АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

Сергей Николенко

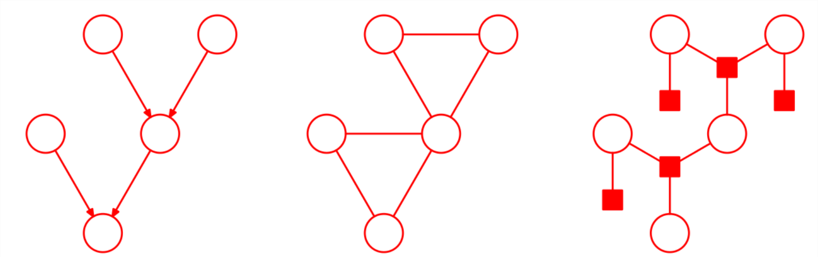
СПбГУ — Санкт-Петербург
21 февраля 2018 г.

Random facts:

- 21 февраля 1828 г. в городе New Echota вышел первый номер газеты Cherokee Phoenix, которая выходила в том числе и на языке чероки
- 21 февраля 1848 г. из Лондона начал бродить по Европе Манифест коммунистической партии Карла Маркса и Фридриха Энгельса
- 21 февраля 1878 г. в Нью-Хейвене (Коннектикут) напечатали первый в истории телефонный справочник; на одной странице поместились все 50 номеров
- 21 февраля 1925 г. в Нью-Йорке вышел первый номер журнала The New Yorker

АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

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:

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

- 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

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

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

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

- 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

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

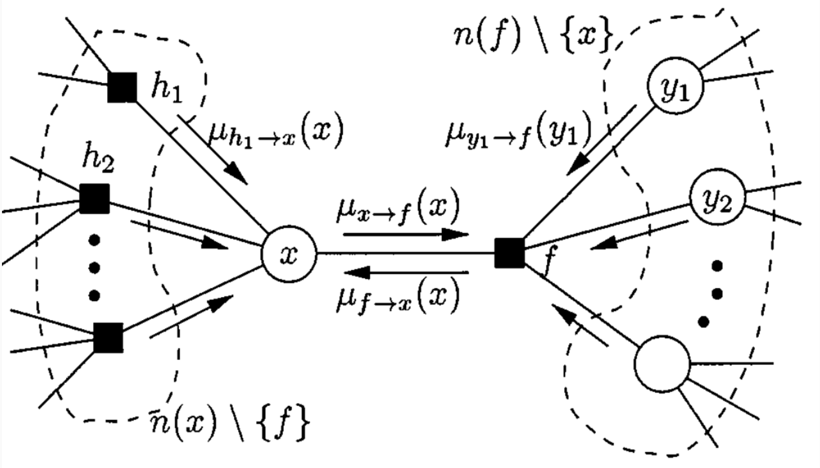
справа

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

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

- Чтобы обобщить, удобно рассмотреть опять фактор-граф.
- Предположим, что фактор-граф – дерево (если не дерево, так просто не сработает).
- Алгоритм передачи сообщений решает задачу маргинализации для функции вида $p(x_1, \ldots, x_n) = \prod_s f_s(X_s)$, заданной в виде фактор-графа.
- Передаём сообщения по направлению к нужному узлу от переменных к функциям и наоборот.

ПЕРЕДАЧА СООБЩЕНИЙ



- Чтобы найти $p(x_k)$, запишем $p(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{s \in \neq(x_k)} F_s(x_k, X_s)$, где X_s – переменные из поддерева с корнем в f_s. Тогда

$$p(x_k) = \sum_{x_{i \neq k}} p(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{s \in \neq(x_k)} \left[\sum_{X_s} F_s(x_k, X_s) \right] = \\ = \prod_{s \in \neq(x_k)} \mu_{f_s \to x_k}(x_k),$$

где $\mu_{f_s \to x_k}(x_k)$ – сообщения от соседних функций к переменной x_k.

АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

- Чтобы найти $\mu_{f_s \to x_k}(x_k)$, заметим, что $F_s(x_k, X_s)$ тоже можно разложить по соответствующему подграфу:

$$F_s(x_k, X_s) = f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} G_y(y, X_{s,y}),$$

  где Y_s – переменные, непосредственно связанные с f_s (кроме x_k), $X_{s,y}$ – соответствующие поддеревья.
- Итого получаем

$$\mu_{f_s \to x_k}(x_k) = \sum_{Y_s} f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} \left(\sum_{X_{s,y}} G_y(y, X_{s,y}) \right) = \\ = \sum_{Y_s} f_s(x_k, Y_s) \prod_{y \in Y_s} \mu_{y \to f_s}(y).$$

АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

- Можно аналогично подсчитать, что $\mu_{y \to f_s}(y) = \prod_{f \in \neq(y)\ f_s} \mu_{f \to y}(y)$.

