Ресемплинг

Моделирование Монте-Карло. Бутстреп. Доверительные интервалы. Коррекция множественных сравнений. Бэггинг в машинном обучении.

ПМИ ФКН ВШЭ, 15 сентября 2018 г.

Денис Деркач[1], Алексей Артёмов[1,2],

(Ряд слайдов заимствован у Максима Шараева (Сколтех))

[1]ФКН ВШЭ [2]Сколтех

Содержание лекции

- Непараметрический бутстреп
- Параметрический бутстреп
- Оценка доверительных интервалов на основе бутстрепа
- Оценка дисперсии и смещения на основе бутстрепа
- Множественная проверка гипотез
- Ресемплинг в машинном обучении
- Примеры

Непараметрический бутстреп

Стандартная постановка задачи

- Модель:
  - Имеем конечную простую выборку $\{X_i\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}$, порожденную распределением вероятности F.
  - Задана некоторая статистика $T_n = T_n(X_1, \ldots, X_n)$.
- **Задача:** оценить дисперсию $\mathrm{V}_F(T_n)$, которая зависит от неизвестного распределения F.

Пример

Пусть $T_n = \overline{X}_n$.
Тогда $\mathrm{V}_F(T_n) = \sigma^2/n$, где $\sigma^2 = \int (x-\mu)^2 dF(x)$ и $\mu = \int x dF(x)$.
Таким образом, дисперсия T_n есть функция F.

Идея бутстрепа

Шаг 1. Оценить $\mathrm{V}_F(T_n)$ с помощью $\mathrm{V}_{\widehat{F}_n}(T_n)$.

Шаг 2. Приблизить $\mathrm{V}_{\widehat{F}_n}(T_n)$ при помощи моделирования.

Пример

- Для $T_n = \overline{X}_n$, $\mathrm{V}_{\widehat{F}_n}(T_n) = \widehat{\sigma}^2/n$, где $\widehat{\sigma}^2 = n^{-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X}_n)^2$.
- В данном случае шага 1 достаточно.
- Однако зачастую не удаётся выписать явно $\mathrm{V}_{\widehat{F}_n}(T_n)$. В таком случае прибегают к шагу 2.

Бутстрепная оценка дисперсии

Оценка дисперсии на основе бутстрепа

Предположим, что $Y_1, \ldots, Y_B$ — реализации i. i. d.случайных величин с функцией распределения G. Согласно закону больших чисел,

$$\overline{Y}_B = \frac{1}{B} \sum_{j=1}^{B} Y_j \xrightarrow{P} \int y dG(y) = \mathrm{E}\, Y, \quad B \to \infty.$$

Таким образом, мы можем использовать $\overline{Y}_B$ при достаточно больших B для приближения $\mathrm{E}\, Y$. Более того, для любой функции h с конечным мат. ожиданием имеем:

$$\frac{1}{B} \sum_{j=1}^{B} h(Y_j) \xrightarrow{P} \int h(y) dG(y) = \mathrm{E}\,(h(Y)), \quad B \to \infty.$$

Оценка дисперсии на основе бутстрепа

В частности, это означает, что мы можем моделировать и дисперсию:

$$\frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}(Y_j - \overline{Y}_n)^2 = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}(Y_j)^2 - \left(\frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}Y_j\right)^2 \xrightarrow{\mathrm{P}}$$

$$\to \mathrm{P} \int y^2 dG(y) - \left(\int y dG(y)\right)^2 = \mathrm{V}\,(Y), \quad B \to \infty.$$

Это означает, что мы можем использовать выборку для оценки дисперсии. Данная процедура позволяет нам находить $\mathrm{V}_{\widehat{F}_n}(T_n)$ — «дисперсию T_n при данных, распределённых по $\widehat{F}_n$».

Оценка дисперсии на основе бутстрепа

Теперь ситуация выглядит следующим образом.

