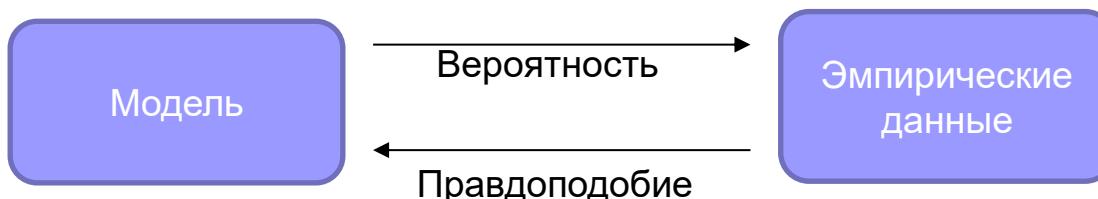


Лекция 10: Восстановление плотности распределения

Основные подходы к восстановлению плотности распределения

- Параметрические методы восстановления плотности:
 - Задача восстановления плотности распределения
 - Восстановление многомерной гауссовской плотности
 - Проблема мультиколлинеарности
- Непараметрическое восстановление плотности:
 - Восстановление одномерных плотностей
 - Восстановление многомерных плотностей
 - Выбор ядра и ширины окна
 - Аппроксимация восстановленной плотности
- Разделение смеси распределений:
 - Задача разделения смеси распределений
 - ЕМ-алгоритм
 - Обобщения и модификации ЕМ-алгоритма

Параметрическое восстановление плотности распределения



- Постановка задачи:
 - Дано: простая (**i.i.d.**) выборка $X^l = \{x_1, \dots, x_l\} \sim p(x)$.
 - Найти параметрическую модель плотности распределения: $p(x) = \varphi(x; \theta)$, где θ – параметр, φ – фиксированная функция.
- Критерий – максимум правдоподобия выборки:
- Необходимое условие оптимума:

$$L(\theta; X^l) = \ln \prod_{i=1}^l \varphi(x_i; \theta) = \sum_{i=1}^l \ln \varphi(x_i; \theta) \rightarrow \max_{\theta}$$

- где функция $\varphi(x; \theta)$ достаточно гладкая по параметру θ .

Простой пример с распределением Бернулли

- Даны выборка размера 8 случайной бинарной переменной, распределенной по закону Бернулли с неизвестным параметром p :

$$\begin{aligned}L(p) &= P(0, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 1|p) \\&= P(0|p)P(1|p)\dots P(1|p) \\&= (1-p)p\dots p \\&= p^4(1-p)^4\end{aligned}$$

- Надо найти p , максимизирующий логарифмическое правдоподобие $l(p) = \log[P(X|B(p))]$:

$$\begin{aligned}\ell(p) &= \log L(p) = 4\log(p) + 4\log(1-p) \\ \frac{d\ell(p)}{dp} &= \frac{4}{p} - \frac{4}{1-p} \equiv 0 \\ \rightarrow p &= \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Восстановление многомерной гауссовой плотности

- Пусть объекты x описываются n признаками и выборка порождена n -мерной гауссовой плотностью:

$$p(x) = N(x; \mu, \Sigma) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu)\right)}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}}$$

$\mu \in \mathbb{R}^n$ – вектор математического ожидания, $\mu = Ex$

$\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ – ковариационная матрица, $\Sigma = E(x - \mu)(x - \mu)^T$

(симметричная, невырожденная, положительно определенная)

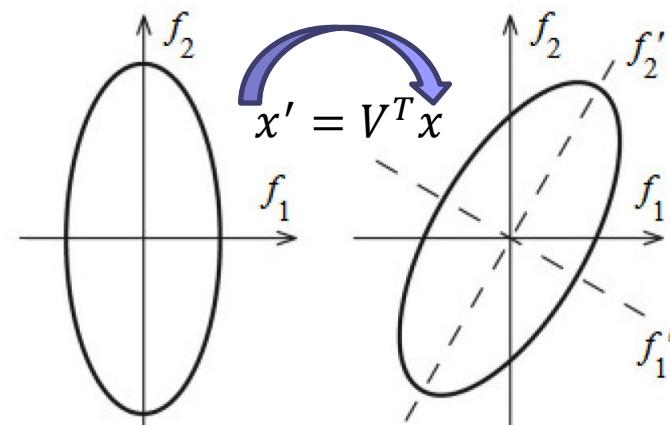
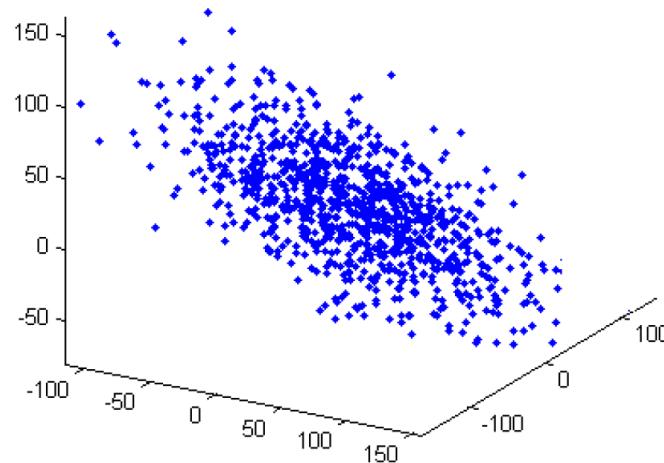
- Выборочные оценки максимального правдоподобия:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \ln L(\mu, \Sigma; X^l) = 0 \Rightarrow \hat{\mu} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l x_i$$

