Метод максимального правдоподобия

В этой главе мы вспомним метод максимального правдоподобия и на примере нескольких задач попробуем ещё сильнее раскрыть его потенциал.

1.1 Общая схема

Метод максимального правдоподобия (сокращённо ММП или MLE, maximum likelihood estimation) возникает как естественный инструмент для решения следующей задачи.

$$\frac{\Delta_{AHHGE}}{\chi_{1,...,\chi_{n}}} \xrightarrow{?} P_{\Theta}(\chi_{1,...,\chi_{n}})$$

Пусть у нас имеются некоторые данные, представленные как случайные величины $X_1,...,X_n$ с каким-то совместным распределением. Мы как исследователи делаем предположение, что это распределение задаётся некоторым набором параметров $\theta \in \mathbb{R}^m$, а далее пытаемся понять, какие параметры лучше всего соответствуют данным. Идея метода максимального правдоподобия интуитивно понятна: нужно выбрать такие параметры $\hat{\theta} \in \mathbb{R}^m$, что данные в такой модели наиболее вероятны. Если $X_1,...,X_n$ дискретны (например, категориальные признаки), то наиболее вероятно значит буквально, что данные имеют наивысшую совместную вероятность; если же они непрерывны, то нужно максимизировать совместную плотность.

На самом деле в виде данных нам доступна реализация выборки $x_1, ..., x_n$, на основе которой можем выписать достаточно короткий алгоритм (запишем для дискретной выборки, в непрерывном случае вероятность просто заменится на плотность).

1. Записать совместную функцию вероятности \mathbb{P}_{θ}

$$L(\theta) = \mathbb{P}_{\theta}(X_1 = x_1, ..., X_n = x_n),$$

где зависимость модели от параметра обозначена нижним индексом;

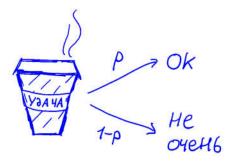
2. Найти параметр $\hat{\theta}$, делающий выборку наиболее вероятной:

$$\hat{\theta} := \arg\max_{\theta} L(\theta).$$

Функция L также часто называется npaedonodofuem(L - Likelihood).

1.2 Как вычислять оценки ММП

Пример 1.1. (Оцениваем качество кофе) Алексей часто посещает кофейню рядом со своим офисом. Кофе там, правда, от случая к случаю разный и бывало, что ему совсем не нравилось, а бывало, что вполне хорошо. Между днями он не может сравнить два хороших или два плохих кофе, поэтому он точно может сказать только одно: плохой был кофе в конкретный день или хороший. На основе своих посещений Алексей составил список дней, где подписал, когда и какой кофе ему попадался и предложил следующую вероятностную модель: каждый день независим от остальных и с одинаковой вероятностью р кофе является хорошим, а с вероятностью 1-p – плохим (Алексей надеется, что сама кофейня за это время не поменялась). Как на основе наблюдений оценить p?



Мы имеем дело с выборкой независимых и одинаково распределённых случайных величин $X_1,..,X_n \sim^{iid} Ber(p)$. При известной реализации $x_1,..,x_n$ вероятность данных в силу независимости записывается как

$$L(p) = \mathbb{P}(X_1 = x_1, ..., X_n = x_n) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(X_i = x_i) = p^g (1 - p)^b,$$

zде g – количество хороших дней, а b – nлохих. Здесь полезно рассмотреть лог-nравдоподобие

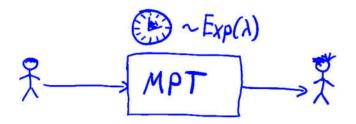
$$l(p) = \ln L(p)$$

и, промаксимизировав его, посчитать оценку

$$\hat{p} := \frac{g}{n}.$$

Пример 1.2. В медицинской информатике давно замечено, что времена обслуживания клиентов в кабинетах обследований имеют распределения с тяжёлыми хвостами. Самой первой идеей было предположить, что время обслуживания имеет экспоненциальное распределение с параметром $\lambda > 0$, обозначаемое как $Exp(\lambda)$ и имеющее плотность

$$f_{\lambda}(t) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda t}, t \ge 0, \\ 0, t < 0. \end{cases}$$



