Байесовский вывод грубой силой и интегрированием

Сергей Николенко

Машинное обучение — ИТМО, осень 2006

Outline

Суть

- Пусть нам, как обычно, нужно понять, какая гипотеза лучше других описывает имеющиеся данные.
- Предлагается алгоритм: перечислить все гипотезы и сравнить их правдоподобия (likelihoods).
- Мы сначала рассмотрим, как этот метод работает в дискретном булевском случае, а затем в непрерывном случае нормального распределения.

Байесовские сети

- Вспомним о байесовских сетях, которые мы изучали в прошлом семестре.
- Байесовская сеть — направленный граф, в котором стрелки показывают причинно-следственную связь.
- У нас были разработаны алгоритмы вывода на байесовских сетях, но сейчас мы будем действовать грубой силой.

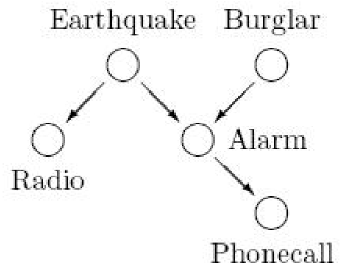
Байесовские сети: полный перебор

- Чтобы решить байесовскую сеть полным перебором, нужно представить её в виде большого произведения всех вероятностей, которые в ней участвуют, а затем *маргинализовать* по вероятностям, которые нам известны.

Пример: разработаем сеть

- Ситуация: Вася поехал на работу, и тут вдруг ему звонит сосед и говорит, что у его дома звонит сигнализация против грабителей.
- Вася уже было возвращается, но тут слышит по радио, что рядом с его домом было микроземлетрясение.
- Вася знает, что вполне возможно, что микроземлетрясение само собой вызвало срабатывание сигнализации.
- Какая должна быть модель такой ситуации?

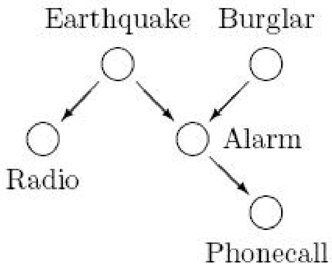
Пример



- Вот несложная сеть (даже без циклов), описывающая затруднительное положение Васи.
- Совместная вероятность всей сети:

$$p(b, e, a, p, r) = p(b)p(e)p(a|b, e)p(p|a)p(r|e).$$

Вероятности



- $p(b = 1) = \beta = 0.001$;
- $p(e = 1) = \epsilon = 0.001$;
- $p(p = 1|a = 0) = 0$,
  $p(p = 1|a = 1) = 1$;
- $p(r = 1|e = 0) = 0$,
  $p(r = 1|e = 1) = 1$.

Вероятности: Noisy-OR

- Осталось специфицировать распределение $p(a|b,e)$. Давайте предположим, что существует некая (малая) вероятность α_b того, что сигнализация сработает на грабителя, вероятность α_e того, что сигнализация сработает на землетрясение, и вероятность α_f просто ложного срабатывания. То есть на самом деле

$$\text{alarm} = \text{burglar} \vee \text{earthquake} \vee \text{false\_alarm},$$

но не точно логически, а с некоторыми вероятностями.

- Такая ситуация называется Noisy-OR (есть ещё аналогичный Noisy-AND).
- Какие тогда будут условные вероятности?

Вероятности: Noisy-OR

$$\begin{aligned}
p(a=1|b=0,e=0) &= \alpha_f,\\
p(a=1|b=1,e=0) &= 1-(1-\alpha_f)(1-\alpha_b),\\
p(a=1|b=0,e=1) &= 1-(1-\alpha_f)(1-\alpha_e),\\
p(a=1|b=1,e=1) &= 1-(1-\alpha_f)(1-\alpha_b)(1-\alpha_e).
\end{aligned}$$

Например, при $\alpha_f = 0.001$, $\alpha_e = 0.01$ и $\alpha_b = 0.99$

$$\begin{aligned}
p(a=1|b=0,e=0) &= 0.001,\\
p(a=1|b=1,e=0) &= 0.99001,\\
p(a=1|b=0,e=1) &= 0.01099,\\
p(a=1|b=1,e=1) &= 0.9901099.
\end{aligned}$$

Собственно вывод

- Теперь давайте проводить маргинализацию.
- В первой ситуации мы знаем, что нам позвонили, и хотим выяснить распределение вероятностей визита грабителя и землетрясения, т.е. найти $p(b, e|p = 1)$.
- Используем теорему Байеса:

$$p(b, e|p = 1) = \frac{p(p = 1|b, e)p(b)p(e)}{p(p = 1)}$$

и маргинализуем $p(p = 1|b, e)$ и $p(p = 1)$ из нашей сети:

$$p(b, e|p = 1) = \frac{\sum_a p(p = 1|a)p(a|b, e)p(b)p(e)}{\sum_{a,b,e} p(p = 1|a)p(a|b, e)p(b)p(e)}.$$

Вывод cont'd

- В итоге получается

$$\begin{aligned} p(b=0,e=0|p=1) &= 0.4993, \\ p(b=1,e=0|p=1) &= 0.4947, \\ p(b=0,e=1|p=1) &= 0.0055, \\ p(b=1,e=1|p=1) &= 0.0005. \end{aligned}$$

- То есть вероятность реального грабителя — около 50%.
- А если пересчитать с учётом события $r=1$, то получится

$$\begin{aligned} p(b=0|p=1,r=1) &= 0.92, \\ p(b=1|p=1,r=1) &= 0.08. \end{aligned}$$

- Вот поэтому Вася и может успокоиться.