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma} \ln L(\mu, \Sigma; X^l) = 0 \Rightarrow \hat{\Sigma} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (x_i - \hat{\mu})(x_i - \hat{\mu})^T$$

Геометрический смысл многомерной нормальной плотности

- Эллипсоид рассеяния – облако точек эллиптической формы.



- При $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$ оси эллипса параллельны осям.
- В общем случае: $\Sigma = VSV^T$ – спектральное разложение:
 - $V = (v_1, \dots, v_n)$ – ортогональные собственные векторы, $V^T V = I_n$
 - $S = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ – собственные значения матрицы Σ
 - $(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) = (x - \mu)^T V S^{-1} V^T (x - \mu) = (x' - \mu')^T S^{-1} (x' - \mu')$
 - $x' = V^T x$ – ортогональное преобразование поворот / отражение.

Проблема мультиколлинеарности

- Проблема:
 - при $l < n$ матрица $\hat{\Sigma}$ вырождена, но даже при $l \geq n$ она может оказаться плохо обусловленной.
- Регуляризация ковариационной матрицы $\hat{\Sigma} + \tau I_n$
 - увеличивает собственные значения на τ , сохраняя собственные векторы (параметр τ можно подбирать по скользящему контролю).
- Диагонализация ковариационной матрицы
 - оценивание n одномерных плотностей признаков $f_j(x), j = 1, \dots, n$:

$$\hat{p}_j(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}_j} \exp\left(-\frac{(\xi - \hat{\mu}_j)^2}{2\hat{\sigma}_j^2}\right), j = 1, \dots, n$$

- где $\hat{\mu}_j$ и $\hat{\sigma}_j^2$ – оценки среднего и дисперсии признака j :

$$\hat{\mu}_j = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l f_j(x_i), \quad \hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (f_j(x_i) - \hat{\mu}_j)^2$$

Задача непараметрического восстановления плотности

- Задача:
 - по выборке $X^l = \{x_i\}_{i=1}^l$ оценить плотность $\hat{p}(x)$, **без параметрической модели**
- Дискретный случай $x_i \in D, |D| \ll l$.
 - Гистограмма частот: $\hat{p}(x) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l [x_i = x]$
- Одномерный непрерывный случай: $x_i \in \mathbb{R}$.
 - По определению плотности, если $P[a, b]$ – вероятностная мера отрезка $[a, b]$: $p(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{2h} P[x - h, x + h]$
- Эмпирическая оценка плотности по окну ширины h (заменяем вероятность долей объектов выборки):

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{2h} \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l [|x - x_i| < h]$$

Локальная непараметрическая оценка Парзена-Розенблатта

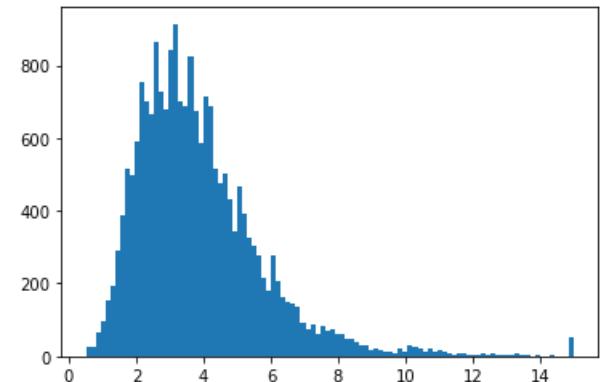
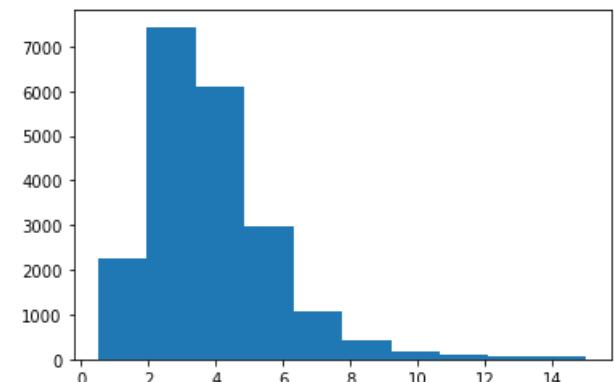
- Эмпирическая оценка плотности по окну ширины h :