Если есть логи посещений клиентов, то можно посчитать время обслуживания T_i каждого клиента. В предположении независимости клиентов получим, что $T_1,..,T_n$ независимая выборка из распределения $Exp(\lambda)$. В этом случае при данных $t_1,..,t_n$

$$L(\lambda) = \prod_{i=1}^{n} \lambda e^{-\lambda t_i}$$

и решение даётся как

$$\hat{\lambda} = \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} t_i}.$$

1.3 Свойства ММП

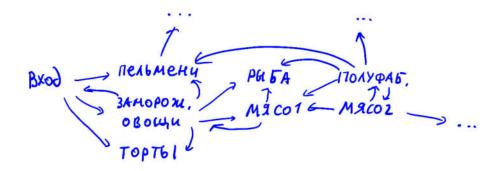
Из курса матстатистики нам известно, что при большом количестве условий регулярности, которые, тем не менее, не сильно ограничивающие, оценка ММП $\hat{\theta}_n$ связана с истинным параметром θ_0 и как минимум в случае выборки $X_1,...,X_n$ независимых величин обладают очень полезными для практики свойствами:

- 1. Асимптотическая несмещённость: $\mathbb{E}\left[\theta_{n}\right] \to \theta_{0}$ при $n \to \infty$;
- 2. Состоятельность: $\theta_n \to^{\mathbb{P}} \theta_0$ при $n \to \infty$;
- 3. Асимптотическая нормальность: $\sqrt{n}(\hat{\theta}_n \theta_0) \to^d \mathcal{N}(0, 1/i(\theta_0))$ при $n \to \infty$, где $i(\theta_0)$ информация Фишера для одного наблюдения в модели с параметром θ_0 .

Однако есть отдельные случаи, когда свойства ММП не выполняются из-за нарушений условий регулярности и о них следует помнить.

Пример 1.3. Проверьте свойства для ММП-оценки параметра а в модели $X_1,..,X_n \sim \mathcal{U}(0,a)$.

1.4 Модель клиента магазина



Клиент каким-то образом перемещается по магазину. Через приложение или систему наблюдения можно составить его траектории, которые бы выглдяели как-то так:

 $6a\kappa$ — означает бакалею, $mo\kappa$ — шшоколад, κac — кассу, 6ux — выход. Для схемы размещения отделов и анализа того, как клиенты переходят между ними можно предложить следующую модель клиента:

- 1. Клиент стартует на входе и все клиенты перемещаются независимо от других;
- 2. В каждый дискретный момент времени, находясь в отделе i, он делает выбор пойти в отдел j с вероятностью p_{ij} ;
- 3. Предполагаем условие нормировки $\forall i \sum_{j} p_{ij} = 1.$
- 4. Нет зависимости от истории:

$$\mathbb{P}\left(X_{t+1} = x_{t+1} \mid X_t = t, X_{t-1} = x_{t-1}, ..., X_{t-k} = x_{t-k}\right) = \mathbb{P}\left(X_{t+1} = x_{t+1} \mid X_t = t\right).$$

То, что мы описали, называется uenbo Mapkoba, а последнее свойство — Mapkobckum ceoù-cmeom.

В нашей модели параметрами являются вероятности переходов $P=(p_{ij}), i,j=1,..m$. Величины X_t^k для клиента номер k являются зависимыми по t, поэтому функцию правдоподобия $L(\theta)$ не получится выписать так просто, как в примерах выше...