- С точки зрения реальности:

$$F \Rightarrow X_1, \ldots, X_n \Rightarrow T_n = g(X_1, \ldots, X_n)$$

- С точки зрения бутстрепа:

$$\widehat{F}_n \Rightarrow X_1^*, \ldots, X_n^* \Rightarrow T_n^* = g(X_1^*, \ldots, X_n^*)$$

- **Проблема:** как получить $X_1^*, \ldots, X_n^*$ из $\widehat{F}_n$?
- **Решение:** при подсчёте мат. ожидания с помощью $\widehat{F}_n$ мы использовали одинаковую массу $\frac{1}{n}$. Это значит, что получение наблюдения из $\widehat{F}_n$ эквивалентно выбору случайной точки из исходной выборки.

Алгоритм: оценка дисперсии

Приведём **алгоритм** оценки дисперсии с помощью бутстрепа:

1. Выбираем $X_1^*, \dots, X_n^* \sim \widehat{F}_n$
2. Вычисляем $T_n^* = g(X_1^*, \dots, X_n^*)$
3. Повторяем шаги 1 и 2 пока не получим $T_{n,1}^*, \dots, T_{n,B}^*$
4. Положим

$$v_{boot} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} (T_{n,b}^* - \frac{1}{B} \sum_{r=1}^{B} T_{n,r}^*)^2$$

В итоге получаем:

$$\mathrm{V}_F(T_n) \approx \mathrm{V}_{\widehat{F}}(T_n) \approx v_{boot}$$

Бутстрепная оценка смещения

Пример: асимметрия распределений

- Пусть X — случайная величина X и $\mathrm{E}|X|^3 < \infty$
- Обозначим μ_3 — третий центральный момент: $\mu_3 = \mathrm{E}\left[(X - \mathrm{E}X)^3\right]$, а $\sigma = \sqrt{\mathrm{V}[X]}$ — стандартное отклонение
- Коэффициентом ассимметрии называется отношение $\gamma_1 = \frac{\mu_3}{\sigma^3}$

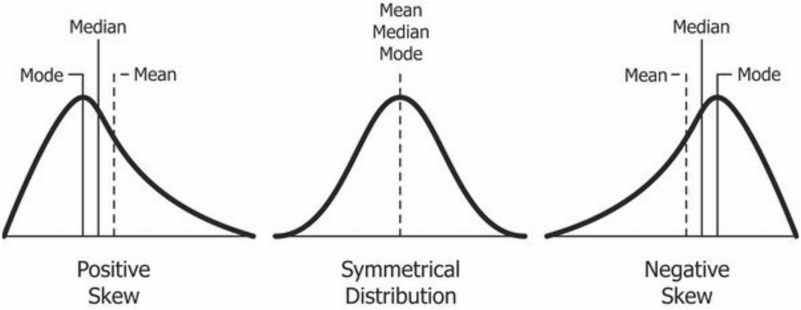


Рис.: https://codeburst.io/

Оценка времени реакции

- Рассмотрим распределение с положительной асимметрией (эксперимент по оценке «времени до наступления события»)
- Берутся M выборок, каждая размера n, считается M значений статистики T_n

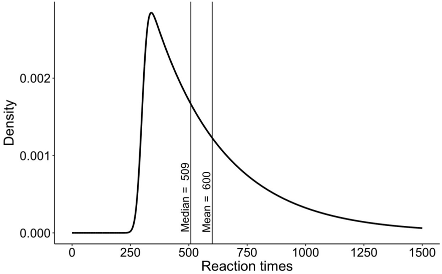


Рис.: Rousselet, G. A., & Wilcox, R. R. (2019). Reaction times and other skewed distributions: problems with the mean and the median. Meta-Psychology.

Выборочная медиана при асимметрии

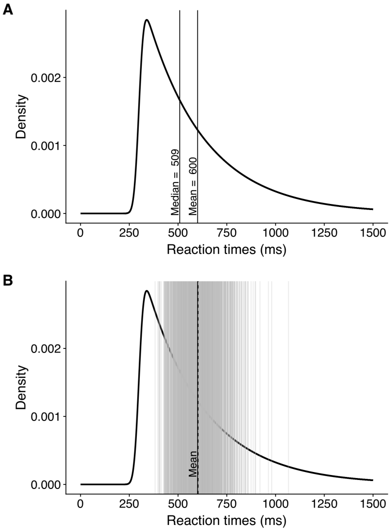


Рис.: Rousselet, G. A., & Wilcox, R. R. (2019). Reaction times and other skewed distributions: problems with the mean