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{lh} \sum_{i=1}^l \frac{1}{2} \left[\frac{|x - x_i|}{h} < 1 \right]$$

- Обобщение:
 - оценка Парзена-Розенблатта по окну ширины h :

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{lh} \sum_{i=1}^l K \left(\frac{x - x_i}{h} \right),$$

- $K(r)$ – ядро, удовлетворяющее требованиям:
 - четная функция;
 - нормированная функция: $\int K(r) dr = 1$;
 - невозрастающая при $r > 0$, неотрицательная функция.
 - В частности, при $K(r) = \frac{1}{2} [|r| < 1]$ имеем эмпирическую оценку (см выше)





Обоснование оценки Парзена-Розенблатта (Kernel Density Estimate)

- Теорема (одномерный случай, $x_i \in \mathbb{R}$). Пусть выполнены:
 - X^l – простая выборка из распределения $p(x)$;
 - Ядро $K(z)$ непрерывно и ограничено: $\int K^2(z)dz < \infty$;
 - Последовательность h_l : $\lim_{l \rightarrow \infty} h_l = 0$ и $\lim_{l \rightarrow \infty} lh_l = \infty$
 - Тогда: $\hat{p}_{h_l}(x) \rightarrow p(x)$ при $l \rightarrow \infty$ для почти всех $x \in X$ со скоростью $O(l^{-\frac{2}{5}})$
- Многомерный случай ($x_i \in \mathbb{R}^n$)
 - Если объекты описываются n признаками f_j : $X \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\hat{p}_{h_1, \dots, h_n}(x) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \prod_{j=1}^n \frac{1}{h_j} K\left(\frac{f_j(x) - f_j(x_i)}{h_j}\right)$$

- Если на X задана функция расстояния $\rho(x, x^l)$:
- $$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{lV(h)} \sum_{i=1}^l K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right),$$
 где $V(h) = \int K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right) dx$ – нормировочный множитель

Выбор ядра

- Функционал качества восстановления плотности (MI(ntegrated)SE):

$$J(K) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\hat{p}_h(x) - p(x))^2 dx$$

- Популярные ядра:

- оптимальное (Епанечникова), $J(K^*)/J(K) = 1$, $E(r) = \frac{3}{4}(1 - r^2)[|r| \leq 1]$

- квадратичное, $J(K^*)/J(K) = 0.995$, $Q(r) = \frac{15}{16}(1 - r^2)^2[|r| \leq 1]$

