

ВВЕДЕНИЕ В БАЙЕСОВСКИЙ ВЫВОД

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

01 сентября 2017 г.

Random facts:

- 1 сентября 1938 г. в «Правде» был впервые опубликован лозунг «За Родину! За Сталина!»
- 1 сентября 1939 г. Германия и Словакия вторглись в Польшу, начав тем самым вторую мировую войну в Европе; в тот же день в *Physical Review* вышла статья Роберта Оппенгеймера и Хартланда Снайдера, первая статья о механизме формирования чёрных дыр

БАЙЕСОВСКИЙ ПОДХОД

- 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).

- *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

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

- 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?

- 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 2018 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).

- 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).

- 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

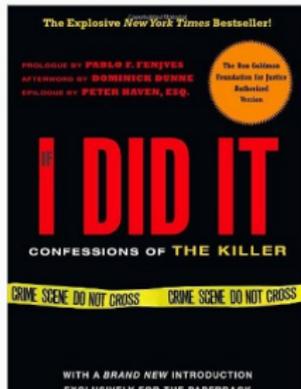
- Простая задача вывода: дана нечестная монетка, она подброшена N раз, имеется последовательность результатов падения монетки. Надо определить её «нечестность» и предсказать, чем она выпадет в следующий раз.
- Гипотеза максимального правдоподобия скажет, что вероятность решки равна числу выпавших решек,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

1. У моего знакомого два ребёнка. Будем предполагать, что пол ребёнка выбирается независимо и равновероятно, с вероятностью $\frac{1}{2}$. Две постановки вопроса:
 - (1) я спросил, есть ли у него мальчики, и он ответил «да»; какова вероятность того, что один из детей – девочка?
 - (2) я встретил одного из его детей, и это мальчик; какова вероятность того, что второй ребёнок – девочка?

2. Произошло убийство. На месте убийства найдена кровь, которая явно принадлежит убийце. Кровь принадлежит редкой группе, которая присутствует у 1% населения, в том числе у подсудимого.
- (1) Прокурор говорит: «Шанс, что у подсудимого была бы именно такая группа крови, если бы он был невиновен – всего 1%; значит, с вероятностью 99% он виновен». В чём не прав прокурор?
 - (2) Адвокат говорит: «В городе живёт миллион человек, то есть у 10000 из них такая группа крови. Значит, всё, что говорит нам эта кровь – это что подсудимый совершил убийство с вероятностью 0.01%; никакое это не доказательство». В чём не прав адвокат?

3. Реальные случаи.

- (1) Прокурор указал, что O.J. Simpson уже бил жену в прошлом. Адвокат ответил: «Убивают только одну из 2500 женщин, подвергавшихся семейному насилию, так что это вообще нерелевантно». Суд согласился с адвокатом; верно ли это рассуждение?
- (2) У Sally Clark погибли два младенца; прокурор указал, что вероятность двух случаев SIDS в одной семье, которую он получил из статистики одиночных случаев, — около 1 из 73 миллионов; в чём он не прав?



БАЙЕСОВСКИЙ ВЫВОД ДЛЯ МОНЕТКИ

- Мы остановились на том, что 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):

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

- 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.

- 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.

- Правдоподобие: $p(p_h|s) = \frac{p(s|p_h)p(p_h)}{p(s)}$.
- 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:

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

- 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.

- 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.

- 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:

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

- Напоминаю, что основная наша задача – как обучить параметры распределения и/или предсказать следующие его точки по имеющимся данным.
- В байесовском выводе участвуют:
 - $p(x | \theta)$ – правдоподобие данных;
 - $p(\theta)$ – априорное распределение;
 - $p(x) = \int_{\Theta} p(x | \theta)p(\theta)d\theta$ – маргинальное правдоподобие;
 - $p(\theta | x) = \frac{p(x|\theta)p(\theta)}{p(x)}$ – апостериорное распределение;
 - $p(x' | x) = \int_{\Theta} p(x' | \theta)p(\theta | x)d\theta$ – предсказание нового x' .
- Задача обычно в том, чтобы найти $p(\theta | x)$ и/или $p(x' | x)$.