Распределения выборочных статистик

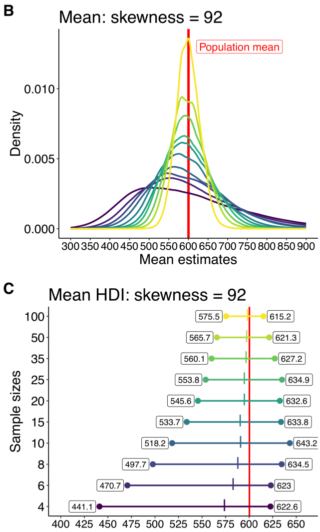


Рис.: Rousselet, G. A., & Wilcox, R. R. (2019). Reaction times and other skewed distributions: problems with the mean

Смещение статистических оценок

- Если T_n — оценка θ, то ее смещением называется величина

$$\mathrm{bias}_\theta(T_n) = \mathrm{E}_\theta[T_n] - \theta$$

- Оценка T_n параметра θ является несмещенной, если $\mathrm{E}_\theta[T_n] \to \theta$ при всех θ
- **Пример:** пусть T_n — выборочная медиана при асимметрии сэмплирующего распределения P, подсчитанная при $n = 10$. Это смещенная оценка истинной медианы med(P):

$$\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}(T_n)_i \overset{M\to\infty}{\not\to} \text{med}(P)$$

- В примере выше $\frac{1}{10^4}\sum_{i=1}^{10^4}(T_n)_i = 523.9$ и med$(P) = 508.7$

Оценка и коррекция смещения

- Предположим выборку из n измерений $\mathbf{X}^n$

Шаг 1. Сделаем новую выборку $\mathbf{X}^{*n}$ с возвращением из n из $\mathbf{X}^n$

Шаг 2. Вычислим оценку $T^*_{n,b}$

- Повторим шаги 1 и 2 B раз, получая значения $T^*_{1,b}, \ldots, T^*_{n,B}$
- Вычислим выборочное среднее B бутстрепных оценок и бутстрепную оценку смещения:

$$b_{\text{boot}} \equiv \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} T^*_{n,b} - T_n$$

- В примере удалось получить при $B = 1000$ скорректированную оценку $T_n + b_{\text{boot}} = 508.6$, в то время как $\text{med}(P) = 508.7$

Параметрический бутстреп

Параметрический бутстреп

- Предположим, что $F(x) \in \{F(x, \theta) \ : \ \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$.
- Тогда с помощью максимизации правдоподобия найдем параметр θ, а именно:

$$\theta = \arg\max_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\vec{X}, \theta)$$

- Вместо ОМП можно использовать метод моментов.
- Далее действуем по описанной схеме непараметрического бутстрепа.

(+) Непрерывная выборка, в маленькой выборке, как правило, недооценка разброса.

(−) Произвольная модель и оценка параметров.

- Обычно выборки с менее чем 10 элементами считаются ненадежными для непараметрического бутстрепа.

Доверительное оценивание на основе бутстрепа

Нормальный интервал

- Если предположить, что данные распределены нормально, то имеет смысл рассмотреть следующий доверительный интервал:

$$(T_n - z_{\alpha/2}\widehat{se}_{boot}, T_n + z_{\alpha/2}\widehat{se}_{boot}),$$

- При этом $z_\alpha : F_{N(0,1)}(z_\alpha) = 1 - \alpha$, $\widehat{se}_{boot} = \sqrt{v_{boot}}$.

