а $p_j(x)$ принадлежит параметрическому семейству $\varphi(x, \theta_j)$.

Нам нужно решить задачу разделения смеси, т.е. имея выборку x^m оценить параметры $\Theta = (w_1, \dots, w_n, \theta_1, \dots, \theta_n)$.

Для смеси нормальных распределений оценивается вектор параметров $\Theta = (w_1, \dots, w_n, \mu_1, \dots, \mu_n, \Sigma_1, \dots, \Sigma_n)$

В алгоритме вводится вспомогательный вектор скрытых переменных G , такой, что:

- 1) Вектор G может быть вычислен, если известны значения вектора параметров
- 2) Поиск максимума правдоподобия сильно упрощается, если известен вектор G

Действительно, максимизировать логарифм функции правдоподобия смеси распределений не очень клево, т.к. мы имеем дело с логарифмом суммы, что является не самым приятным объектом для дифференцирования.

EM-алгоритм состоит из итерационного повторения двух шагов:

- 1) **Е-шаг** (expectation)
- 2) **М-шаг** (maximization)

Рассмотрим их более подробно:

Е - шаг

На Е-шаге вычисляет матожидание (ожидаемое значение) вектора скрытых переменных G по текущему приближению вектора параметров Θ .

$$p(x, \theta_j) = p(x)P(\theta_j|x) = w_j p_j(x) \quad [*]$$

Пусть $g_{ij} := P(\theta_j|x_i)$ -- это вероятность того, что i -ый объект выборки получен из j -ой компоненты смеси. Возьмем эти переменные в качестве скрытых. Зная их и используя формулу $[*]$ мы легко найдем максимум логарифма функции правдоподобия.

$\sum_{j=1}^k g_{ij} = 1$ -- т.к. это полная вероятность принадлежать i -ому объекту выборки некоторой компоненте смеси.

Воспользуемся формулой Байеса:

$$g_{ij} = \frac{w_j p_j(x_i)}{\sum_{s=1}^k w_s p_s(x_i)}$$

А что будет с элементами вектора скрытых переменных, если каждая компонента смеси имеет многомерное нормальное распределение?

Понятно, что нужно в формулу для g_{ij} подставить плотность i -ого многомерного нормального распределения, параметры которого мы оценили на М-шаге (если шаг Е самый первый, то мы инициализируемся с каких-то стартовых оценок -- это зависит от реализации).

М - шаг

На М шаге мы уже знаем оценку для вектора скрытых переменных и теперь достаточно легко уже можем решить задачу максимизации правдоподобия. Таким образом мы найдем новое значение Θ^{n+1} по значениям векторов G и Θ^{n-1}

Максимизируем логрифм функции правдоподобия (выборка размера n)

$$\arg \max_{\Theta} \mathcal{L}(\Theta) = \arg \max_{\Theta} \sum_{i=1}^n \ln p(x_i) = \arg \max_{\Theta} \sum_{i=1}^n \ln \left(\sum_{j=1}^k w_j p_j(x_i) \right)$$

Сумму под логарифмом мы уже можем выразить через g_{ij} , посчитанным на прошлом Е-шаге. Таким образом мы свели задачу к уже простой задаче максимизации логарифма функции правдоподобия. Решая такую оптимизационную задачу с ограничением на сумму весов w_i получаем:

$$w_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_{ij}$$

$$\theta_j = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta)$$

А для многомерного нормального:

$$\mu_j^{new} = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^n g_{ij} x_i, \quad w_j = \frac{N_j}{n}, \quad N_j = \sum_{i=1}^n g_{ij}$$

$$\Sigma_j = \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^n g_{ij} (x_i - \mu_j^{new})^T (x_i - \mu_j^{new})$$

Поочередно делаем Е и М шаг, пока не будет достигнута сходимость (tol)

```
In [72]: est = GaussianMixture(n_components=3, n_init=20, tol=1e-5, max_iter=1000, reg_covar=1.5e-2)
est.fit(X)
y_pred = est.predict(X)
```

Т.к. ЕМ алгоритм выдавал свои метки классов, то вероятно, они могут не совпадать с нашими, поэтому попробуем потестить все перестановки меток и выдать наилучший скор, это и будет скором классификации ЕМ алгоритма

```
In [73]: scores = []
         for permutation in itertools.permutations(range(3), 3):
             y_pred_perm = y_pred.copy()
             y_pred_perm[y_pred == 0] = permutation[0]
             y_pred_perm[y_pred == 1] = permutation[1]
             y_pred_perm[y_pred == 2] = permutation[2]
             scores.append(accuracy_score(y_pred_perm, y))
         max(scores)
```

Out[73]: 0.98666666666666669

А теперь проанализируем как ведет себя нижняя оценка логарифма функции правдоподобия.

```
In [74]: est.lower_bound_
```

Out[74]: -1.3898870151390115

Из документации: EM-алгоритм из `sklearn` проверяет условие сходимости именно для *lowerbound*, а именно параметр `tol`, отвечающий за сходимость сразвнивается со средним `lower_bound`

