

# Éléments de statistiques pour les data sciences

## Cours 11: inférence bayésienne

Dr. Ph. Müllhaupt

IGM - EPFL

—

- 1 probabilité conditionnelle
- 2 degré de croyance
- 3 principe de l'inférence bayésienne
- 4 décision bayésiennes
- 5 exemples divers (a priori, a posteriori)
- 6 distribution gaussienne multidimensionnelle

# probabilité conditionnelle

## rappel de la définition

Soit deux évènements  $A$  et  $B$

définition

$$P(A|B) \triangleq \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

# probabilité conditionnelle

interprétation fréquentiste

## interprétation

Supposons un grand nombre d'expériences  $n$  a été effectué et les résultats des évènements  $A$  et  $B$  ont été enregistrés sous la forme suivante :  $n_A$  expériences parmi les  $n$  expériences correspondent à l'évènement  $A$ , et  $n_B$  expériences correspondent à l'évènement  $B$ . On note  $n_{A \cap B}$  le nombre d'expériences qui correspondent aux évènements qui ont lieu simultanément  $A$  et  $B$ . L'interprétation fréquentiste de la probabilité suggère que si les expériences ont été réalisées de manière indépendante, la fréquence  $\frac{n_A}{n}$  sera proche de la probabilité  $P(A)$  et la fréquence  $\frac{n_B}{n}$  sera proche de la probabilité  $P(B)$ . Maintenant,

$$\frac{P(A \cap B)}{P(B)} \approx \frac{\frac{n_{A \cap B}}{n}}{\frac{n_B}{n}} = \frac{n_{A \cap B}}{n_B} \approx P(A|B)$$

Ceci mesure l'expectative d'avoir l'évènement  $A$  se produire lorsque l'évènement  $B$  est observé.

# distribution conditionnelle

distribution continue

## définition

Soit  $X$  et  $Y$  deux variables aléatoires avec densité jointe  $f$ , distribution marginale  $f_1$  pour  $X$  et distribution marginale  $f_2$  pour  $Y$ . La probabilité conditionnelle de  $Y$  sachant  $X = x$  est définie par

$$f_2(y|x) = \frac{f(x, y)}{f_1(x)} \quad -\infty < y < +\infty$$

# distribution conditionnelle

## distribution continue

Dans le cas continu il faut être prudent car  $P(X = x) = 0$ . Il faut prendre un intervalle et le faire tendre vers zéro.

$$P(A|X = x) = \lim_{h \rightarrow 0} P(A|0 \leq X \leq h)$$

# distribution conditionnelle

distribution continue

Une autre façon de rendre la définition plus claire est de passer par les fonctions de répartition car on peut appliquer la définition sans autre

$$\begin{aligned} P(Y \leq y | x \leq X \leq x + h) &= \frac{P(x \leq X \leq x + h, Y \leq y)}{P(x \leq X \leq x + h)} \\ &= \frac{F(x + h, y) - F(x, y)}{F_1(x + h) - F_1(x)} \end{aligned}$$

(remarque  $F_1(0)$  n'apparaît pas dans la formule précédente car  $f(x) = 0$  pour  $x < 0$ ), et il suffit alors de prendre la limite

$$\lim_{h \rightarrow 0} P(Y \leq y | x \leq X \leq x + h) = \int_{-\infty}^y \frac{f(x, t)}{f_1(x)} dx \triangleq \int_{-\infty}^y f_2(t|x) dt$$

## Exemple

distribution continue

Soit

$$f(x, y) = e^{-(x+y)} \quad 0 \leq x < +\infty \text{ et } 0 \leq y < +\infty$$

$$P(Y \leq 2, 0 \leq X \leq h) = \int_0^2 dy \int_0^h e^{-(x+y)} dx = (1 - e^{-2})(1 - e^{-h})$$

$$P(Y \leq 2, 0 \leq X \leq hY) = \int_0^2 dy \int_0^{hy} e^{-(x+y)} dx = \frac{h}{1+h} - \frac{1+h-e^{-2h}}{e^2(1+h)}$$

$$P(0 \leq X \leq h) = \int_0^\infty dy \int_0^h e^{-(x+y)} dx = 1 - e^{-h}$$

$$P(0 \leq X \leq hY) = \int_0^\infty dy \int_0^h e^{-(x+y)} dx = \frac{h}{1+h}$$



