Графические модели и байесовский вывод на них

Сергей Николенко

Казанский Федеральный Университет, 2014

Outline

1. Алгоритм передачи сообщений
   - Графические модели

В чём же проблема

- В предыдущих лекциях мы рассмотрели задачу байесовского вывода, ввели понятие сопряжённого априорного распределения, поняли, что наша основная задача – найти апостериорное распределение.
- Но если всё так просто – взяли интеграл, посчитали, всё получилось – о чём же здесь целая наука?
- Проблема заключается в том, что распределения, которые нас интересуют, обычно слишком сложные (слишком много переменных, сложные связи).
- Но, с другой стороны, в них есть дополнительная структура, которую можно использовать, структура в виде независимостей и условных независимостей некоторых переменных.

Графические модели с направленными графами

- Пример: рассмотрим распределение трёх переменных и запишем его по формуле полной вероятности:

$$p(x, y, z) = p(x \mid y, z)p(y \mid z)p(z).$$

- Теперь нарисуем граф, в котором стрелки указывают, какие условные вероятности заданы.
- Пока граф полносвязный, это нам ничего не даёт – любое распределение $p(x_1, \ldots, x_n)$ так можно переписать.
- Но если некоторых связей *нет*, это даёт нам важную информацию и упрощает жизнь.

Графические модели с направленными графами

- Рассмотрим направленный ациклический граф на вершинах $x_1, \ldots, x_k$ и зададим в каждой вершине распределения $p(x_i \mid \mathrm{pa}(x_i))$. Тогда будем говорить, что граф с этими локальными распределениями является графической моделью (байесовской сетью доверия) для совместного распределения вероятностей

$$p(x_1, \ldots, x_k) = \prod_{i=1}^{k} p(x_i \mid \mathrm{pa}(x_i)).$$

- Другими словами, если мы можем разложить большое совместное распределение в произведение локальных распределений, каждое из которых связывает мало переменных, это хорошо. :)

Графические модели с направленными графами

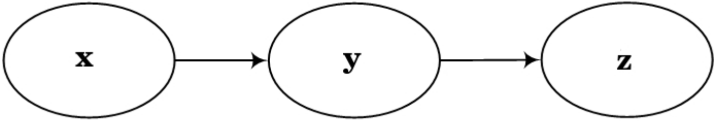
- Пример: обучение параметров распределения по нескольким экспериментам (плашки, можно нарисовать параметры явно):

$$p(x_1, \ldots, x_n, \theta) = p(\theta) \prod_{i=1}^{n} p(x_i \mid \theta).$$

- Что можно сказать о (не)зависимости случайных величин x_i и x_j?
- Задача вывода на графической модели: в некоторой части вершин значения наблюдаются, надо пересчитать распределения в других вершинах (подсчитать условные распределения). Например, из этой модели получатся и задача обучения параметров, и задача последующего предсказания.

Графические модели с направленными графами

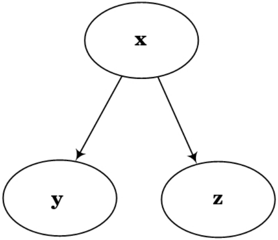
- d-разделимость – условная независимость, выраженная в структуре графа:
  - последовательная связь, $p(x, y, z) = p(x)p(y \mid x)p(z \mid y)$:
    - если y не наблюдается, то $p(x, z) = p(x) \int p(y \mid x)p(z \mid y)\mathrm{d}y = p(x)p(z \mid x)$;
    - если y наблюдается, то $p(x, z \mid y) = \frac{p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x)p(z|y)}{p(y)} = p(x \mid y)p(z \mid y)$, получили условную независимость.



Последовательная связь

Графические модели с направленными графами

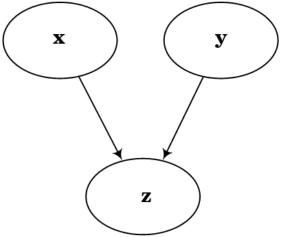
- расходящаяся связь, $p(x, y, z) = p(x)p(y \mid x)p(z \mid x)$, – так же:
  - если y не наблюдается, то $p(x, z) = p(x)p(z \mid x) \int p(y \mid x)\mathrm{d}y = p(x)p(z \mid x)$;
  - если y наблюдается, то $p(x, z \mid y) = \frac{p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x)p(z|x)}{p(y)} = p(x \mid y)p(z \mid y)$, получили условную независимость.



Расходящаяся связь

Графические модели с направленными графами

- Интересный случай – сходящаяся связь, $p(x, y, z) = p(x)p(y)p(z \mid x, y)$:
  - если z не наблюдается, то $p(x, y) = p(x)p(y)$, независимость есть;
  - если z наблюдается, то $p(x, y \mid z) = \frac{p(x,y,z)}{p(z)} = \frac{p(x)p(y)p(z|x,y)}{p(z)}$, и условной независимости нету.



Сходящаяся связь

Обобщение: если наблюдается хотя бы один из потомков z, уже может не быть независимости между x и y.

