

# Введение в байесовский вывод

---

Сергей Николенко



Академия больших данных MADE — VK

24 января 2022 г.

---

*Random facts:*

- 24 января — День эскимо; именно 24 января 1921 г. Eskimo Pie был запатентован в США
- 24 января 1848 г. Джеймс Маршалл, один из строителей мельницы, принадлежавшей Джону Саттеру, нашёл там золото; так началась калифорнийская золотая лихорадка, продлившаяся до 1855 года
- 24 января 1895 г. норвежская экспедиция Карстена Борхгревинка впервые достоверно высадилась в Антарктиде (хотя к шельфовым ледникам подходили ещё в 1820 г. Беллинсгаузен и Лазарев)
- 24 января 1935 г. Gottfried Krueger Brewing Company первой в мире выпустила в широкую продажу баночное пиво: Krueger's Cream Ale и Krueger's Finest Beer
- 24 января 1972 г. ловцы креветок обнаружили на острове Гуам капрала Сёити Ёкои, который всё ещё продолжал вторую мировую войну; ступив на землю Японии, Ёкои сказал: «Мне мучительно стыдно, что я вернулся живым»
- 24 января 1984 г. был выпущен первый персональный компьютер Apple Macintosh; знаменитый рекламный ролик Ридли Скотта появился на два дня раньше, 22 января

# Что такое машинное обучение

---

# Первые мысли об искусственном интеллекте

- Гефест создавал себе роботов–андроидов, например, гигантского человекоподобного робота Талоса.
- Пигмалион оживлял Галатею.
- Иегова и Аллах — куски глины.
- Особо мудрые раввины могли создавать големов.
- Фома Аквинский изготовил искусственную говорящую голову (чем очень расстроил Альберта Великого).
- Начиная с доктора Франкенштейна, дальше AI в литературе появляется постоянно...

- AI как наука начался с *теста Тьюринга* (1950).
- Компьютер должен успешно выдать себя за человека в (письменном) диалоге между судьёй, человеком и компьютером.
- Правда, исходная формулировка была несколько тоньше и интереснее...

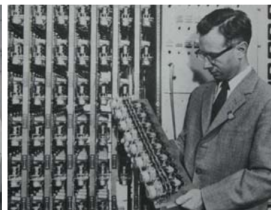
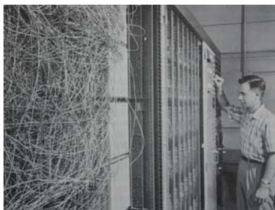
- Здесь уже очевидно, сколько всего надо, чтобы сделать AI:
  - обработка естественного языка;
  - представление знаний;
  - выводы из полученных знаний;
  - обучение на опыте (собственно machine learning).

- Термин AI и формулировки основных задач появились в 1956 на семинаре в Дартмуте.
- Его организовали Джон Маккарти (John McCarthy), Марвин Мински (Marvin Minsky), Клод Шеннон (Claude Shannon) и Натаниэль Рочестер (Nathaniel Rochester).
- Это была, наверное, самая амбициозная грантозаявка в истории информатики.

*Мы предлагаем исследование искусственного интеллекта сроком в 2 месяца с участием 10 человек летом 1956 года в Дартмутском колледже, ГанOVER, Нью-Гемпшир. Исследование основано на предположении, что всякий аспект обучения или любое другое свойство интеллекта может в принципе быть столь точно описано, что машина сможет его симулировать. Мы попытаемся понять, как обучить машины использовать естественные языки, формировать абстракции и концепции, решать задачи, сейчас подвластные только людям, и улучшать самих себя. Мы считаем, что существенное продвижение в одной или более из этих проблем вполне возможно, если специально подобранная группа учёных будет работать над этим в течение лета.*

## 1956-1960: большие надежды

- Оптимистическое время. Казалось, что ещё немного, ещё чуть-чуть...
- Allen Newell, Herbert Simon: *Logic Theorist*.
  - Программа для логического вывода.
  - Смогла передоказать большую часть *Principia Mathematica*, кое-где даже изящнее, чем сами Рассел с Уайтхедом.
- Rosenblatt, 1958: перцептрон (один искусственный нейрон)