## Exemple

distribution continue

lorsque  $h = 0$  les deux expressions précédentes sont différentes de zéro, et en utilisant  $P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$

$$p_1(h) \triangleq P(Y \leq 2 | 0 \leq X \leq h) = 1 - e^{-2}$$

$$p_2(h) \triangleq P(Y \leq 2 | 0 \leq X \leq h, Y) = 1 - \frac{1 + h - e^{-2h}}{e^2 h}$$

$$p_1 \triangleq \lim_{h \rightarrow 0} p_1(h) = 1 - e^{-2} = 0.865$$

$$p_2 \triangleq \lim_{h \rightarrow 0} p_2(h) = 1 - 3e^{-2} = 0.594$$

## distribution a priori

rattaché au degré de croyance en un paramètre

- ensemble des échantillons  $\mathcal{X}$
- échantillon  $x$
- paramètre de la distribution  $\theta$
- notation pour la distribution :  $f(x|\theta)$ . Le paramètre  $\theta$  est fixe mais inconnu.
- Soit  $H$  l'état des connaissances de l'expérimentateur lorsqu'il effectue l'expérience et collecte l'échantillon  $x$ .
- $\theta$  aura une distribution qui dépend de  $H$  au sens du degré de croyance

$$\pi(\theta|H)$$

## Probabilité au sens du degré de croyance

- Plusieurs auteurs ont donné un cadre théorique solide pour les probabilités au sens du degré de croyance (Savage, Ramsey, Jeffreys, de Finetti, Carnap, Lindley, pour en citer que quelques-un)
- Il est possible de donner un système d'axiomes qui rend possible l'inférence en utilisant une logique inductive, par rapport à la physique et mathématique classique qui utilise un système d'axiomes pour une logique déductive.
- Nous allons utiliser les théorèmes de Bayes.

# Axiomes des probabilités

associés au degré de croyance

Axiomes :

- ❶  $0 \leq \pi(A|B) \leq 1$  et  $\pi(A|A) = 1$
- ❷ Si les évènements  $\{A_i\}$  sont exclusifs sachant  $B$  (loi d'addition des probabilités)

$$\pi(\cup A_i|B) = \sum_i \pi(A_i|B)$$

- ❸  $\pi(C|A \cap B)\pi(A|B) = \pi(A \cap C|B)$

# indépendance

## définition

définition de l'indépendance (loi de multiplication des probabilités)

Deux évènements sont indépendants si connaissant  $C$  on a

$$\pi(A \cap B | C) = \pi(A | C) \pi(B | C)$$

## quelques théorèmes de Bayes...

### Thm 1.

$$\pi(A|B) = \pi(A \cap B|B)$$

démonstration :

Le troisième axiome donne en remplaçant  $A$  par  $B$ ,  $B$  par  $C$  et  $C$  par  $A$

$$\pi(A|B \cap C)\pi(B|C) = \pi(B \cap A|C)$$

Ensuite on remplace  $C$  par  $B$

$$\pi(A|B \cap B)\pi(B|B) = \pi(A \cap B|B)$$

et le membre de gauche égale  $\pi(A|B)$  car  $B \cap B = B$  et  $\pi(B|B) = 1$  par l'axiome 1.

## Thm 2.

Si  $A \Rightarrow B$  alors

$$\pi(A|B)\pi(B) = \pi(A)$$

### démonstration :

L'axiome 3 peut s'écrire  $\pi(A|B \cap C)\pi(B|C) = \pi(B \cap A|C)$  et en posant  $C = B$ , on arrive à  $\pi(A|B \cap B)\pi(B|B) = \pi(B \cap A|B)$  et comme  $A \Rightarrow B$ , on a  $A \subset B$  et donc  $B \cap A = A$  et on a  $\pi(B \cap A|B) = \pi(A)$ .