- Итак, получился простой и понятный алгоритм:
  - как только узел получил сообщения от всех соседей, кроме одного, он сам начинает передавать сообщение в этого соседа;
  - сообщение по ребру между функцией и переменной является функцией от этой переменной;
  - узел-переменная x передаёт сообщение

$$\mu_{x \to f}(x) = \prod_{g \in \neq(x)\ f} \mu_{g \to x}(x);$$

  - узел-функция $f(x, Y)$ передаёт сообщение

$$\mu_{f \to x}(x) = \sum_{y \in Y} f(x, Y) \prod_{y \in Y} \mu_{y \to f}(y);$$

  - начальные сообщения в листьях $\mu_{x \to f}(x) = 1$, $\mu_{f \to x}(x) = f(x)$.

АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

- Когда сообщения придут из всех соседей в какую-то переменную x_k, можно будет подсчитать

$$p(x_k) = \prod_{f \in \neq(x_k)} \mu_{f \to x_k}(x_k).$$

- Когда сообщения придут из всех соседей в какой-то фактор $f_s(X_s)$, можно будет подсчитать совместное распределение

$$p(X_s) = f_s(X_s) \prod_{y \in \neq(f_s)} \mu_{y \to f_s}(y).$$

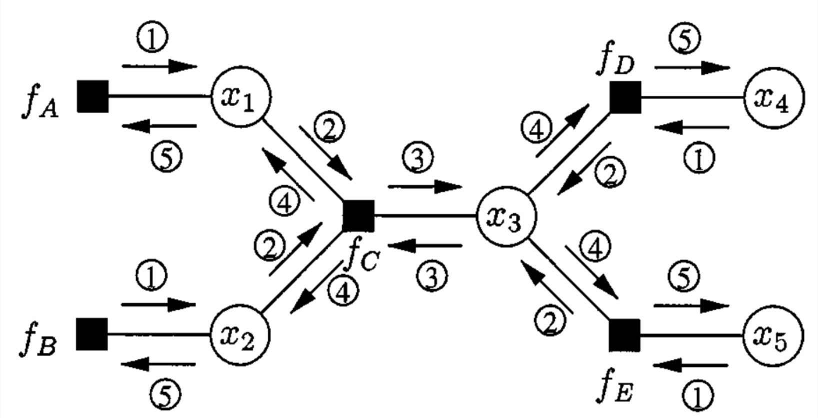
- За два прохода (по каждому ребру туда и обратно) можно будет подсчитать маргиналы во всех узлах.

АЛГОРИТМ ПЕРЕДАЧИ СООБЩЕНИЙ

- Это называется алгоритм sum-product, потому что сообщение вычисляется как

$$\mu_{f\to x}(x) = \sum_{y\in Y} f(x, Y) \prod_{y\in Y} \mu_{y\to f}(y).$$

- Задача максимизации $\arg\max_x p(x_1, \dots, x_n)$ решается так же, но алгоритмом max-sum: сумма заменяется на максимум, а произведение на сумму.



f_A
f_B
f_C
f_D
f_E
x_1
x_2
x_3
x_4
x_5
①
②
③
④
⑤

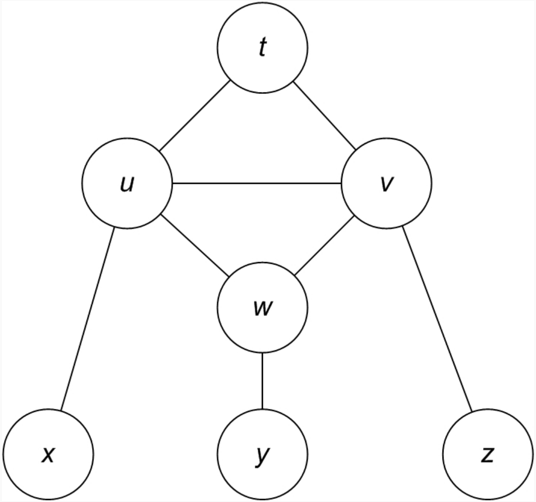
ТАК ЧТО ЖЕ ДЕЛАТЬ С БАЙЕСОВСКОЙ СЕТЬЮ?

Для модели не в виде фактор-графа надо просто представить её в виде фактор-графа тем или иным способом.

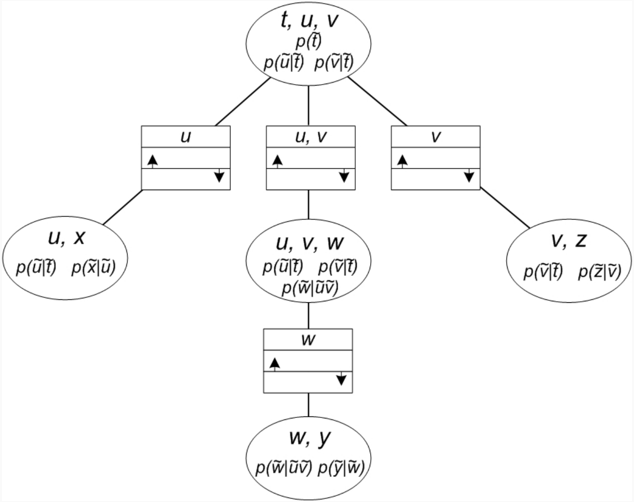
Для байесовской сети это может означать, что надо сначала сделать морализацию, а потом добавить факторы в явном виде.