Графические модели с направленными графами

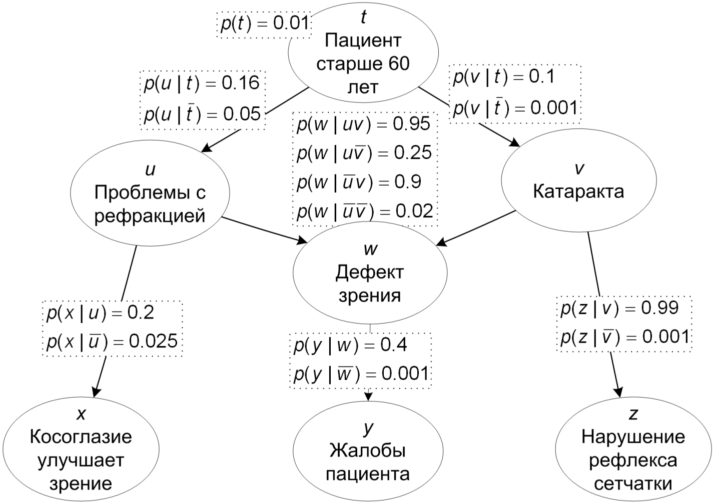
- Можно сформулировать, как структура графа соотносится с условной независимостью: в графе, где вершины из множества Z получили означивания (evidence), две ещё не означенные вершины x и y условно независимы при условии множества означенных вершин Z, если любой (ненаправленный) путь между x и y:
  - либо проходит через означенную вершину $z \in Z$ с последовательной или расходящейся связью;
  - либо проходит через вершину со сходящейся связью, в которой ни она, ни её потомки не получили означиваний.

Графические модели с направленными графами

- Можно сказать, что граф задаёт некоторое семейство распределений – не все распределения на вершинах графа будут соответствовать тем ограничениям по условной независимости, которые накладывает структура графа.
- Теорема (без доказательства): это семейство распределений в точности совпадает с семейством тех распределений, которые можно разложить в произведение

$$p(x_1, \ldots, x_k) = \prod_{i=1}^{k} p(x_i \mid \mathrm{pa}(x_i)).$$

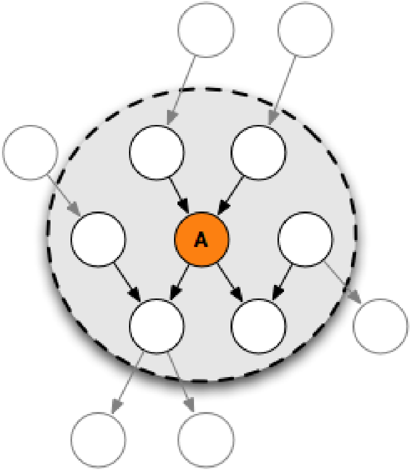
Пример байесовской сети



Markov blanket

- Интересный вопрос: какие вершины нужно означить, чтобы наверняка «отрезать» одну вершину (Markov blanket)?
- Иначе говоря, для какого минимального множества вершин X $p(x_i \mid x_{j \neq i}) = p(x_i \mid X)$?

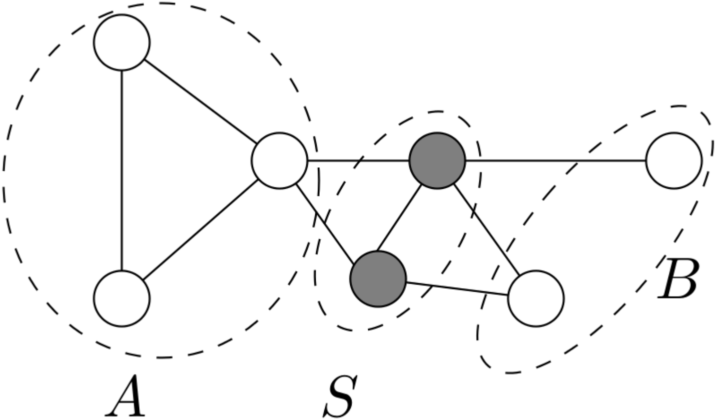
Markov blanket



Графические модели с ненаправленными графами

- Можно сделать и так, чтобы условие независимости было (более) локальным.
- Для этого нужно задавать модели ненаправленными графами. В них условие совсем естественное: множество вершин X условно независимо от множества вершин Y при условии множества вершин Z, если любой путь от X к Y проходит через Z.
- В частности, очевидно, $p(x_i, x_j \mid x_{k\neq i,j}) = p(x_i \mid x_{k\neq i,j})p(x_j \mid x_{k\neq i,j})$ тогда и только тогда, когда x_i и x_j не соединены ребром.
- Такие модели называются *марковскими сетями* (Markov random fields).