- треугольное, $J(K^*)/J(K) = 0.989$

- $T(r) = (1 - |r|)[|r| \leq 1]$

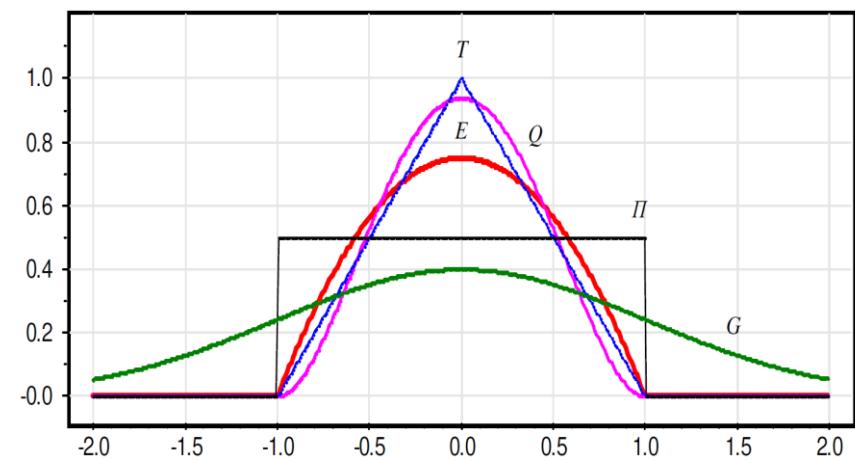
- гауссовское, $J(K^*)/J(K) = 0.961$

- $G(r) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}r^2\right)$

- прямоугольное, $J(K^*)/J(K) = 0.943$

- $\Pi(r) = \frac{1}{2}[|r| \leq 1]$

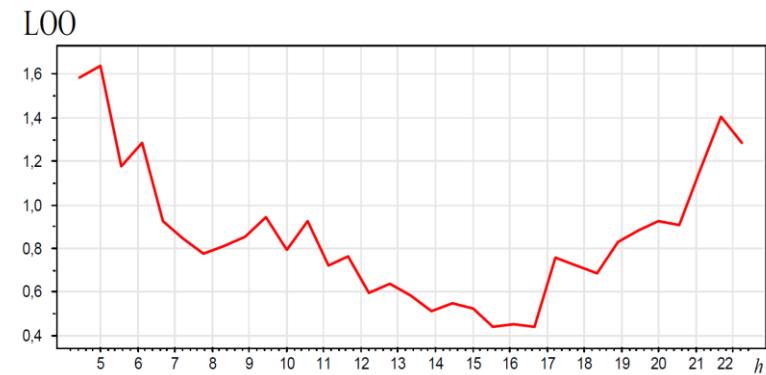
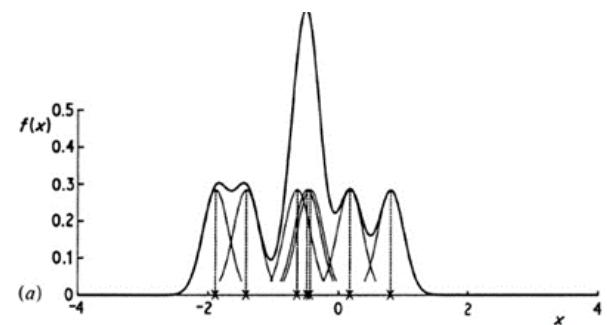
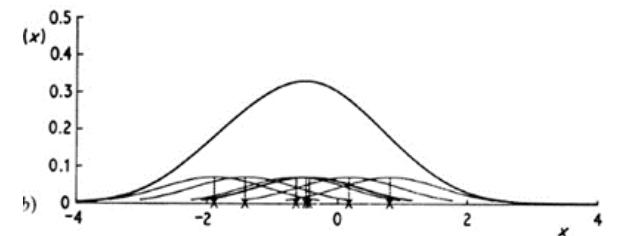
- Асимптотические значения отношения $J(K^*)/J(K)$ при $l \rightarrow \infty$ не зависят от вида распределения $p(x)$



Зависимость оценки плотности от ширины окна

- Оценка $\hat{p}_h(x)$ при различных значениях ширины окна h
- Качество восстановления плотности зависит от ширины окна h , но слабо зависит от вида ядра K
- Можно выбирать ширину ядра через k – число соседей:
$$h_k(x) = \rho(x, x^{k+1})$$
- Выбор ширины ядра (или числа соседей k) через CV или LO:

$$LOO(h) = - \sum_{i=1}^l \ln \hat{p}_h(x_i; X^l \setminus x_i) \rightarrow \min_h$$



Ядерные непараметрические методы анализа данных

- Восстановление плотности. Метод Парзена-Розенблатта:

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{lV(h)} \sum_{i=1}^l K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

- Классификация. Метод парзеновского окна:

$$a_h(x) = \arg \max_{y \in Y} \sum_{i=1}^l [y_i = y] K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

- Регрессия. Метод ядерного сглаживания Надаля-Ватсона:

$$a_h(x) = \frac{\sum_{i=1}^l y_i K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)}{\sum_{i=1}^l K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)}$$

- Чем они плохи?

- Нужно хранить всю выборку! Много места и долго считать 😞**
- Вариант «разреженного» решения – аппроксимация плотности $\hat{p}_h(x)$, полученной через метод Парзена-Розенблатта, с помощью сплайнов или SVM регрессии