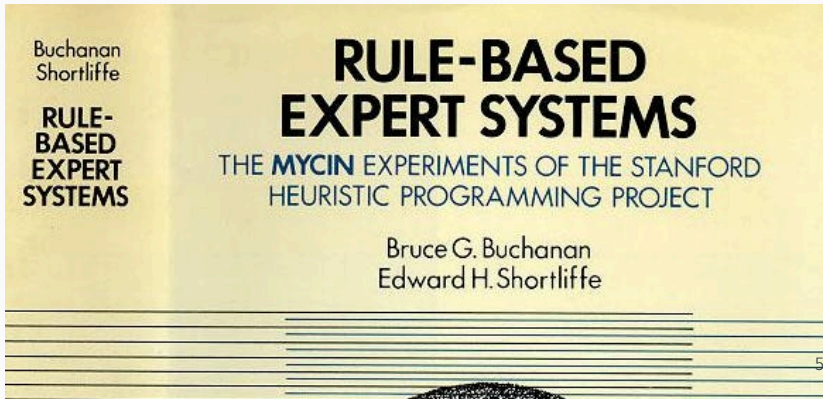




- Оптимистическое время. Казалось, что ещё немного, ещё чуть-чуть...
- General Problem Solver – программа, которая пыталась думать как человек;
- Много программ, которые умели делать некоторые ограниченные вещи (microworlds):
  - Analogy (IQ-тесты на «выберите лишнее»);
  - Student (алгебраические словесные задачи);
  - Blocks World (переставляла 3D-блоки).

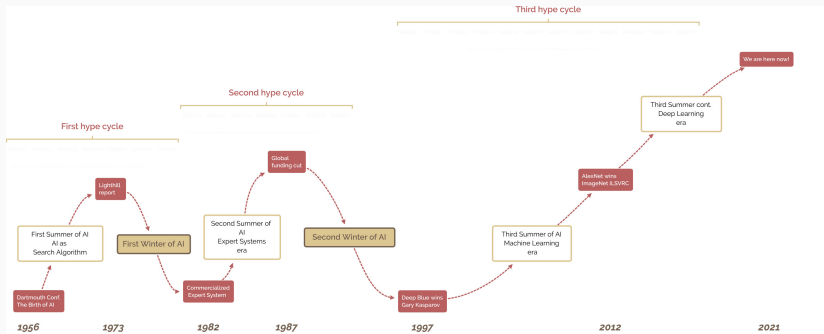
## 1970-e: knowledge-based systems

- Суть: накопить достаточно большой набор правил и знаний о предметной области, затем делать выводы.
- Первый успех: MYCIN – диагностика инфекций крови:
  - около 450 правил;
  - результаты как у опытного врача и существенно лучше, чем у начинающих врачей.



# 1980-е: коммерческие применения; индустрия AI

- Началось внедрение; Первый AI-отдел был в компании DEC (Digital Equipment Corporation).
- Утверждают, что к 1986 году он сэкономил DEC \$10 млн. в год.
- Бум закончился к концу 80-х, когда многие компании не смогли оправдать завышенных ожиданий.



- В последние десятилетия основной акцент сместился на машинное обучение и поиск закономерностей в данных.
- Особенно — с развитием интернета.
- Сейчас про AI в смысле трёх законов робототехники уже не очень вспоминают.
- // Но роботика — процветает и пользуется machine learning на каждом шагу.

# Определение

- Что значит — обучающаяся машина? Как определить «обучаемость»?

# Определение

- Что значит — обучающаяся машина? Как определить «обучаемость»?
- Определение из книги Митчелла: «Компьютерная программа обучается по мере накопления опыта относительно некоторого класса задач  $T$  и целевой функции  $P$ , если качество решения этих задач (относительно  $P$ ) улучшается с получением нового опыта».
- Определение очень (слишком?) общее.
- Какие конкретные примеры можно привести?