Центральный интервал

- Пусть $\theta = T(F)$ и $\widehat{\theta}_n = T(\widehat{F}_n)$.
- Пусть $\widehat{\theta}^*_{n,1}, \ldots, \widehat{\theta}^*_{n,B}$ — получены итерированием шагов 1 и 2 алгоритма бутстрепа.
- Пусть θ^*_β — обозначает β-квантиль для $(\theta^*_{n,1}, \ldots, \theta^*_{n,B})$.
- Тогда центральный $(1-\alpha)$-доверительный интервал :

$$C_n = (2\widehat{\theta}_n - \widehat{\theta}^*_{1-\alpha/2}, 2\widehat{\theta}_n - \widehat{\theta}^*_{\alpha/2}).$$

Центральный интервал

Теорема

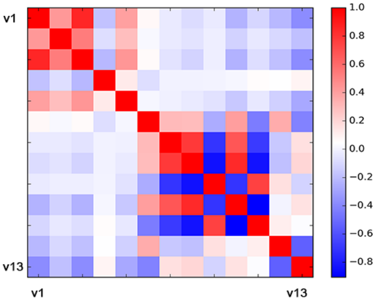
При некоторых несильных условия на $T(F)$,

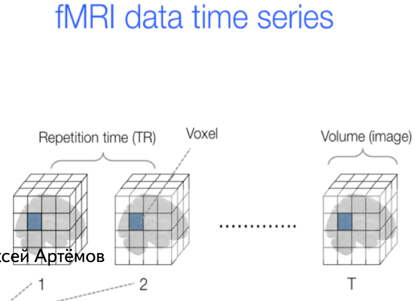
$$\mathrm{P}_F(T(F) \in C_n) \to 1 - \alpha, \qquad n \to \infty,$$

$$C_n = (2\widehat{\theta}_n - \widehat{\theta}^*_{1-\alpha/2}, 2\widehat{\theta}_n - \widehat{\theta}^*_{\alpha/2})$$

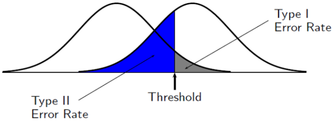
Множественная проверка гипотез

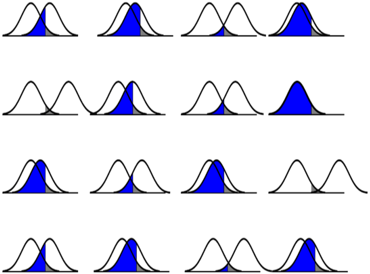
Множественная проверка гипотез

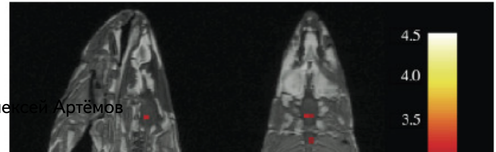




Проблема множественных сравнений







Коррекция Бонферрони

- Пусть $H_1, \ldots, H_m$ — семейство проверяемых гипотез, $p_1, \ldots, p_m$ — их p-values.
- m — общее число гипотез, m_0 — истинных гипотез.
- Тогда групповая вероятность ошибки (family-wise error rate, FWER) — вероятность отвергнуть хотя бы одну истинную H_i, то есть сделать хотя бы одну ошибку первого рода.
- При коррекции Бонферрони отвергается нулевая гипотеза для всех $p_i < \alpha/m$, тем самым удерживая FWER на уровне $\leq \alpha$:

$$\begin{aligned}\text{FWER} &= \mathrm{P}\left\{\bigcup_{i=1}^{m_0}\left(p_i \leq \frac{\alpha}{m}\right)\right\} \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^{m_0}\left\{\mathrm{P}\left(p_i \leq \frac{\alpha}{m}\right)\right\} = m_0\frac{\alpha}{m} \leq m\frac{\alpha}{m} = \alpha.\end{aligned}$$