К счастью, есть Марковское свойство, которое мы можем переформулировать так: положения клиента зависимы, но $nepexodu\ (X_t \to X_{t+1})$ независимы и ещё мы знаем, что вероятности переходов

$$\mathbb{P}\left(X_{t+1} = j | X_t = i\right) = p_{ij}.$$

Рассмотрим для начала всего одного клиента с траекторией τ , которая имеет длину n. Если бы в данных был только он, то функция лог-правдоподобия записалась бы как

$$l(P) = \sum_{j=1}^{n-1} \ln p_{x_j, x_{j+1}} = \sum_{i,j=1}^{m} n_{ij} \ln p_{ij},$$

где n_{ij} – количество переходов из i в j, наблюдаемое в данных. Мы полагали клиентов независимыми, поэтому когда мы рассмотрим полный датасет логов, то заметим, что концептуально результат не меняется и

$$l(P) = \sum_{i,j=1}^{m} n_{ij} \ln p_{ij}$$

после суммирования по всем клиентам. Нам теперь нужно только вычислить

$$\hat{P} = \operatorname*{arg\,max}_{P=(p_{ij})} l(P).$$

Однако остаётся одна небольшая техническая тонкость: все производные l(P) по параметрам нигде не обращаются в ноль. Это связано с тем, что в задаче мы пока не учли условие нормировки. Можем положить

$$p_{im} = 1 - \sum_{j=1}^{m-1} p_{ij}$$

и дальше остаётся вычислить оптимум.

Итоговый ответ поразительно интуитивно понятный:

$$\hat{p}_{ij} = \frac{n_{ij}}{\sum_{k} n_{ik}}.$$

В этом есть некоторая модельная сила ММП. Используя свойства оценки, мы можем даже проверять различные гипотезы с помощью тестов правдоподобия.

1.5 Модель авторегрессии

Модель авторегрессии AR(p) — это один из базовых инструментов в анализе временных рядов. Мы наблюдаем реализацию части последовательности $X_t, X_{t+1}, ..., X_{t+k}$ зависимых случайных величин в дискретном времени, которая формально бесконечная в обе стороны. Ставя перед собой задачу оценки параметров, про подобные модели мы можем, к примеру, спрашивать

- 1. Какие значения будут достигаться в будущем? (задача прогноза)
- 2. Как связаны элементы последовательности между собой и во времени? (задача моделирования)

Модель авторегрессии порядка 1, или AR(1) задаётся как

$$X_0 = x_0 \in \mathbb{R}, \quad X_{t+1} = \alpha X_t + \varepsilon_t,$$

где (ε_t) — последовательность независимых и одинаково распределённых случайных величин, каждая из которых имеет распределение $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Такую последовательность также называют стандартным гауссовским белым шумом. Модель AR(p) отличается только количеством переменных в истории:

$$X_0 = x_0, ..., X_{p-1} = x_{p-1}, \quad X_t = \sum_{i=1}^m \alpha_i X_{t-i} + \varepsilon_t.$$

Параметры в этой модели можно оценивать с помощью метода максимального правдоподобия, который в силу гауссовости с точностью до констант совпадает с методом наименьших квадратов. Рассмотрим для простоты случай p=1, чтобы понять, как можно построить метод оценки.

Как и выше, наша главная цель – разбить зависимости в данных; напомним, что мы наблюдаем $X_0, ..., X_n$, что не является выборкой независимых одинаково распределённых случайных величин. Но мы знаем, что $\varepsilon_1, ..., \varepsilon_n$ является, причём каждая из этих величин распределена по $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Мы даже можем вычислить шум, если бы мы знали α :

$$\varepsilon_t = X_t - \alpha X_{t-1}.$$

Незнание α нисколько не мешает записать функцию лог-правдоподобия, которая при данных $x_0, ..., x_n$ будет выглядеть как

$$l(\alpha) = -\frac{n}{2}\ln(2\pi) - \frac{n}{2}\ln(\sigma^2) - \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \alpha x_{i-1})^2}{2\sigma^2},$$

уже знакомая нам по оценке параметров гауссовского распределения. Остаётся прооптимизировать по параметрам α, σ^2 и получить

$$\hat{\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{i-1} x_i}{\sum_{i=1}^{n} x_{i-1}^2}, \ \hat{\sigma^2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \hat{\alpha} x_{i-1})^2.$$