# Чем мы будем заниматься

- Мы будем рассматривать разные алгоритмы, которые решают ту ли иную задачу, причём решают тем лучше, чем больше начальных (тестовых) данных ему дадут.
- Сегодня мы поговорим об общей теории байесовского вывода, в которую обычно можно погрузить любой алгоритм машинного обучения.
- Но сначала – краткий обзор основных задач машинного обучения в целом.

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с учителем* (supervised learning) – обучение, в котором есть некоторое число примеров с правильными ответами:
  - *обучающая выборка* (training set) – набор примеров, каждый из которых состоит из *признаков* (features, attributes);
  - у примеров есть правильные ответы – переменная (response), которую мы предсказываем; она может быть категориальная (categorical), непрерывная или ординальная (ordinal);



# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с учителем* (supervised learning) – обучение, в котором есть некоторое число примеров с правильными ответами:
  - модель *обучается* на этой выборке (training phase, learning phase), затем может быть применена к новым примерам (test set);
  - главное – обучить модель, которая не только точки из обучающей выборки объясняет, но и на новые примеры хорошо *обобщается* (generalizes);
  - иначе – оверфиттинг (overfitting);

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с учителем* (supervised learning) – обучение, в котором есть некоторое число примеров с правильными ответами:
  - обычно нам дают просто обучающую выборку – как тогда проверить, обобщаются ли модели?
  - кросс-валидация – разбиваем выборку на тренировочный и валидационный набор (validation set);
  - перед тем как подавать что-то на вход, обычно делают предобработку, стараясь выделить из входных данных самые содержательные аспекты (feature extraction).

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с учителем (supervised learning)* – обучение, в котором есть некоторое число примеров с правильными ответами:
  - *классификация*: есть некоторый дискретный набор категорий (классов), и надо новые примеры определить в какой-нибудь класс;
    - классификация текстов по темам, спам-фильтр;
    - распознавание лиц/объектов/текста;

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с учителем* (supervised learning) – обучение, в котором есть некоторое число примеров с правильными ответами:
  - *регрессия*: есть некоторая неизвестная функция, и надо предсказать её значения на новых примерах:
    - инженерные приложения (предсказать температуру, положение робота, whatever);
    - финансы – предсказать цену акций;
  - то же плюс изменения во времени – например, распознавание речи.

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение без учителя* (unsupervised learning) – обучение, в котором нет правильных ответов, только данные:
  - *кластеризация* (clustering): надо разбить данные на заранее неизвестные классы по некоторой мере похожести:
    - выделить семейства генов из последовательностей нуклеотидов;
    - кластеризовать пользователей и персонализировать под них приложение;
    - кластеризовать масс-спектрометрическое изображение на части с разным составом;

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение без учителя* (unsupervised learning) – обучение, в котором нет правильных ответов, только данные:
  - *снижение размерности* (dimensionality reduction): данные имеют огромную размерность (очень много признаков), нужно уменьшить её, выделить самые информативные признаки, чтобы все вышеописанные алгоритмы смогли работать;
  - *дополнение матриц* (matrix completion): есть разреженная матрица, надо предсказать, что на недостающих позициях.
  - Часто даны правильные ответы для небольшой части данных – semi-supervised learning.

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *Обучение с подкреплением (reinforcement learning)* – обучение, в котором агент учится из собственных проб и ошибок:
  - *многорукие бандиты*: есть некоторый набор действий, каждое из которых ведёт к случайным результатам; нужно получить как можно больший доход;
  - *exploration vs. exploitation*: как и когда от исследования нового переходить к использованию того, что уже изучил;
  - *credit assignment*: конфетку дают в самом конце (выиграл партию), и надо как-то распределить эту конфетку по всем ходам, которые привели к победе.

# Основные задачи и понятия машинного обучения

- *активное обучение* (active learning) – как выбрать следующий (относительно дорогой) тест;
- *обучение ранжированию* (learning to rank) – ординальная регрессия, как породить упорядоченный список (интернет-поиск);
- *бустинг* (boosting) – как скомбинировать несколько слабых классификаторов так, чтобы получился хороший;
- *выбор модели* (model selection) – где провести черту между моделями с многими параметрами и с немногими.