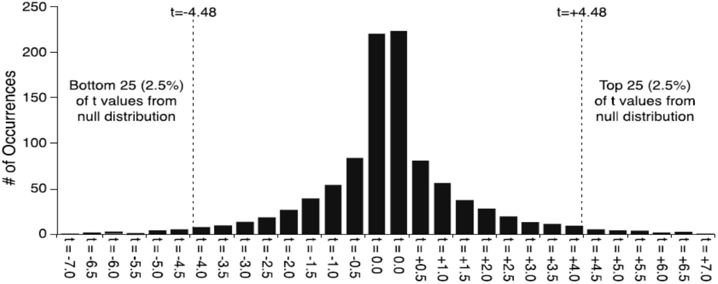
Пермутационный тест

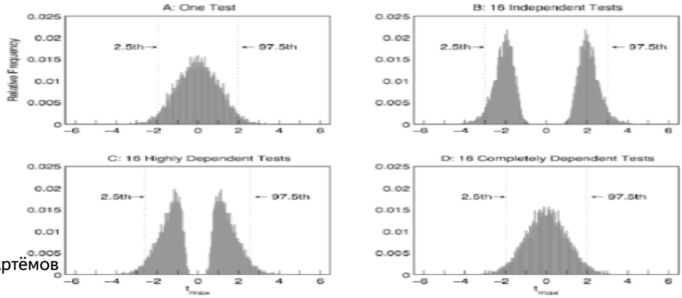
Если знаем, как применить ресемплинг с учетом дизайна исследования и нулевой гипотезы. Простейший случай: две выборки (два условия), равенство средних.

Алгоритм:

1. Для каждой проверяемой гипотезы $H_1, \ldots, H_m$ считаем истинные $T_1, \ldots, T_m$.
2. Для каждой проверяемой гипотезы $H_1, \ldots, H_m$ случайным образом меняем метки N раз, считаем суррогатные $T_1^1, \ldots, T_1^N, T_m^1, \ldots, T_m^N$, находим $T_{\max}^1, \ldots T_{\max}^N$
3. Строим нулевое распределение $T_{\max}$, критическое значение статистики для истинных $T_1, \ldots T_m$ берется как квантиль (0.05, 0.01 и т.д.) этого нулевого распределения.

Пермутационный тест

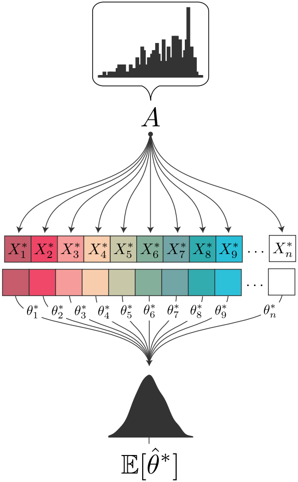




Ресемплинг в машинном обучении

Бутстреп и слабые решающие правила

- Вход: выборка $X^\ell = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$
- Бутстреп: случайное семплирование новых элементов X_1^m вида (x_i, y_i) из X^ℓ с равными вероятностями и с возвращением (возможны повторы (x_i, y_i)!)
- Идея ансамблей гипотез:
  1. Сгенерировать B бутстрепных выборок $X_1^m, \dots, X_B^m$
  2. Обучить B гипотез $h_1, \dots, h_B$
  3. Усреднить прогнозы и получить $h(x) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^{B} h_i(x)$
  4. Profit!



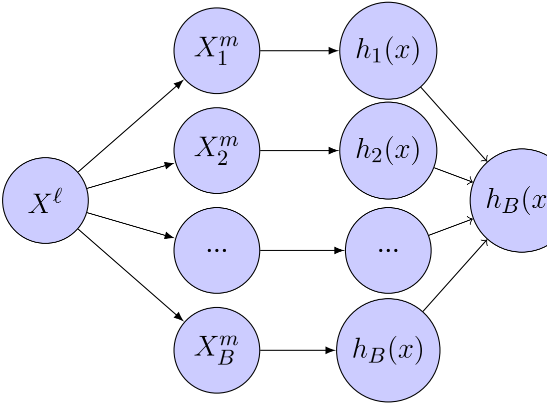
Picture credit: http://www.drbunsen.org/bootstrap-in-picture

Bagging: Bootstrap AGGregation

- Вход: выборка $X^\ell = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$
- Слабые гипотезы — из бутстрепа $\widetilde{\mu}(X^\ell) = \mu(\widetilde{X}^\ell)$
- Среднее по ансамблю