Домашнее задание

Упражнение Разработать и обсчитать ещё один аналогичный пример, но такой, чтобы в нём фигурировал Noisy-AND.

Упражнение Реализовать программу, которая методом грубой силы обсчитывает байесовские сети доверия (перечисляя все возможные гипотезы.

Суть

- Пусть мы хотим найти скрытые параметры, например, нормального распределения методом полного перебора.
- Как это сделать, ведь параметры непрерывные, всех не переберёшь?

Суть

- Пусть мы хотим найти скрытые параметры, например, нормального распределения методом полного перебора.
- Как это сделать, ведь параметры непрерывные, всех не переберёшь?
- Просто сделать пространство дискретным, перебрать параметры с каким-то шагом.

Важное замечание

- Когда мы проводим байесовский вывод, у нас, кроме правдоподобия, должно быть ещё *априорное распределение* (prior distribution) по всем возможным значениям параметров.
- Мы будем подсчитывать только правдоподобия, т.е. предполагать, что априорное распределение равномерное на интервале, который мы дискретизуем.
- Позже мы рассмотрим более разумные априорные распределения.

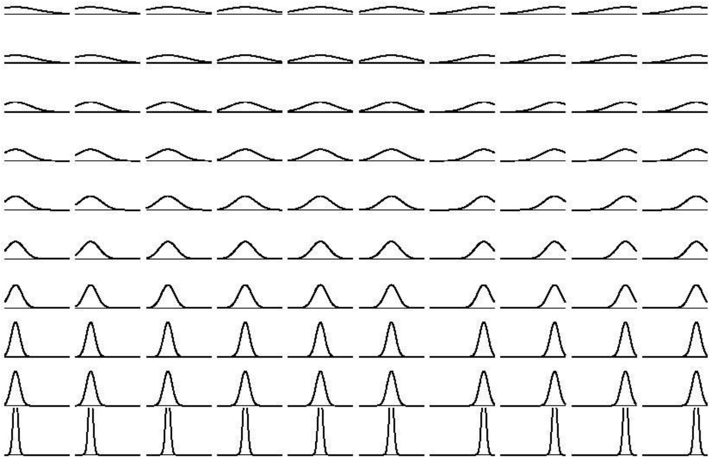
Нормальное распределение

- Возьмём нормальное распределение:

$$p(x|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}.$$

- У него два параметра, по которым можно перебирать.
- То есть алгоритм будет просто перебирать параметры μ и σ и подсчитывать функцию правдоподобия $p(\{x_i\}|\mu, \sigma)$.

Нормальное распределение



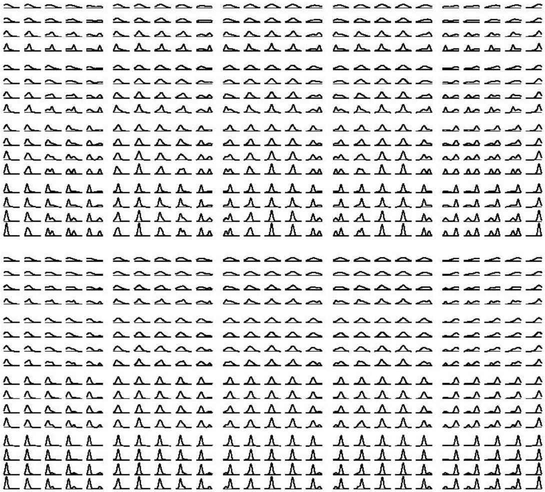
Смесь нормальных распределений

- Более сложный случай — когда распределение представляет собой смесь гауссианов, которые берутся с весами α_1 и α_2, $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$:

$$p(x|\mu_1, \sigma_1, \alpha_1, \mu_2, \sigma_2, \alpha_2) =$$
$$= \frac{\alpha_1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} + \frac{\alpha_2}{\sigma_2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}}.$$

- Тут уже... сколько параметров?

Смесь нормальных распределений



Домашнее задание

Упражнение Реализовать алгоритм, который находит скрытые параметры смеси заданного количества гауссианов грубой силой.

Outline

Маргинализация

- Вспомним, что маргинализация — это суммирование по некоторым переменным так, чтобы их из произведения изгнать.
- Маргинализация — основа байесовского вывода, главный (и самый вычислительно сложный) инструмент.
- Когда мы делали вывод грубой силой, мы проводили маргинализацию, суммируя по всем возможным значениям, а для непрерывных переменных рассматривали все возможные значения с некоторым шагом.
- Но ведь можно и просто взять определённый интеграл. Этим мы сейчас и займёмся.