- По сути машинное обучение – это наука о неопределённости: мы пытаемся вывести значения параметров из неполных данных, порождённых с шумом/ошибками, это заведомо статистическая задача.
- Кроме того, во всех методах и подходах очень пригодится метод, который мог бы не просто выдавать ответ, а ещё оценивать, насколько модель уверена в этом ответе, насколько модель хорошо описывает данные, как изменятся эти величины при дальнейших экспериментах и т.д.
- Поэтому центральную роль в машинном обучении играет теория вероятностей – и мы тоже будем её активно применять.

- Christopher M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer, 2007.
- Kevin Murphy, *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*, MIT Press, 2013.
- Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman, *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*, 2nd ed., Springer, 2009.

# Байесовский подход

---

# Основные определения

- Нам не понадобятся математические определения сигма-алгебры, вероятностной меры, борелевских множеств и т.п.
- Достаточно понимать, что бывают дискретные случайные величины (неотрицательные вероятности исходов в сумме дают единицу) и непрерывные случайные величины (интеграл неотрицательной функции плотности равен единице).

# Основные определения

- *Совместная вероятность* – вероятность одновременного наступления двух событий,  $p(x, y)$ ; маргинализация:

$$p(x) = \sum_y p(x, y).$$

- *Условная вероятность* – вероятность наступления одного события, если известно, что произошло другое,  $p(x | y)$ :

$$p(x, y) = p(x | y)p(y) = p(y | x)p(x).$$

- *Теорема Байеса* – из предыдущей формулы:

$$p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)} = \frac{p(x|y)p(y)}{\sum_{y'} p(x|y')p(y')}.$$

- *Независимость*:  $x$  и  $y$  независимы, если

$$p(x, y) = p(x)p(y).$$

## О болезнях и вероятностях

- Приведём классический пример из классической области применения статистики — медицины.
- Пусть некий тест на какую-нибудь болезнь имеет вероятность успеха 95% (т.е. 5% — вероятность как позитивной, так и негативной ошибки).
- Всего болезнь имеется у 1% респондентов (отложим на время то, что они разного возраста и профессий).
- Пусть некий человек получил позитивный результат теста (тест говорит, что он болен). С какой вероятностью он действительно болен?

## О болезнях и вероятностях

- Приведём классический пример из классической области применения статистики — медицины.
- Пусть некий тест на какую-нибудь болезнь имеет вероятность успеха 95% (т.е. 5% — вероятность как позитивной, так и негативной ошибки).
- Всего болезнь имеется у 1% респондентов (отложим на время то, что они разного возраста и профессий).
- Пусть некий человек получил позитивный результат теста (тест говорит, что он болен). С какой вероятностью он действительно болен?
- Ответ: 16%.

- Обозначим через  $t$  результат теста, через  $d$  — наличие болезни.
- $p(t = 1) = p(t = 1|d = 1)p(d = 1) + p(t = 1|d = 0)p(d = 0)$ .
- Используем теорему Байеса:

$$\begin{aligned} p(d = 1|t = 1) &= \\ &= \frac{p(t = 1|d = 1)p(d = 1)}{p(t = 1|d = 1)p(d = 1) + p(t = 1|d = 0)p(d = 0)} = \\ &= \frac{0.95 \times 0.01}{0.95 \times 0.01 + 0.05 \times 0.99} = 0.16. \end{aligned}$$



- Вот такие задачи составляют суть вероятностного вывода (probabilistic inference).
- Поскольку они обычно основаны на теореме Байеса, вывод часто называют байесовским (Bayesian inference).
- Но не только поэтому.

- Обычно в классической теории вероятностей, происходящей из физики, вероятность понимается как предел отношения количества определённого результата эксперимента к общему количеству экспериментов.
- Стандартный пример: бросание монетки.

- Мы можем рассуждать о том, «насколько вероятно» то, что
  - сборная России победит на чемпионате мира по футболу в 2022 году;
  - «Одиссею» написала женщина;
  - Керенский бежал за границу в женском платье;
  - ...
- Но о «стремящемся к бесконечности количестве экспериментов» говорить бессмысленно — эксперимент здесь ровно один.