### Thm 3. (thm. de Bayes)

soit  $\{A_i\}$  une séquence d'évènements et  $B$  un évènement quelconque avec  $\pi(B) \neq 0$  alors

$$\pi(A_n|B) \propto \pi(B|A_n)p(A_n)$$

démonstration :

L'axiome 3 donne  $\pi(C|A)\pi(A) = \pi(A \cap C)$  et  $\pi(A|C)\pi(C) = \pi(C \cap A)$  et en combinant on a

$$\pi(C|A) = \pi(A|C)\pi(C)/\pi(A)$$



## principe de l'inférence bayésienne

a priori, a posteriori

- $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  un échantillon de variables aléatoires indépendantes posons

$$p(\mathbf{x}|\theta, H) = \prod_{i=1}^n f(x_i|\theta, H)$$

- utilisation du théorème de Bayes

$$\pi(\theta|\mathbf{x}, H) \propto p(\mathbf{x}|\theta, H) \pi(\theta|H)$$

La constante de proportionnalité

$$\left\{ \int p(\mathbf{x}|\theta, H) \pi(\theta|H) d\theta \right\}^{-1} \triangleq \frac{1}{\pi(\mathbf{x}|H)}$$

ne dépend pas des paramètres.

- on omettra  $H$  par la suite sauf si c'est important

- Vocabulaire : distribution a priori

$$\pi(\theta|H)$$

- Vocabulaire : distribution a posteriori

$$\pi(\theta|x, H)$$

.

- Vocabulaire : vraisemblance

$$p(x|\theta, H)$$

vue comme une fonction de  $\theta$

# hypothèse et décision bayésienne

fonction de coût

- $C_{H_0 H_0} = C_{00}$  : coût d'accepter  $H_0$  alors que  $H_0$  est vraie.
- $C_{H_1 H_0} = C_{10}$  : coût d'accepter  $H_1$  alors que  $H_0$  est vraie.
- $C_{H_1 H_1} = C_{11}$  : coût d'accepter  $H_1$  alors que  $H_1$  est vraie.
- $C_{H_0 H_1} = C_{01}$  : coût d'accepter  $H_0$  alors que  $H_1$  est vraie.

# décision bayésienne

coût attendu

l'espérance mathématique du coût entraîne le coût attendu (expected cost)

$$\mathcal{R} \triangleq \mathbb{E}\{ \text{coût} \}$$

$$\mathcal{R} = \mathbb{E}\{ \text{coût} \mid H_0 \} \pi(H_0) + \mathbb{E}\{ \text{coût} \mid H_1 \} \pi(H_1)$$

## régions d'acceptation

- $\mathcal{A}_0$  : région d'acceptation de  $H_0$
- $\mathcal{A}_1$  : région d'acceptation de  $H_1$

### définition de la décision bayésienne

Il faut sélectionner  $\mathcal{A}_0$  et  $\mathcal{A}_1$  de telle sorte à minimiser  $\mathcal{R}$ .

## décision bayésienne

On décide  $H_0$  lorsque

$$\lambda(x) = \frac{f(x|H_0)}{f(x|H_1)} > \frac{\pi(H_1)(C_{01} - C_{11})}{\pi(H_0)(C_{10} - C_{00})} \triangleq k$$

et on décide  $H_1$  lorsque  $\lambda(x) < k$

## Exemple

illustratif de la décision bayésienne

- 

$$H_0 : f(x|H_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$$

- 

$$H_1 : f(x|H_1) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{8}x^2\right)$$

- On suppose a priori que les deux hypothèses sont d'égale probabilité  $P\{H_0\} = P\{H_1\} = 0.5$ .
- $C_{01} = C_{10} = 1$  et  $C_{00} = C_{11} = 0$

le rapport de vraisemblance

$$\lambda(x) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{1}{8}x^2 - \frac{1}{2}x^2\right) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{3}{8}\right)$$

Le niveau

$$k = \frac{\frac{1}{2}(1-0)}{\frac{1}{2}(1-0)} = 1$$

Si  $\frac{1}{2} \exp(-3/8x^2) < 1$  on privilégie  $H_1$



# théorème

variable aléatoire gaussienne avec a priori gaussien

Thm.