Пример - оценки и аппроксимация плотности распределения

```
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.neighbors import KernelDensity
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.svm import SVR

n_samples = 1000
X_one, y_one = make_blobs(n_samples=n_samples,
                           centers=5, cluster_std=2,
                           random_state=42)

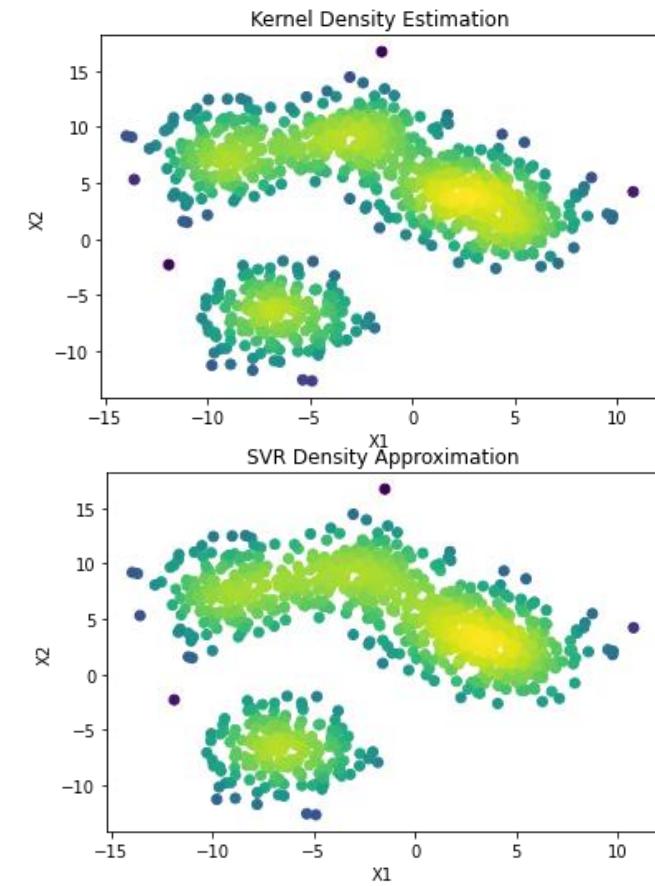
kde = KernelDensity(kernel='gaussian', bandwidth=1).fit(X_one)
kde_scr=kde.score_samples(X_one)

plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=kde_scr)
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('Kernel Density Estimation')
plt.show()

svr = SVR(C=10, kernel="rbf", epsilon=0.1).fit(X_one, kde_scr)
svr_scr = svr.predict(X_one)

plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=svr_scr)
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('SVR Density Approximation')
plt.show()

dev=mean_squared_error(svr_scr,kde_scr)
print(f"1000 points KDE vs {int(svr.n_support_)} points SVR")
print(f"Approximation error={dev}")
```



1000 points KDE vs 372 points SVR
Approximation error=0.015639321720188372

Задача разделения смеси распределений

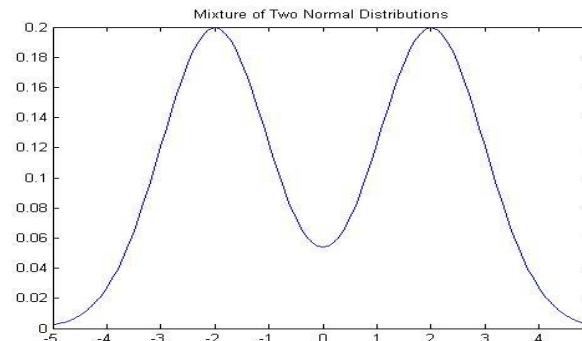
■ Порождающая модель смеси распределений:

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

- k – число компонент смеси;
- $\varphi(x, \theta_j) = p(x|j)$ – функция правдоподобия j -ой компоненты;
- $w_j = P(j)$ – априорная вероятность j -ой компоненты.

■ Задачи:

- Основная: при фиксированном k , имея простую выборку $X^l = \{x_1, \dots, x_l\} \sim p(x)$, оценить вектор параметров $(w, \theta) = (w_1, \dots, w_k, \theta_1, \dots, \theta_k)$.
- Дополнительно: найти k .



Максимизация правдоподобия и ЕМ-алгоритм

■ Задача максимизации логарифма правдоподобия

$$L(w, \theta) = \ln \prod_{i=1}^l p(x_i) = \sum_{i=1}^l \ln \left[\sum_{j=1}^k w_j \varphi(x_i, \theta_j) \right] \rightarrow \max_{w, \theta}$$

- при ограничениях $\sum_{j=1}^k w_j = 1; w_j \geq 0$
- вводим **скрытые переменные** $g_{ij} = P(j|x_i)$, их семантика – распределение ненаблюдаемых «меток» компонент (кластеров) для каждого наблюдения, позволяет максимизировать «взвешенное» правдоподобие **отдельно по каждой компоненте**

■ Итерационный алгоритм Expectation-Maximization:

- Начальное приближение параметров (w, θ) ;
- Е-шаг** $(w, \theta) \rightarrow G = (g_{ij})$: оценка скрытых переменных
- М-шаг** $(w, \theta, G) \rightarrow (w, \theta)$: максимизация взвешенного правдоподобия отдельно по компонентам (w, θ)
- Пока w, θ и G не стабилизируются.