Условная независимость в ненаправленных моделях



Графические модели с ненаправленными графами

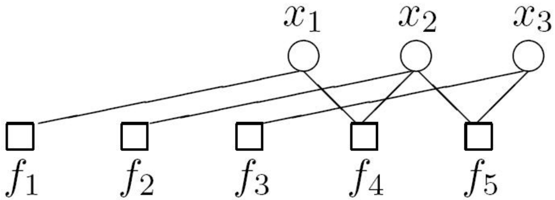
- Поэтому в ненаправленных моделях локальные распределения соответствуют кликам в графе, и факторизация получается в виде
$$p(x_1, \ldots, x_k) = \frac{1}{Z} \prod \psi_C(x_C),$$
где C – максимальные клики, ψ_C – неотрицательные функции (*потенциалы*), а Z – нормировочная константа (partition function).
- Поскольку $\psi_C \geq 0$, их обычно представляют как экспоненты:
$$\psi_C(x_C) = \exp\left(-E_C(x_C)\right),$$
E_C – функции энергии, они суммируются в полную энергию системы (это всё похоже на статистическую физику, отсюда и терминология).

Графические модели с ненаправленными графами

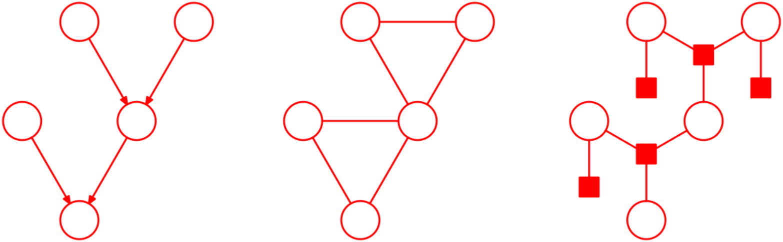
- Интересный факт: назовём *идеальной картой* (perfect map) распределения D графическую модель G, если все условные независимости, присутствующие в D, отображены в G, и наоборот (ничего лишнего). Тогда идеальные карты в виде направленных моделей существуют не у всех распределений, в виде ненаправленных тоже не у всех, и эти множества существенно различаются (бывают распределения, которые нельзя идеально выразить направленной моделью, но можно ненаправленной, и наоборот).

Фактор-графы

- Важная для вывода модификация – *фактор-граф* (можно построить и по направленной модели, и по ненаправленной).
- Фактор-граф – двудольный граф функций и переменных.
- Функция, соответствующая графу, – произведение всех входящих в него функций (т.е. то самое разложение и есть).
- Пример: $p(x_1, x_2, x_3) = f_1(x_1) f_2(x_2) f_3(x_3) f_4(x_1, x_2) f_5(x_2, x_3)$.



Три представления



Функция в общем виде

- Чтобы поставить задачу в общем виде, рассмотрим функцию
$$p^*(X) = \prod_{j=1}^{m} f_j(X_j),$$
где $X = \{x_i\}_{i=1}^{n}$, $X_j \subseteq X$.
- Т.е. мы рассматриваем функцию, которая раскладывается в произведение нескольких других функций.

Задачи

- Задача нормализации: найти $Z = \sum_X \prod_{j=1}^m f_j(X_j)$.
- Задача маргинализации: найти

$$p_i^*(x_i) = \sum_{k \neq i} p^*(X).$$

  Также может понадобиться, например, $p_{i_1 i_2}$, но реже.
- Поиск гипотезы максимального правдоподобия:

$$\mathbf{x}^* = \arg\max_X p(X).$$

Задачи

- Все эти задачи NP-трудные.
- То есть, если мир не рухнет, сложность их решения в худшем случае возрастает экспоненциально.
- Но можно решить некоторые частные случаи.

Пример

- Давайте начнём с графа в виде (ненаправленной) цепи:

$$p(x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{Z}\psi_{1,2}(x_1, x_2) \ldots \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n).$$

- Мы хотим найти

$$p(x_k) = \sum_{x_1} \ldots \sum_{x_{k-1}} \sum_{x_{k+1}} \ldots \sum_{x_n} p(x_1, \ldots, x_n).$$

Пример

- Очевидно, тут можно много чего упростить; например, справа налево:

$$\sum_{x_n} p(x_1, \ldots, x_n) =$$

$$= \frac{1}{Z} \psi_{1,2}(x_1, x_2) \ldots \psi_{n-2,n-1}(x_{n-2}, x_{n-1}) \sum_{x_n} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n).$$

- Эту сумму можно вычислить отдельно и продолжать в том же духе справа налево, потом аналогично слева направо.

Пример

- В итоге процесс сойдётся на узле x_k, куда придут два «сообщения»: слева

$$\mu_\alpha(x_k) = \sum_{x_{k-1}} \psi_{k-1,k}(x_{k-1}, x_k) \left[\ldots \sum_{x_2} \psi_{2,3}(x_2, x_3) \left[\sum_{x_1} \psi_{1,2}(x_1, x_2) \right] \ldots \right],$$

справа

$$\mu_\beta(x_k) = \sum_{x_{k+1}} \psi_{k,k+1}(x_k, x_{k+1}) \left[\ldots \left[\sum_{x_n} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) \right] \ldots \right].$$

- Каждую частичную сумму можно рассматривать как «сообщение» от узла к своему соседу, причём это сообщение – функция от соседа.

Thank you!

Спасибо за внимание!