- Когда мы проводим байесовский вывод, у нас, кроме правдоподобия, должно быть ещё *априорное распределение* (prior distribution) по всем возможным значениям параметров.
- Мы раньше к ним специально не присматривались, но они очень важны.
- Задача байесовского вывода – как подсчитать $p(\theta | x)$ и/или $p(x' | x)$.
- Но чтобы это сделать, сначала надо выбрать $p(\theta)$. Как выбирать априорные распределения?

- Разумная цель: давайте будем выбирать распределения так, чтобы они оставались такими же и *a posteriori*.
- До начала вывода есть априорное распределение $p(\theta)$.
- После него есть какое-то новое апостериорное распределение $p(\theta | x)$.
- Я хочу, чтобы $p(\theta | x)$ тоже имело тот же вид, что и $p(\theta)$, просто с другими параметрами.

- Не слишком формальное определение: семейство распределений $p(\theta | \alpha)$ называется семейством *сопряжённых априорных распределений* для семейства правдоподобий $p(x | \theta)$, если после умножения на правдоподобие апостериорное распределение $p(\theta | x, \alpha)$ остаётся в том же семействе: $p(\theta | x, \alpha) = p(\theta | \alpha')$.
- α называются *гиперпараметрами* (hyperparameters), это «параметры распределения параметров».
- Тривиальный пример: семейство всех распределений будет сопряжённым чему угодно, но это не очень интересно.

- Разумеется, вид хорошего априорного распределения зависит от вида распределения собственно данных, $p(x | \theta)$.
- Сопряжённые априорные распределения подсчитаны для многих распределений, мы приведём несколько примеров.

- Каким будет сопряжённое априорное распределение для бросания нечестной монетки (испытаний Бернулли)?
- Ответ: это будет бета-распределение; плотность распределения нечестности монетки θ

$$p(\theta \mid \alpha, \beta) = \frac{\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}.$$

- Плотность распределения нечестности монетки θ

$$p(\theta | \alpha, \beta) = \frac{\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}.$$

- Тогда, если мы посэмплируем монетку, получив s орлов и f решек, получится

$$p(s, f | \theta) = \binom{s+f}{s} \theta^s (1-\theta)^f, \text{ и}$$

$$\begin{aligned} p(\theta | s, f) &= \frac{\binom{s+f}{s} \theta^{s+\alpha-1} (1-\theta)^{f+\beta-1} / B(\alpha, \beta)}{\int_0^1 \binom{s+f}{s} x^{s+\alpha-1} (1-x)^{f+\beta-1} / B(\alpha, \beta) dx} = \\ &= \frac{\theta^{s+\alpha-1} (1-\theta)^{f+\beta-1}}{B(s+\alpha, f+\beta)}. \end{aligned}$$

- Итого получается, что сопряжённое априорное распределение для параметра нечестной монетки θ – это

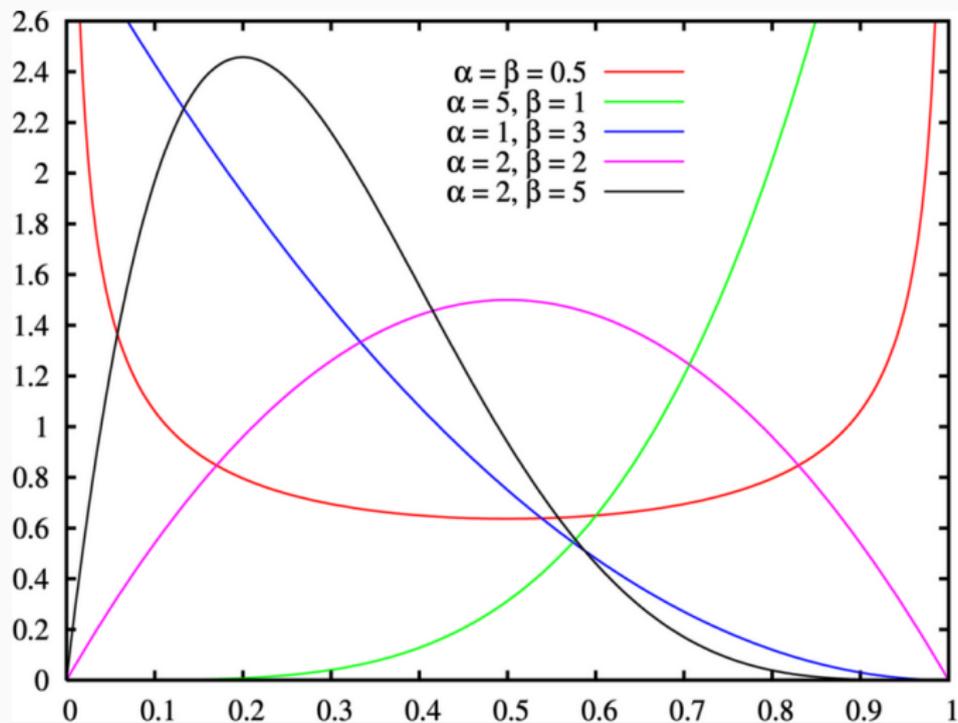
$$p(\theta \mid \alpha, \beta) \propto \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}.$$