$$h_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^{B} h_i(x) =$$

$$= \frac{1}{B} \sum_{i=1}^{B} \tilde{\mu}(X^\ell)(x)$$



Пример: случайный лес

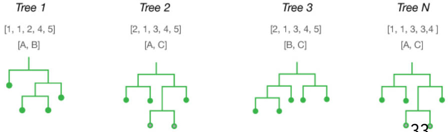
- Бэггинг над (слабыми) решающими деревьями
- Уменьшение ошибки с помощью усреднения по элементам выборки и признакам
- Вход: выборка $X^\ell = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$, где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \mathbb{Y}$
- Алгоритм: повторять для $i = 1, \ldots, N$:
  1. Выбрать p случайных признаков из d
  2. Забутстрепить выборку $X_i^m = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$ где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \mathbb{Y}$
  3. Обучить решающее дерево $h_i(\mathbf{x})$ по бутстрепной X_i^m
  4. Остановка: листья h_i содержат менее, чем n_{min} примеров

$\mathbf{x}_i \in \{A, B, C\}$

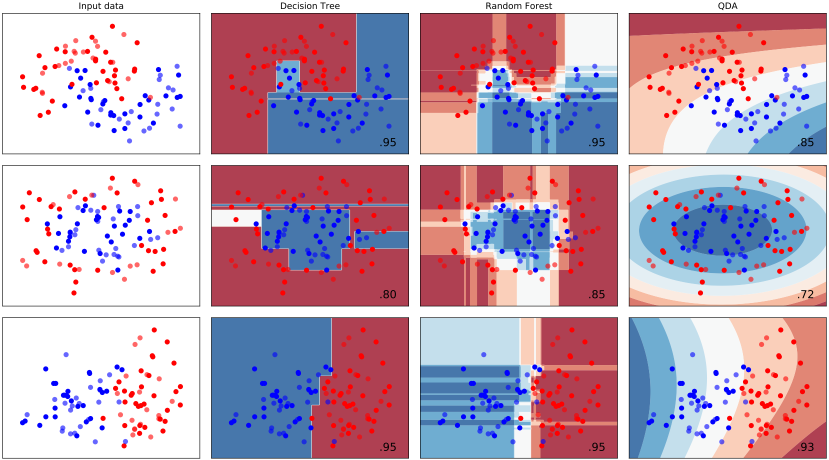
$X^\ell = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{5}$

Бутстреп $X_i^m, i \in \{1, 2, 3, 4\}$

Обучаем $h_i(\mathbf{x})$ по X_i^m



Случайный лес: синтетическая выборка



Бэггинг: обсуждение эффективности

- $h_i(\mathbf{x})$ — гипотеза, построенная по бутстрепной выборке.
- Общий результат бэггинга: $h_B(\mathbf{x}) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} h_i(\mathbf{x})$
- Пусть дана задача регрессии и на каждой бутстрепной выборке найдены функции $h_1(\mathbf{x}), \ldots, h_B(\mathbf{x})$.
- Ошибки на элементах выборки $\varepsilon_k(\mathbf{x}_i) = h_k(\mathbf{x}_i) - y_i$, $k = 1, \ldots, B$, $y_i = f(\mathbf{x}_i)$ — аппроксимируемая функция.
- Матожидание среднеквадратичной ошибки: $\mathcal{E}_1 = \mathrm{E}\,[h_k(\mathbf{x}) - y]^2 = \mathrm{E}\,[\varepsilon_k^2(\mathbf{x})]$.
- Средняя ошибка найденных гипотез

$$\mathcal{E}_B = \frac{1}{B}\,\mathrm{E}\,[\sum_{i=1}^{B} \varepsilon_k^2(\mathbf{x})]$$

Бэггинг: обсуждение эффективности

- Пусть ошибки несмещены и некоррелированы:

$$\mathrm{E}\left[\varepsilon_k(\mathbf{x})\right] = 0, \quad \mathrm{E}\left[\varepsilon_k(\mathbf{x})\varepsilon_j(\mathbf{x})\right] = 0, \quad k \neq j.$$

- Если возьмем функцию: $h(\mathbf{x}) = \frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B} h_k(x)$, то

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_B &= \mathrm{E}\left[\frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B} h_k(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})\right]^2 = \mathrm{E}\left[\frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B} \varepsilon_k(\mathbf{x})\right]^2 = \\ &= \frac{1}{B^2}\,\mathrm{E}\left[\sum_{k=1}^{B} \varepsilon_k^2(\mathbf{x}) + \sum_{k \neq j} \varepsilon_k(\mathbf{x})\varepsilon_j(\mathbf{x})\right] = \frac{1}{B}\mathcal{E}_1 \end{aligned}$$

- Таким образом, снизили дисперсию в B раз.
- Общая ошибка модели («разложение ошибки на смещение и разброс») = смещение + разброс + неустранимая ошибка.