- $X \sim \mathcal{N}(\theta, \sigma^2)$  où  $\sigma^2$  est connu
- moyenne  $\theta$  inconnue mais supposée distribuée a priori  $\pi(\theta) \sim \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2)$ .

La distribution a posteriori sera alors  $\pi(\theta|x) \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$  avec

$$\mu_1 = \frac{x/\sigma^2 + \mu_0/\sigma_0^2}{1/\sigma^2 + 1/\sigma_0^2}, \quad \sigma_1^{-2} = \sigma^{-2} + \sigma_0^{-2}$$

## commentaire

- La distribution initiale influence le résultat par rapport à l'échantillon
- La moyenne est une pondération entre l'échantillon  $x$  et la valeur a priori de la moyenne  $\mu_0$ .
- La variance de la distribution a posteriori et la moyenne harmonique de la variance apriori  $\sigma_0$  et de celle de la variance de la distribution de l'échantillon  $\sigma^2$

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2}}$$

- L'échantillon  $x$  remet à jour notre croyance initiale en  $\theta$  donné sous la forme de  $\pi(\theta)$  pour constituer un nouveau degré de croyance en  $\theta$  donné sous la forme de la distribution a posteriori  $\pi(\theta|x)$  pour le paramètre  $\theta$ .

## démonstration

la vraisemblance

$$p(x|\theta) \propto \exp[-(x - \theta)^2/(2\sigma^2)]$$

a priori

$$\pi(\theta) \propto \exp[-(\theta - \mu_0^2)/(2\sigma_0^2)]$$

a posteriori

$$\begin{aligned}\pi(\theta|x) &\propto \exp\left\{-\frac{(x - \theta)^2}{2\sigma^2} - \frac{(\theta - \mu_0)^2}{2\sigma_0^2}\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\theta^2(1/\sigma^2 + 1/\sigma_0^2) + \theta(x/\sigma^2 + \mu_0/\sigma_0^2)\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\theta^2/\sigma_1^2 + \theta\mu_1/\sigma_1^2\right\} \\ &\propto \exp\{-1/2(\theta - \mu_1)^2/\sigma_1^2\}\end{aligned}$$

CQFD

# corollaire

## corollaire

Soit  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  un échantillon de  $n$  variables aléatoires indépendantes  $X_i \sim \mathcal{N}(\theta, \sigma^2)$  où  $\sigma^2$  est connu et avec la distribution a priori  $\pi(\theta) \sim \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2)$ . La distribution a posteriori est alors  $\pi(\theta|\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(\mu_n, \sigma_n^2)$  avec

$$\mu_n = \frac{n\bar{x}/\sigma^2 + \mu_0/\sigma_0^2}{n/\sigma^2 + 1/\sigma_0^2}, \quad \sigma_n^{-2} = n\sigma^{-2} + \sigma_0^{-2}$$

et  $\bar{x} = 1/n \sum x_i$  la moyenne d'échantillon.

## démonstration

### démonstration

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\theta) &\propto \exp \left[ - \sum_{i=1}^n (x_i - \theta)^2 / (2\sigma^2) \right] \\ &\propto \exp \left[ -1/2 \theta^2 (n/\sigma^2) + \theta \bar{x} (n/\sigma^2) \right] \\ &\propto \exp \left[ -1/2 (\bar{x} - \theta)^2 (n/\sigma^2) \right] \end{aligned} \quad \text{CQFD}$$