- После получения новых данных с s орлами и f решками гиперпараметры меняются на

$$p(\theta \mid s + \alpha, f + \beta) \propto \theta^{s+\alpha-1}(1-\theta)^{f+\beta-1}.$$

- На этом этапе можно забыть про сложные формулы и выводы, получилось очень простое правило обучения (под обучением теперь понимается изменение гиперпараметров).

БЕТА--РАСПРЕДЕЛЕНИЕ



- Простое обобщение: рассмотрим мультиномиальное распределение с n испытаниями, k категориями и по x_i экспериментов дали категорию i .
- Параметры θ_i показывают вероятность попасть в категорию i :

$$p(x | \theta) = \binom{n}{x_1, \dots, x_n} \theta_1^{x_1} \theta_2^{x_2} \dots \theta_k^{x_k}.$$

- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

$$p(\theta | \alpha) \propto \theta_1^{\alpha_1 - 1} \theta_2^{\alpha_2 - 1} \dots \theta_k^{\alpha_k - 1}.$$

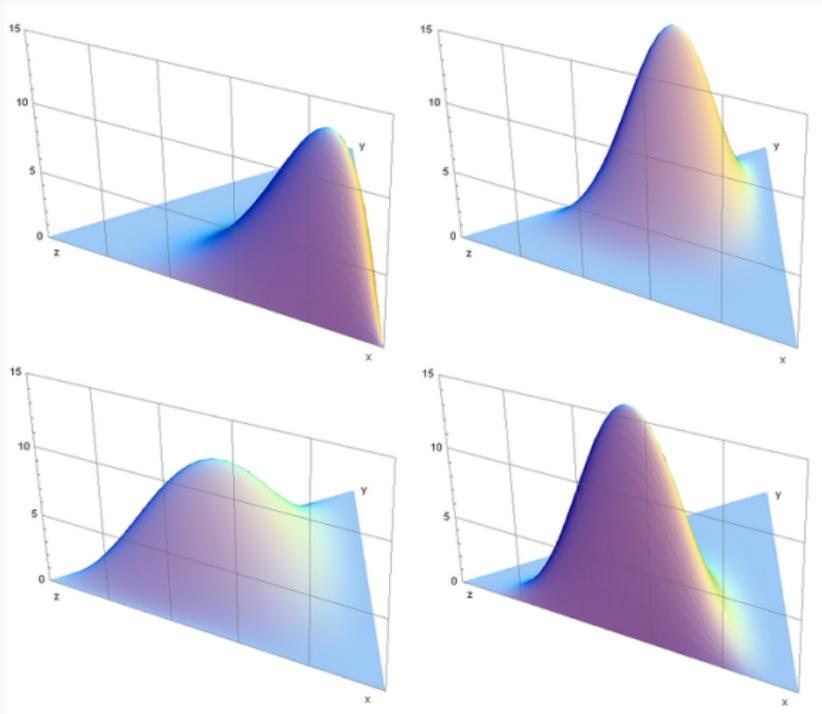
- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

$$p(\theta | \alpha) \propto \theta_1^{\alpha_1-1} \theta_2^{\alpha_2-1} \dots \theta_k^{\alpha_k-1}.$$

Упражнение. Докажите, что при получении данных x_1, \dots, x_k гиперпараметры изменятся на

$$p(\theta | x, \alpha) = p(\theta | x + \alpha) \propto \theta_1^{x_1+\alpha_1-1} \theta_2^{x_2+\alpha_2-1} \dots \theta_k^{x_k+\alpha_k-1}.$$

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИРИХЛЕ



Thank you for your attention!