ЕМ-алгоритм

- Теорема (необходимые условия экстремума):

- точка $(w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ локального экстремума логарифмического правдоподобия $L(w, \theta)$ удовлетворяет системе уравнений относительно w_j, θ_j, g_{ij} :
 - Е-шаг: $g_{ij} = \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i, \theta_s)}, i = 1, \dots, l, j = 1, \dots, k;$
 - М-шаг: $\theta_j = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^l g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta), j = 1, \dots, k;$
 - $w_j = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij}, j = 1, \dots, k.$

- Вероятностная интерпретация:

- **Е-шаг** – формула Байеса: $g_{ij} = P(j|x_i) = \frac{P(j)p(x_i|j)}{p(x_i)} = \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} = \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i, \theta_s)}$,
при условии нормировки $\sum_{j=1}^k g_{ij} = 1$
 - **М-шаг** – это максимизация **взвешенного** правдоподобия, с весами объектов g_{ij} для j -ой компоненты смеси:

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

Доказательство (через условия ККТ)

- Лагранжиан оптимизационной задачи $\mathcal{L}(w, \theta) \rightarrow \max$:

$$\mathcal{L}(w, \theta) = \sum_{i=1}^l \ln \left(\underbrace{\sum_{j=1}^k w_j \varphi(x_i, \theta_j)}_{p(x_i)} \right) - \lambda \left(\sum_{j=1}^k w_j - 1 \right)$$

- Приравниваем нулю производные:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_j} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^l \frac{\varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} = \lambda \Rightarrow \sum_{i=1}^l \underbrace{\frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)}}_{g_{ij}} = \lambda w_j;$$

суммируем по $j \Rightarrow \lambda = l \Rightarrow w_j = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij}$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_j} = \sum_{i=1}^l \underbrace{\frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)}}_{g_{ij}} \frac{\frac{\partial \varphi(x_i, \theta_j)}{\partial \theta_j}}{\varphi(x_i, \theta_j)} = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \sum_{i=1}^l g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta_j) = 0$$

ЕМ-алгоритм для разделения смеси распределений

- Вход: $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}$, k ;
- Выход: $(w_j, \theta_j)_{j=1}^k$ – параметры смеси распределений;
- Инициализировать $(\theta_j)_{j=1}^k$, $w_j := \frac{1}{k}$
- Повторять
 - Е-шаг (expectation): для всех $i = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, k$
$$g_{ij} := \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i, \theta_s)}$$
 - М-шаг (maximization): для всех $j = 1, \dots, k$
$$w_j := \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij}, \theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^l g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta)$$
- Пока w_j, θ_j и / или g_{ij} не сошлись.