## Encore un théorème...

gaussienne avec moyenne connue, mais variance inconnue

### théorème

Soit  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  un échantillon de  $n$  variables aléatoires indépendantes  $X_i \sim \mathcal{N}(\mu, \theta)$ , avec la moyenne connue mais la variance  $\theta = \sigma^2$  inconnue. On considère l'a priori

$$\nu_0 \sigma_0^2 / \theta \sim \chi_{(\nu_0)}^2$$

alors la distribution a posteriori de

$$(\nu_0 \sigma_0^2 + s^2) / \theta \sim \chi_{(\nu_0 + n)}^2$$

avec la variable

$$s \triangleq \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2$$

## lemme utile

lors d'intégrale de fonctions gamma

lemme

$$\int_0^{\infty} e^{-A/\theta} \theta^{-m} d\theta = (m-2)!/A^{m-1} \quad (A > 0, m > 1)$$

La démonstration peut être obtenue par intégration par partie itérée après la substitution  $x = A/\theta$  et  $dx = -Ad\theta/\theta^2$ .

# démonstration

Rappel de la distribution du  $\chi^2_{(2m)}$

$$\exp^{-1/2x} x^{m-1} / (2^m (m-1)!)$$

Si  $X = \nu_0 \sigma_0 / \theta \sim \chi_{(\nu_0=2m)}$  alors

$$\begin{aligned} \pi(\theta) &= \exp \left\{ -\frac{\nu_0 \sigma_0^2}{2\theta} \right\} \left( \left( \frac{\nu_0 \sigma_0^2}{\theta} \right)^{\frac{1}{2}\nu_0-1} \frac{\nu_0 \sigma_0^2}{\theta^2} / [2^{\frac{1}{2}\nu_0} (\frac{1}{2}\nu_0 - 1)!] \right) \\ &\propto \exp \left\{ -\frac{\nu_0 \sigma_0^2}{2\theta} \right\} \theta^{-\frac{1}{2}\nu_0-1} \end{aligned}$$

car  $dx = -\nu_0 \sigma_0^2 d\theta / \theta^2$ .



La vraisemblance de l'échantillon est

$$p(\mathbf{x}|\theta) \propto \exp \left\{ - \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 / (2\theta) \right\} \propto e^{-s^2/2\theta} \theta^{-1/2n}$$

Distribution a posteriori

$$\pi(\theta|\mathbf{x}) \propto e^{-(\nu_0\sigma_0^2+s^2)/(2\theta)} \theta^{-1/2(n+\nu_0)-1} \quad CQFD$$

## deux échantillons gaussiens

$$X_{1i} \sim \mathcal{N}(\theta_1, \sigma_1^2) \text{ et } X_{2j} \sim \mathcal{N}(\theta_2, \sigma_2^2)$$

### théorème

Si

- $\mathbf{x}_1 = (x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n_1})$  un échantillon avec  $X_{1i} \sim \mathcal{N}(\theta_1, \sigma_1^2)$
- $\mathbf{x}_2 = (x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2n_2})$  un échantillon avec  $X_{2j} \sim \mathcal{N}(\theta_2, \sigma_2^2)$ .
- la distribution a priori pour  $\theta_1$  et  $\theta_2$  est uniforme sur  $]-\infty; +\infty[$

alors la distribution a posteriori de  $\delta \triangleq \theta_1 - \theta_2$  est donnée par

$$\delta \sim \mathcal{N}\left(\bar{x}_1 - \bar{x}_2, \frac{\sigma_1^2}{n_1} + \frac{\sigma_2^2}{n_2}\right)$$

## deux distributions gaussiennes

$$X_{1i} \sim \mathcal{N}(\theta_1, \phi) \text{ et } X_{2j} \sim \mathcal{N}(\theta_2, \phi)$$