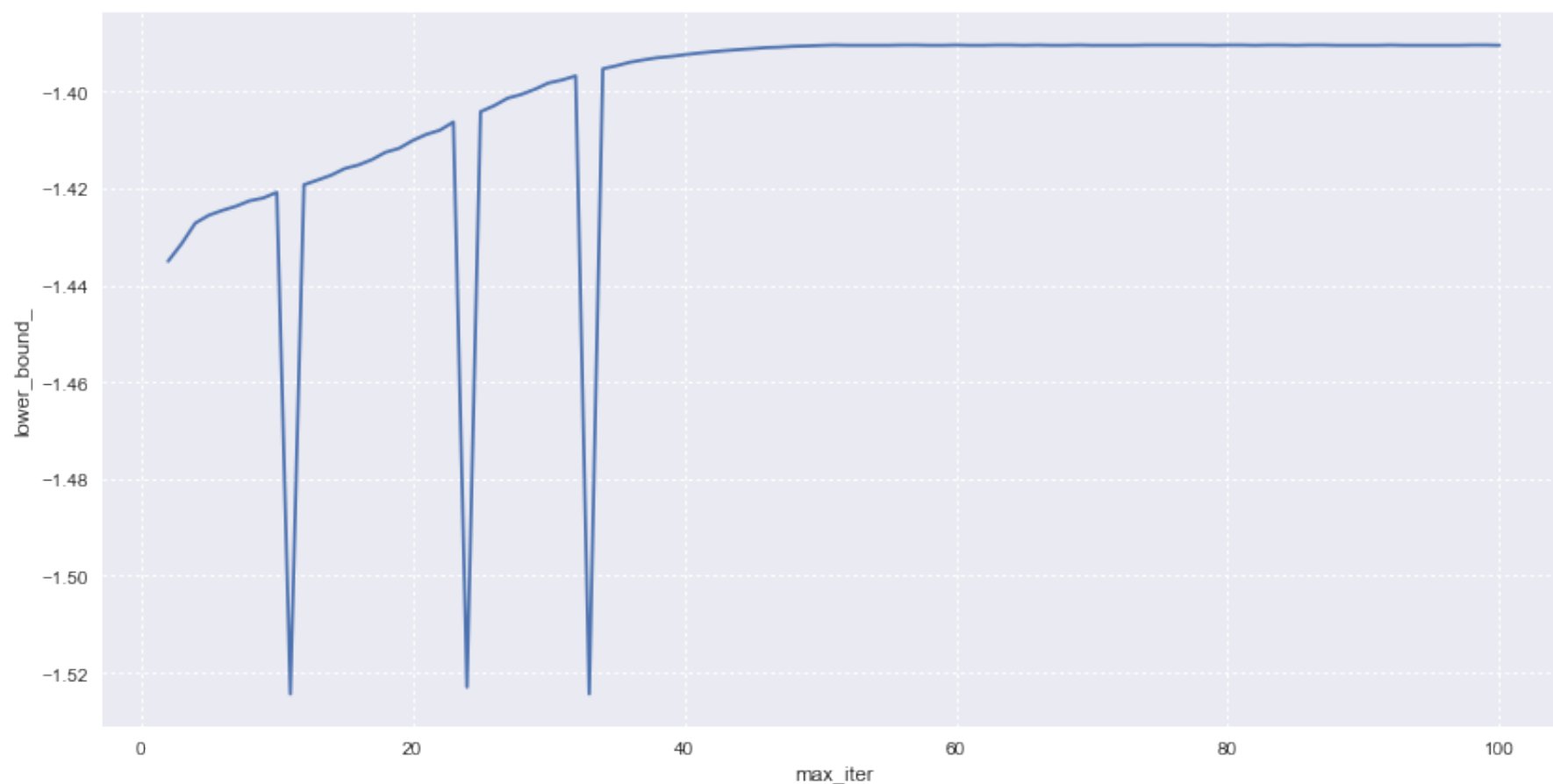
Посмотрим, как `lower_bound_` зависит от количества итераций:

```
In [82]: from tqdm import tqdm
```



```
In [84]: n_iters = np.linspace(2, 100, 100, dtype=int)
lower_bounds = []
for n_iter in tqdm(n_iters):
    est = GaussianMixture(n_components=3, n_init=20,
                          tol=1e-4, max_iter=n_iter, reg_covar=1.5e-2)
    est.fit(X)
    lower_bounds.append(est.lower_bound_)
plt.figure(figsize=(14, 7))
plt.plot(n_iters, lower_bounds)
plt.grid(ls=":")
plt.ylabel("lower_bound_")
plt.xlabel("max_iter")
plt.show()
```

```
0%|          | 0/100 [00:00<?, ?it/s]//anaconda/lib/python3.5/site-packages/sklearn/mixture/base.py:237:
ConvergenceWarning: Initialization 20 did not converged. Try different init parameters, or increase max_it
er, tol or check for degenerate data.
% (init + 1), ConvergenceWarning)
100%|██████████| 100/100 [00:49<00:00, 1.59it/s]
```



Из графиков видно, что для нашего набора данных EM-алгоритм сходится к глобальному минимуму уже при `max_iter=60`

В процессе построения графиков заметил, что при маленьком `n_init` у нас есть провалы в `lower_bound_`. Это означает, что мы сошлись к локальному, а не глобальному минимуму. При `n_init=20` такое встречается нечасто.