- Здесь вероятности уже выступают как *степени доверия* (degrees of belief). Это байесовский подход к вероятностям (Томас Байес так понимал).
- К счастью, и те, и другие вероятности подчиняются одним и тем же законам; есть результаты о том, что вполне естественные аксиомы вероятностной логики тут же приводят к весьма узкому классу функций (Сох, 19).

## Прямые и обратные задачи

- Прямая задача: в урне лежат 10 шаров, из них 3 чёрных. Какова вероятность выбрать чёрный шар?
- Или: в урне лежат 10 шаров с номерами от 1 до 10. Какова вероятность того, что номера трёх последовательно выбранных шаров дадут в сумме 12?
- Обратная задача: перед нами две урны, в каждой по 10 шаров, но в одной 3 чёрных, а в другой — 6. Кто-то взял из какой-то урны шар, и он оказался чёрным. Насколько вероятно, что он брал шар из первой урны?
- Заметьте, что в обратной задаче вероятности сразу стали байесовскими (хоть здесь и можно переформулировать через частоты).

# Прямые и обратные задачи

- Иначе говоря, прямые задачи теории вероятностей описывают некий вероятностный процесс или модель и просят подсчитать ту или иную вероятность (т.е. фактически по модели предсказать поведение).
- Обратные задачи содержат *скрытые переменные* (в примере — номер урны, из которой брали шар). Они часто просят по известному поведению построить вероятностную модель.
- Задачи машинного обучения обычно являются задачами второй категории.

- Запишем теорему Байеса:

$$p(\theta|D) = \frac{p(\theta)p(D|\theta)}{p(D)}.$$

- Здесь  $p(\theta)$  — априорная вероятность (prior probability),  $p(D|\theta)$  — правдоподобие (likelihood),  $p(\theta|D)$  — апостериорная вероятность (posterior probability),  $p(D) = \int p(D | \theta)p(\theta)d\theta$  — вероятность данных (evidence).
- Вообще, функция правдоподобия имеет вид

$$a \mapsto p(y|x = a)$$

для некоторой случайной величины  $y$ .

- В статистике обычно ищут *гипотезу максимального правдоподобия* (maximum likelihood):

$$\theta_{ML} = \arg \max_{\theta} p(D | \theta).$$

- В байесовском подходе ищут *апостериорное распределение* (posterior)

$$p(\theta|D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

и, возможно, *максимальную апостериорную гипотезу* (maximum a posteriori):

$$\theta_{MAP} = \arg \max_{\theta} p(\theta | D) = \arg \max_{\theta} p(D | \theta)p(\theta).$$



## Постановка задачи

- Простая задача вывода: дана нечестная монетка, она подброшена  $N$  раз, имеется последовательность результатов падения монетки. Надо определить её «нечестность» и предсказать, чем она выпадет в следующий раз.
- Гипотеза максимального правдоподобия скажет, что вероятность решки равна числу выпавших решек, делённому на число экспериментов.

## Постановка задачи

- Простая задача вывода: дана нечестная монетка, она подброшена  $N$  раз, имеется последовательность результатов падения монетки. Надо определить её «нечестность» и предсказать, чем она выпадет в следующий раз.
- Гипотеза максимального правдоподобия скажет, что вероятность решки равна числу выпавших решек, делённому на число экспериментов.
- То есть если вы взяли незнакомую монетку, подбросили её один раз и она выпала решкой, вы теперь ожидаете, что она всегда будет выпадать только решкой, правильно?
- Странно получается... давайте поговорим об этом поподробнее.