- $X_{1i} \sim \mathcal{N}(\theta_1, \phi), i = 1, \dots, n_1$
- $X_{2j} \sim \mathcal{N}(\theta_2, \phi), j = 1, \dots, n_2$
- distributions a priori pour  $\theta_1$  et  $\theta_2$  uniforme sur  $] - \infty; +\infty[$
- distribution uniforme pour  $\log \phi$  sur  $] - \infty; +\infty[$

alors

$$\frac{\nu s^2}{\phi} \sim \chi_{(\nu)}^2$$

avec

$$\nu_i s_i^2 = \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x}_i)^2, \quad \nu_1 = n_1 - 1$$

$$\nu s^2 = \nu_1^2 s_1^2 + \nu_2^2 s_2^2, \quad \nu = \nu_1 + \nu_2$$

## esquisse de la démonstration

- en multipliant les vraisemblances par les a priori, cela conduit à la distribution a posteriori

•

$$\pi(\theta_1, \theta_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \propto \phi^{-1/2(n_1+n_2+2)} \exp[-\{n_1(\bar{x}_1 - \theta_1)^2 + n_2(\bar{x}_1 - \theta_2)^2 + \nu_1 s_1^2 + \nu_2 s_2^2\}/(2\phi)]$$

- Pour obtenir la distribution a posteriori de  $\phi$  il faut intégrer l'expression précédente par rapport à  $\theta_1$  et  $\theta_2$  (distribution marginale) et cela donne

$$\pi(\phi|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \propto e^{-\nu s^2/(2\phi)} \phi^{-1/2\nu-1}$$

et on découvre le  $\chi^2_{(\nu_1+\nu_2)}$

## distribution normale multidimensionnelle

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |C|^{1/2}} \exp \left( -\frac{1}{2} (x - \mu)^T C^{-1} (x - \mu) \right)$$

- vecteur de moyenne

$$\mu = \begin{pmatrix} \mathbb{E}[X_1] \\ \vdots \\ \mathbb{E}[X_n] \end{pmatrix} = \mathbb{E}[X]$$

- matrice de covariance (matrice semi-définie positive), appelée également parfois matrice des variances et matrice de covariance

$$C = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X]) (X - \mathbb{E}[X])^T]$$

- en composantes  $C = [\sigma_{ij}]$  avec  $\sigma_{ij} = \mathbb{E}[(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)]$

$C$  est notée également  $\Sigma$  ou  $\Gamma$  et  $K_{XX}$  selon les auteurs et les sources.

## distribution normale multidimensionnelle

Thm.

- $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(A\theta, C)$
- $\pi(\theta) \sim \mathcal{N}(\mu_0, C_0)$

sous ces conditions la matrice  $A$  est connue (i.e. telle que  $\mathbb{E}(\mathbf{x}) = A\theta$ ), le vecteur de moyennes  $\mu_0$  est connu et la matrice de covariance  $C_0$  est connue mais les vecteur des paramètres  $\theta$  n'est pas connu, la distribution a posteriori s'écrit

$$\begin{aligned}\pi(\theta|\mathbf{x}) &= \mathcal{N}(\mu_1, C_1) \\ \mu_1 &\triangleq (C_0^{-1} + A^T C^{-1} A)^{-1} (C_0^{-1} \mu_0 + A^T C^{-1} \mathbf{x}) \\ C_1 &\triangleq (C_0^{-1} + A^T C^{-1} A)^{-1}\end{aligned}$$

## esquisse de démonstration

$$p(x|\theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(x - A\theta)^T C^{-1} (x - A\theta)\right)$$

$$\pi(\theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\theta - \mu_0)^T C_0^{-1} (\theta - \mu_0)\right)$$

Alors  $\pi(\theta|x) \propto p(x|\theta) \pi(\theta)$ . En éliminant les termes constants multiplicatifs on arrive après quelques manipulations

$$\begin{aligned} \pi(\theta|x) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}[\theta^T (C_0^{-1} + A^T C^{-1} A) \theta - 2\theta^T (C_0^{-1} \mu_0 + A^T C^{-1} x)]\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}[(\theta - \mu_1)^T (C_0^{-1} + A^T C^{-1} A) (\theta - \mu_1)]\right) \end{aligned}$$

# distance de Mahalanobis

$r$  est la distance de  $x$  à  $\mu$

$$r^2 = (x - \mu)^T C^{-1} (x - \mu)$$