Априорные распределения

- Мы сейчас определим пару априорных распределений, но пользоваться ими не будем. :)
- Когда мы хотим выполнять точную маргинализацию, зачастую полезно использовать так называемые *сопряжённые априорные распределения* (conjugate priors), потому что с ними вычисления упрощаются.
- Для параметра μ нормального распределения сопряжённое априорное распределение — это тоже нормальное распределение с параметрами μ_0, σ_μ.
- А для σ, точнее, для $\beta = 1/\sigma^2$, естественным априорным распределением будет гамма-распределение:

$$p(\beta|k_\beta, \theta_\beta) = \beta^{k_\beta - 1} \frac{e^{-\beta/\theta_\beta}}{\theta_\beta^{k_\beta}\Gamma(k_\beta)}, \quad \beta > 0.$$

Неправильные априорные распределения

- Но мы будем пользоваться не ими, а их предельными случаями.
- Для μ будем рассматривать $p(\mu) = const$; это совершенно неправильное распределение.
- Для σ будем рассматривать предел при $k_\beta \theta_\beta = 1$, $c_\beta \to 0$, т.е. плоское распределение $\ln \sigma$ (он же $\ln \beta$).
- Это и не распределения вовсе (не интегрируются); так и называются — improper priors. Но для простоты их часто используют.

Оценки параметров

- Пусть есть данные $D = \{x_i\}_{i=1}^n$. Тогда оценка среднего

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i / n,$$

а две возможные оценки дисперсии —

$$\sigma_n = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_n)^2}{n}}, \quad \sigma_{n-1} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_n)^2}{n-1}}.$$

- σ_n — оценка максимального правдоподобия, но biased: ожидание σ_N при условии σ не равно σ. У σ_{n-1} bias пропадает.

Оценки параметров

- Мы уже доказывали, что $(\bar{x}, \sigma_n)$ — гипотеза максимального правдоподобия.
- Теперь давайте попробуем найти апостериорное распределение μ при данном σ:

$$p(\mu|\{x_i\}_{i=1}^n, \sigma) = \frac{p(\{x_i\}_{i=1}^n|\mu, \sigma)p(\mu)}{p(\{x_i\}_{i=1}^n|\sigma)} e^{-n(\mu-\bar{x})^2/(2\sigma^2)}.$$

- То есть получили нормальное распределение на μ с параметрами $(\bar{x}, \sigma^2/n)$.

Маргинализация

- Теперь — собственно задача маргинализации.
- Пусть мы хотим найти наиболее вероятную σ при имеющихся данных.
- Это значит, что нам придётся маргинализировать μ из данных, когда мы будем подсчитывать

$$p(\sigma | \{x_i\}_{i=1}^n) = \frac{p(\{x_i\}_{i=1}^n | \sigma) p(\sigma)}{p(\{x_i\}_{i=1}^n)}.$$

Маргинализация

- Здесь мы, как и раньше, предполагаем, что $p(\mu) = 1/\sigma_\mu = const$. Тогда

$$p(\{x_i\}_{i=1}^n|\sigma) = \int p(\{x_i\}_{i=1}^n|\sigma,\mu)p(\mu)d\mu =$$

$$= \frac{1}{\sigma_\mu}\int \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\sum_{i=1}^n \frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}}d\mu,$$

и

$$\ln p(\{x_i\}_{i=1}^n|\sigma) = -n\ln(\sqrt{2\pi}\sigma) - \frac{\sum_{i=1}^n(\bar{x}-x_n)^2}{2\sigma^2} + \ln\frac{\sqrt{2\pi}\sigma/\sqrt{n}}{\sigma_\mu}.$$

- За счёт последнего члена (так называемого *фактора Оккама* — мы эти факторы ещё обсудим) максимум и сдвигается с σ_n на σ_{n-1}.

Краткий итог

- Мы вычислили один простой интеграл, которым маргинализовали одну из переменных.
- В этом суть точной маргинализации с непрерывными переменными: нужно проводить точное интегрирование (а как иначе...).
- Интеграл был такой простой, потому что мы предполагали очень простые (неправильные) априорные распределения.

Упражнение Провести такую же маргинализацию для настоящих сопряжённых априорных распределений.

Что будет дальше

- На следующей лекции наконец-то будут реально применяемые алгоритмы.
- Мы рассмотрим точную маргинализацию на решётках (trellises), причём не просто так, а в применении к задачам декодирования коррекционных кодов (кодов, исправляющих ошибки). Заодно и про сами коды поговорим.

Спасибо за внимание!

- Lecture notes, слайды и коды программ появятся на моей homepage:
  `http://logic.pdmi.ras.ru/~sergey/index.php?page=teaching`
- Присылайте любые замечания, коды программ на других языках, решения упражнений, новые численные примеры и прочее по адресам:
  `sergey@logic.pdmi.ras.ru`, `smartnik@inbox.ru`