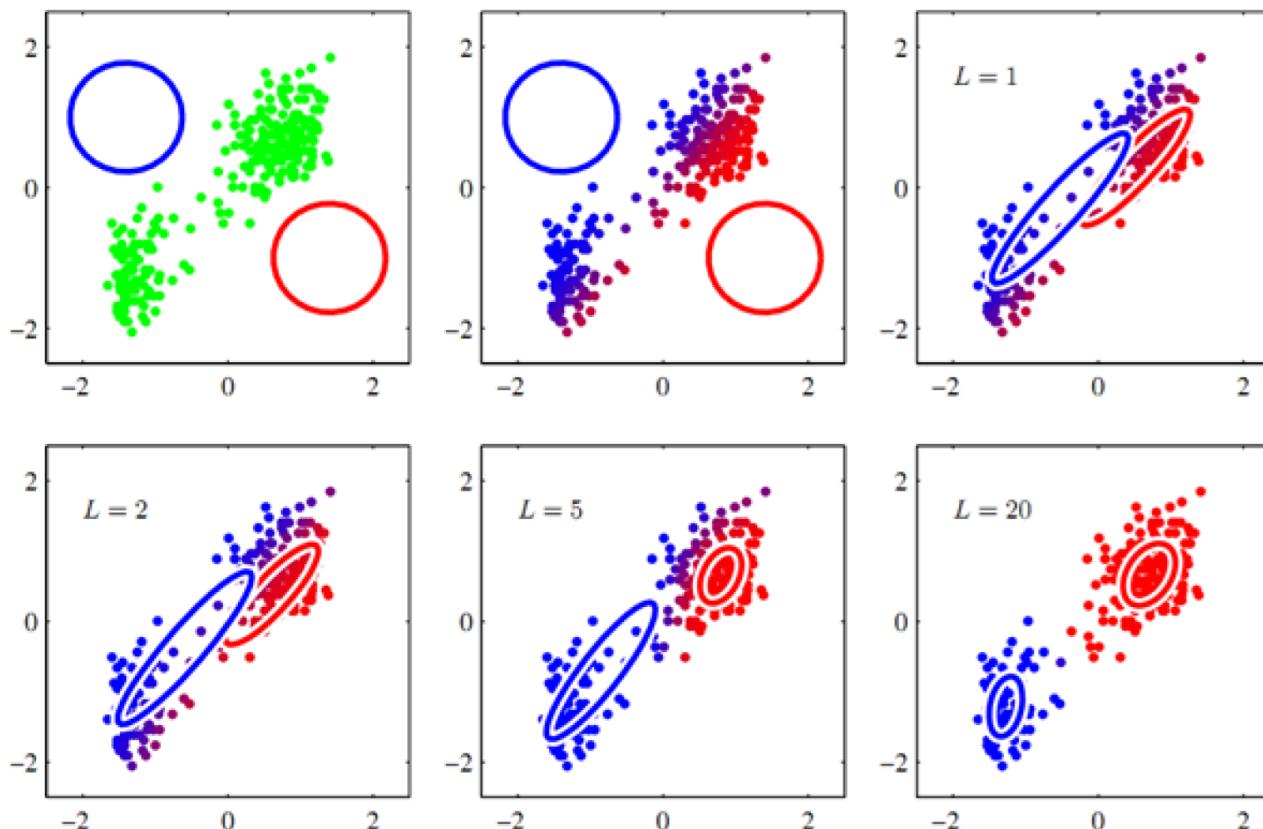
Gaussian Mixture Model (GMM)

- Вход: $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}, k$;
- Выход: $(w_j, \mu_j, \Sigma_j)_{j=1}^k$ – параметры смеси гауссиан;
- Инициализировать $(\mu_j, \Sigma_j)_{j=1}^k, w_j := \frac{1}{k}$
- Повторять
 - Е-шаг (expectation): для всех $i = 1, \dots, l, j = 1, \dots, k$
$$g_{ij} := \frac{w_j N(x_i; \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_{s=1}^k w_s N(x_i; \mu_s, \Sigma_s)}$$
 - М-шаг (maximization): для всех $j = 1, \dots, k$
$$w_j := \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij},$$

$$\mu_j := \frac{1}{lw_j} \sum_{i=1}^l g_{ij} x_i, \Sigma_j := \frac{1}{lw_j} \sum_{i=1}^l g_{ij} (x_i - \mu_j)(x_i - \mu_j)^T$$
- Пока (w_j, μ_j, Σ_j) и / или g_{ij} не сошлись.

Демо-пример

- Две гауссовские компоненты $k = 2$ в пространстве $X = \mathbb{R}^2$.
- Расположение компонент в зависимости от номера итерации L