Примеры

Пример №1

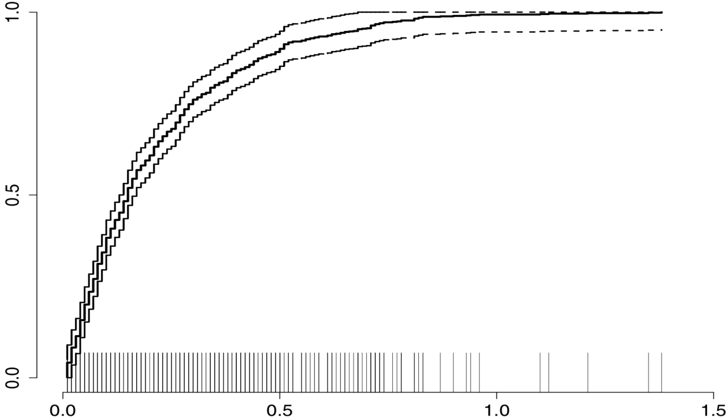


FIGURE 2.1. Nerve data. Each vertical line represents one data point. The solid line is the empirical distribution function. The lines above and below the middle line are a 95 percent confidence band.

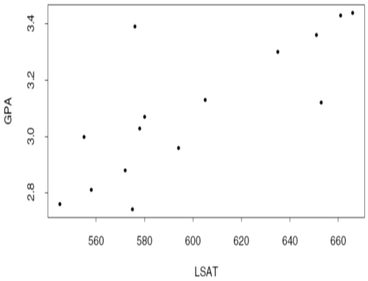
Picture credit: Wasserman, Larry. “All of Nonparametric Statistics, 268 pp.” (2007).

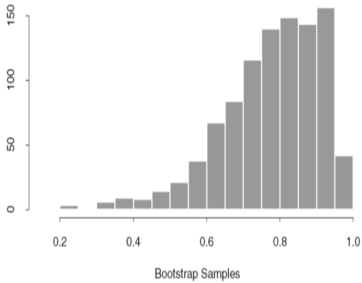
Пример №1

- Данные о моментах времени прохождения импульсов вдоль нервного волокна.
- $\theta = T(F) = \int \frac{(x-\mu)^3}{\sigma^3} dF(x)$ — коэффициент асимметрии.
- $\widehat{\theta} = T(\widehat{F}_n) = \frac{1}{\widehat{\sigma}^3} \cdot \left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X}_n)^3\right] = 1.76.$
- Оценка дисперсии с помощью непараметрического бутстрепа: $\widehat{\mathrm{V}}^{\text{boot}}_{\widehat{F}_n}(T_n) = (0.16)^2$, при $B = 1000.$
- 95% интервал для коэффициента асимметрии:
  - Нормальный интервал: (1.44, 2.09).
  - Центральный интервал: (1.48, 2.11).
  - Интервал на основе процентилей: (1.42, 2.03).

Пример №2

Данные о LSAT (Law School Admissible Test) и GPA (Grade Point Average).





Нас интересует корреляция между ними.

Пример №2

1. Подсчитаем выборочную корреляцию

$$\widehat{r}(LSAT, GPA) = \frac{\sum_i (LSAT_i - \overline{LSAT})(GPA_i - \overline{GPA})}{\sqrt{[\sum_i (LSAT_i - \overline{LSAT})^2][\sum_i (GPA_i - \overline{GPA})^2]}} = 0.776$$

2. $\widehat{\mathrm{V}}\left(\widehat{r}(LSAT, GPA)\right) = 0.137^2$, при $N = 1000.$
3. 95% интервал для коэффициента асимметрии:
   - Нормальный интервал: (0.51, 1)
   - Интервал на основе процентилей: (0.46, 0.96)