# Байесовский вывод для монетки

---

- Итак, в статистике обычно ищут *гипотезу максимального правдоподобия* (maximum likelihood):

$$\theta_{ML} = \arg \max_{\theta} p(D | \theta).$$

- В байесовском подходе ищут *апостериорное распределение* (posterior)

$$p(\theta|D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

и, возможно, *максимальную апостериорную гипотезу* (maximum a posteriori):

$$\theta_{MAP} = \arg \max_{\theta} p(\theta | D) = \arg \max_{\theta} p(D | \theta)p(\theta).$$

## Постановка задачи

- Простая задача вывода: дана нечестная монетка, она подброшена  $N$  раз, имеется последовательность результатов падения монетки. Надо определить её «нечестность» и предсказать, чем она выпадет в следующий раз.

## Постановка задачи

- Если у нас есть вероятность  $p_h$  того, что монетка выпадет решкой (вероятность орла  $p_t = 1 - p_h$ ), то вероятность того, что выпадет последовательность  $s$ , которая содержит  $n_h$  решек и  $n_t$  орлов, равна

$$p(s|p_h) = p_h^{n_h}(1 - p_h)^{n_t}.$$

- Сделаем предположение: будем считать, что монетка выпадает равномерно, т.е. у нас нет априорного знания  $p_h$ .
- Теперь нужно использовать теорему Байеса и вычислить скрытые параметры.

## Пример применения теоремы Байеса

- Правдоподобие:  $p(s|p_h) = \frac{p(s|p_h)p(p_h)}{p(s)}$ .
- Здесь  $p(p_h)$  следует понимать как непрерывную случайную величину, сосредоточенную на интервале  $[0, 1]$ , коей она и является. Наше предположение о равномерном распределении в данном случае значит, что априорная вероятность  $p(p_h) = 1, p_h \in [0, 1]$  (т.е. априори мы не знаем, насколько нечестна монетка, и предполагаем это равновероятным). А  $p(s|p_h)$  мы уже знаем.
- Итого получается:

$$p(p_h|s) = \frac{p_h^{n_h}(1 - p_h)^{n_t}}{p(s)}.$$

## Пример применения теоремы Байеса

- Итого получается:

$$p(p_h|s) = \frac{p_h^{n_h}(1-p_h)^{n_t}}{p(s)}.$$

- $p(s)$  можно подсчитать как

$$\begin{aligned} p(s) &= \int_0^1 p_h^{n_h}(1-p_h)^{n_t} dp_h = \\ &= \frac{\Gamma(n_h+1)\Gamma(n_t+1)}{\Gamma(n_h+n_t+2)} = \frac{n_h!n_t!}{(n_h+n_t+1)!}, \end{aligned}$$

но найти  $\arg \max_{p_h} p(p_h | s) = \frac{n_h}{n_h+n_t}$  можно и без этого.



## Пример применения теоремы Байеса

- Итого получается:

$$p(p_h|s) = \frac{p_h^{n_h}(1-p_h)^{n_t}}{p(s)}.$$

- Но это ещё не всё. Чтобы предсказать следующий исход, надо найти  $p(\text{heads}|s)$ :

$$\begin{aligned} p(\text{heads}|s) &= \int_0^1 p(\text{heads}|p_h)p(p_h|s)dp_h = \\ &= \int_0^1 \frac{p_h^{n_h+1}(1-p_h)^{n_t}}{p(s)} dp_h = \\ &= \frac{(n_h+1)!n_t!}{(n_h+n_t+2)!} \cdot \frac{(n_h+n_t+1)!}{n_h!n_t!} = \frac{n_h+1}{n_h+n_t+2}. \end{aligned}$$

- Получили правило Лапласа.

## Пример применения теоремы Байеса

- Итого получается:

$$p(p_h|s) = \frac{p_h^{n_h}(1-p_h)^{n_t}}{p(s)}.$$

- Это была иллюстрация двух основных задач байесовского вывода:
  - найти апостериорное распределение на гипотезах/параметрах:

$$p(\theta | D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

(и/или найти гипотезу максимального правдоподобия  $\arg \max_{\theta} p(\theta | D)$ );

- найти апостериорное распределение исходов дальнейших экспериментов:

$$p(x | D) \propto \int_{\theta \in \Theta} p(x | \theta)p(D|\theta)p(\theta)d\theta.$$

Спасибо!

Спасибо за внимание!