ТАК ЧТО ЖЕ ДЕЛАТЬ С БАЙЕСОВСКОЙ СЕТЬЮ?

ТАК ЧТО ЖЕ ДЕЛАТЬ С БАЙЕСОВСКОЙ СЕТЬЮ?



ТАК ЧТО ЖЕ ДЕЛАТЬ С БАЙЕСОВСКОЙ СЕТЬЮ?



ПРИБЛИЖЁННЫЙ ВЫВОД

ПРИБЛИЖЁННЫЙ ВЫВОД

- Когда граф – дерево, и в каждом узле всё считается явно и аналитически, можно посчитать быстро и точно.
- Но что делать, когда зубная щётка недоступна?
- Могут быть две проблемы:
    1. сложная структура графа, с циклами;
    2. сложные факторы – результат маргинализации в отдельном узле неудобный.

суть

- Sum–product работает корректно, только если граф — дерево (ну, разве что скрестить пальцы и помолиться...).
- Что делать, когда граф содержит циклы?
- Нужно использовать деревья сочленений.

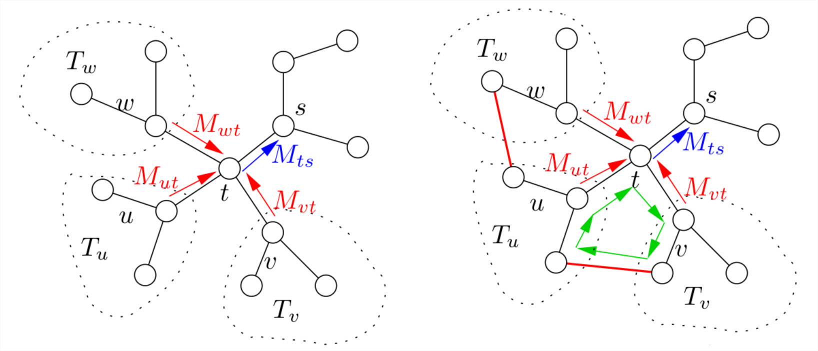
ДЕРЕВЬЯ СОЧЛЕНЕНИЙ --- НЕФОРМАЛЬНО

- Если цикл не сдаётся, его уничтожают, то есть заменяют весь цикл на одну вершину.
- Получается дерево, в котором уже можно работать обычным sum–product'ом; но при этом, конечно, замена нескольких вершин одной приводит к экспоненциальному раздуванию соответствующего фактора (множество значений соответствующей переменной должно содержать все комбинации значений исходных переменных).

ДРУГИЕ МЕТОДЫ

- Если цикл всё-таки большой, то есть хороший общий метод, который применяют, когда нельзя применять sum–product.
- Метод заключается в том, чтобы применять sum–product. :)
- Он работает довольно часто даже тогда, когда в принципе работать не обязан (когда есть циклы).

ПЕРЕДАЧА СООБЩЕНИЙ С ЦИКЛАМИ



- Если факторы простые, а структура сложная, можно приближать сложное распределение более простой формой, разрывая связи в графе: *вариационные приближения* (из матфизики).
- Т.е. надо будет выбрать распределение из некоторого более простого семейства, которое лучше всего приближает сложное распределение.
- «Похожесть» можно определить по расстоянию Кульбака–Лейблера

$$d(p, q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} \mathrm{d}x.$$

- Например: давайте искусственно разорвём связи, оставив только рёбра внутри подмножеств вершин X_i.
- Иначе говоря, будем предполагать, что любой фактор $q(Z)$ представляется в виде

$$q(Z) = \prod q_i(Z_i), \text{ где } Z_i = Z \cup X_i.$$

- Затем оптимизируем параметры, минимизируя расстояние между исходным распределением и таким факторизованным; это соответствует методу самосогласованного поля (mean field theory) в физике.
- Более подробно мы рассмотрим вариационные методы позже.

- Если структура простая, но сложные факторы (результат не представляется в виде распределения нужной формы), можно его приближать простыми распределениями. Если в нашем факторизованном распределении

$$p(\theta \mid D) = \frac{1}{p(D)} \prod_i f_i(\theta)$$

слишком сложные факторы f_i, мы хотим их заменить на какие-нибудь простые (из экспоненциального семейства, например, гауссианы):

$$q(\theta \mid D) = \frac{1}{Z} \prod_i \hat{f}_i(\theta).$$

- И тоже минимизировать расстояние Кульбака–Лейблера между p и q.

- Для одного фактора всё это очень просто было бы – посчитать среднее и дисперсию (moment matching).
- Для многих факторов надо приближать все $\hat{f}_i$ одновременно. Можно доказать (мы не будем), что это можно делать последовательно, приближая фактор за фактором и итерируя, пока не сойдётся.
- Таким образом, алгоритм Expectation Propagation на самом деле очень простой:
    1. запустить алгоритм передачи сообщений, но на каждом шаге вместо сообщения $\mu_{f_s \to x_k}(x_k)$ считать его приближение $\hat{\mu}_{f_s \to x_k}(x_k)$ из какого-нибудь простого семейства;
    2. повторять передачу сообщений, пока не сойдётся.

СПАСИБО!

Спасибо за внимание!