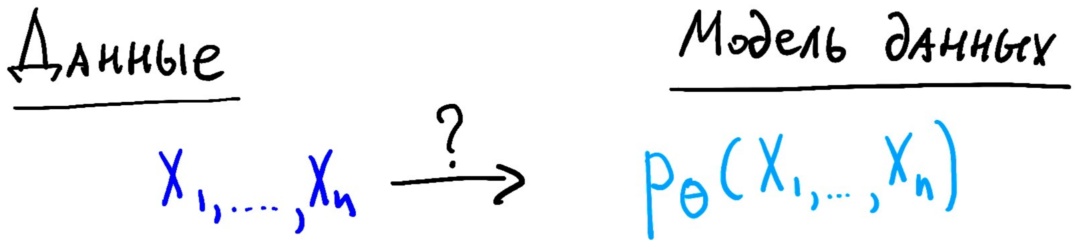
Метод максимального правдоподобия

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.



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 $\mathbb{P}_\theta$

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

   где зависимость модели от параметра обозначена нижним индексом;

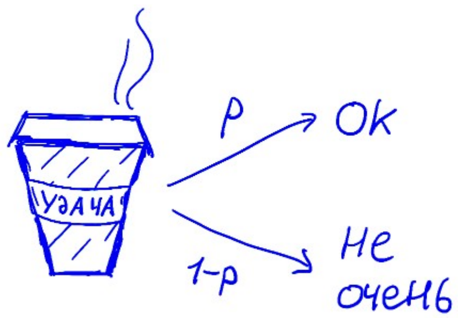
2. Найти параметр $\hat{\theta}$, делающий выборку наиболее вероятной:

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

Функция L также часто называется *правдоподобием(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 p 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

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

где g – количество хороших дней, а b – плохих. Здесь полезно рассмотреть лог-правдоподобие

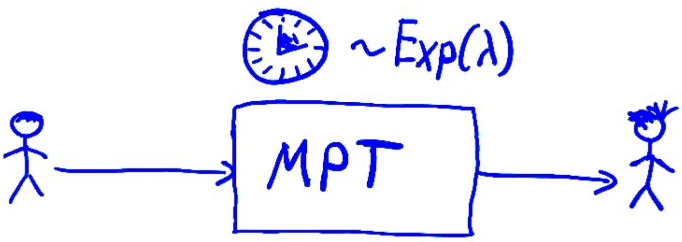
$$l(p) = \ln L(p)$$

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*

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



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: $\mathbb{E}[\theta_n] \to \theta_0$ при $n \to \infty$;

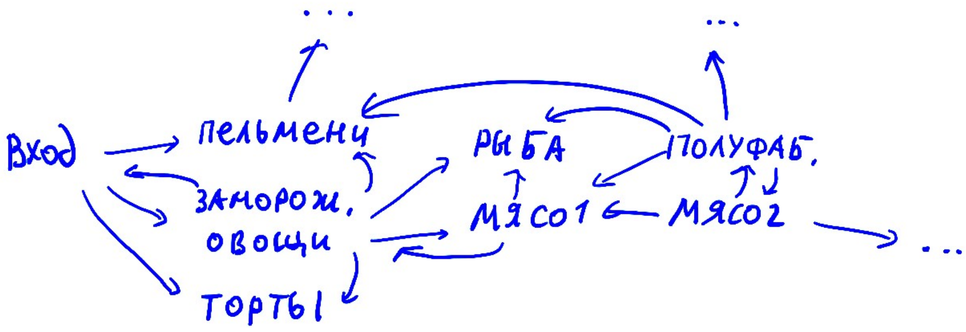
2. Состоятельность: $\theta_n \to^{\mathbb{P}} \theta_0$ при $n \to \infty$;

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 a 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:

<бак><шок><бак><кас><шок><кас><вых>,

бак – означает бакалею, *шок* – шшоколад, *кас* – кассу, *вых* – 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:

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

То, что мы описали, называется *цепью Маркова*, а последнее свойство – *Марковским свойством.*

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 *переходы* $(X_t \to X_{t+1})$ 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

$$\hat{P} = \arg\max_{P=(p_{ij})} l(P).$$

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 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

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