Пример – параметрическая и непараметрическая оценки плотности распределения

```
from sklearn.mixture import GaussianMixture
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.neighbors import KernelDensity
from sklearn.metrics import mean_squared_error

n_samples = 1000
X_one, y_one = make_blobs(n_samples=n_samples,
                           centers=5, cluster_std=2,
                           random_state=42)

kde = KernelDensity(kernel='gaussian', bandwidth=1).fit(X_one)
kde_scr=kde.score_samples(X_one)

plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=kde_scr)
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('Kernel Density Estimation')
plt.show()

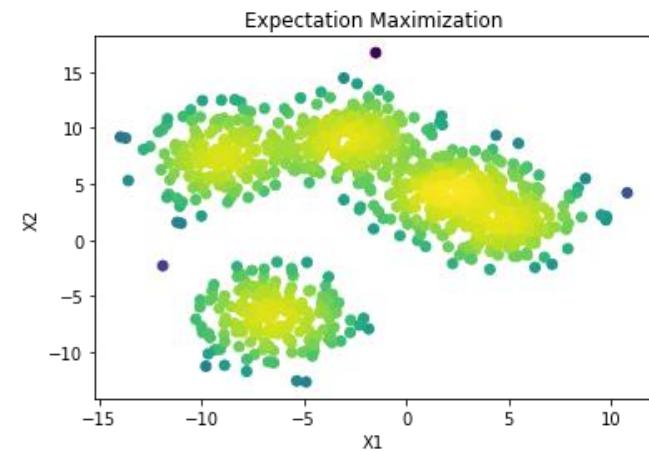
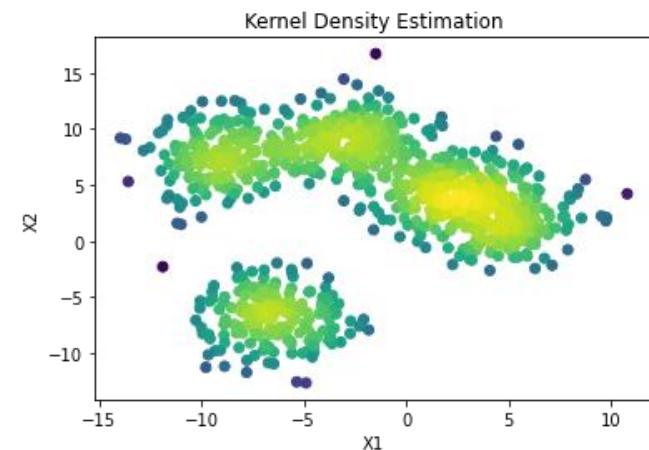
gmm_0 = GaussianMixture(n_components=5)
gmm_0.fit(X_one)

E=gmm_0.score_samples(X_one)

plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=E)
plt.title('Expectation Maximization')
plt.show()

dev=mean_squared_error(E,kde_scr)

print(f"1000 points KDE vs 35 parameters in EM ")
print(f"Approximation error={dev}")
```



1000 points KDE vs 35 parameters in EM
Approximation error=0.08319576408750858

ЕМ-алгоритм с оценкой числа компонент

- Проблемы базового ЕМ-алгоритма:
 - Как выбирать начальное приближение? На основе «грубых приближений», например, k-means кластеризации
 - Как ускорить сходимость? (будет дальше)
 - Как определять число компонент?
- Эвристики добавления и удаления компонент в ЕМ-алгоритме:
 - Если слишком много объектов x_i имеют слишком низкие правдоподобия $p(x_i)$, то создаем новую $k + 1$ – ю компоненту и по этим объектам строим ее начальное приближение.
 - Если у j -ой компоненты слишком низкий w_j , удаляем ее.
 - Регуляризация (сделать максимальную «определенность» неравномерность w_j) $L(w, \theta) - \tau \sum_{j=1}^k \ln w_j \rightarrow \max$, $w_j \propto \left(\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij} - \tau \right)_+$
 - Комбинация грубого приближения простым алгоритмом кластеризации (например, иерархическим) с выбором числа компонент как числа кластеров на основе статистических оценок качества кластеризации типа псевдо-Фишер, псевдо- t^2 , CCC и другие – будут в кластеризации

«Ускоряющие» модификации EM-алгоритма

- Обобщенный EM (GEM):
 - не нужно добиваться точного решения задачи M-шага достаточно сместиться в направлении максимума, сделав одну или **несколько итераций**, затем выполнить E-шаг.
- Стохастический EM (SEM):
 - Идея: на M-шаге вместо взвешенного **максимизируется обычное правдоподобие**:

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

- выборки X_j строятся путем **сэмплирования** объектов из X^l l раз с **возвращениями**: $i \sim P(i|j) = \frac{P(j|x_i)P(i)}{P(j)} = \frac{g_{ij}}{lw_j}$
- Преимущества:
 - Ускорение сходимости, предотвращение зацикливаний, при сохранении свойств слабой локальной сходимости (в смысле увеличения правдоподобия на каждом шаге)

Выводы по оценке плотности распределения

- Параметрическое оценивание плотности:
 - Модель плотности + максимизация правдоподобия: $\hat{p}(x) = \varphi(x, \theta)$, но нужно угадать распределение и редко реальные многомерные данные можно описать одним распределением
- Непараметрическое оценивание плотности:
 - Наиболее прост, приводит к методу Парзеновского окна, но вычислительно сложен на этапе применения, требует хранить всю выборку (можно аппроксимировать), нужно выбирать перебором параметры ядра (иногда и само ядро):
$$\hat{p}(x) = \sum_{i=1}^l \frac{1}{lV(h)} K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$
- Смеси распределений:
 - Наиболее общий случай, приводит к ЕМ-алгоритму, но нужно угадать распределение(я) и число компонент:

$$\hat{p}(x) = \sum_{j=1}^k w_j \varphi(x, \theta_j), k \ll l$$