Априорные распределения

Сергей Николенко

Computer Science Club, Казань, 2014

Outline

1. Априорные распределения
   - Правило Лапласа
   - Сопряжённые априорные распределения
2. Проклятие размерности
   - Параметрические и непараметрические модели
   - Проклятие размерности

ML vs. MAP

- Мы остановились на том, что в статистике обычно ищут *гипотезу максимального правдоподобия* (maximum likelihood):

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

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

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

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

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

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

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

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

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

но найти $\arg\max_{p_h} p(p_h \mid s) = \frac{n_h}{n_h+n_t}$ 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 $p(\text{heads}|s)$:

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

- 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:
  1. найти апостериорное распределение на гипотезах/параметрах:

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

     (и/или найти гипотезу максимального правдоподобия $\arg\max_\theta p(\theta \mid D)$);
  2. найти апостериорное распределение исходов дальнейших экспериментов:

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

Напоминание

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

Априорные распределения

- 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 $p(\theta \mid x)$ и/или $p(x' \mid x)$.
- Но чтобы это сделать, сначала надо выбрать $p(\theta)$.

Субъективные и объективные априорные распределения

- Априорное распределение может быть
  - субъективным: поговорили с экспертами, поняли, что они говорят, выбрали $p(\theta)$;
  - объективным: априорное распределение берётся из имеющихся (имевшихся ранее) данных и получается тоже байесовскими методами.
- Про субъективные мне, в общем, больше нечего сказать, так что будем говорить об объективных.

Сопряжённые 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 $p(\theta \mid x)$.
- Я хочу, чтобы $p(\theta \mid x)$ тоже имело тот же вид, что и $p(\theta)$, просто с другими параметрами.

Сопряжённые априорные распределения

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

Сопряжённые априорные распределения

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

Испытания Бернулли

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

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

Испытания Бернулли

- Плотность распределения нечестности монетки θ

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

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

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

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

$$= \frac{\theta^{s+\alpha-1}(1-\theta)^{f+\beta-1}}{B(s+\alpha, f+\beta)}.$$

Испытания Бернулли

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

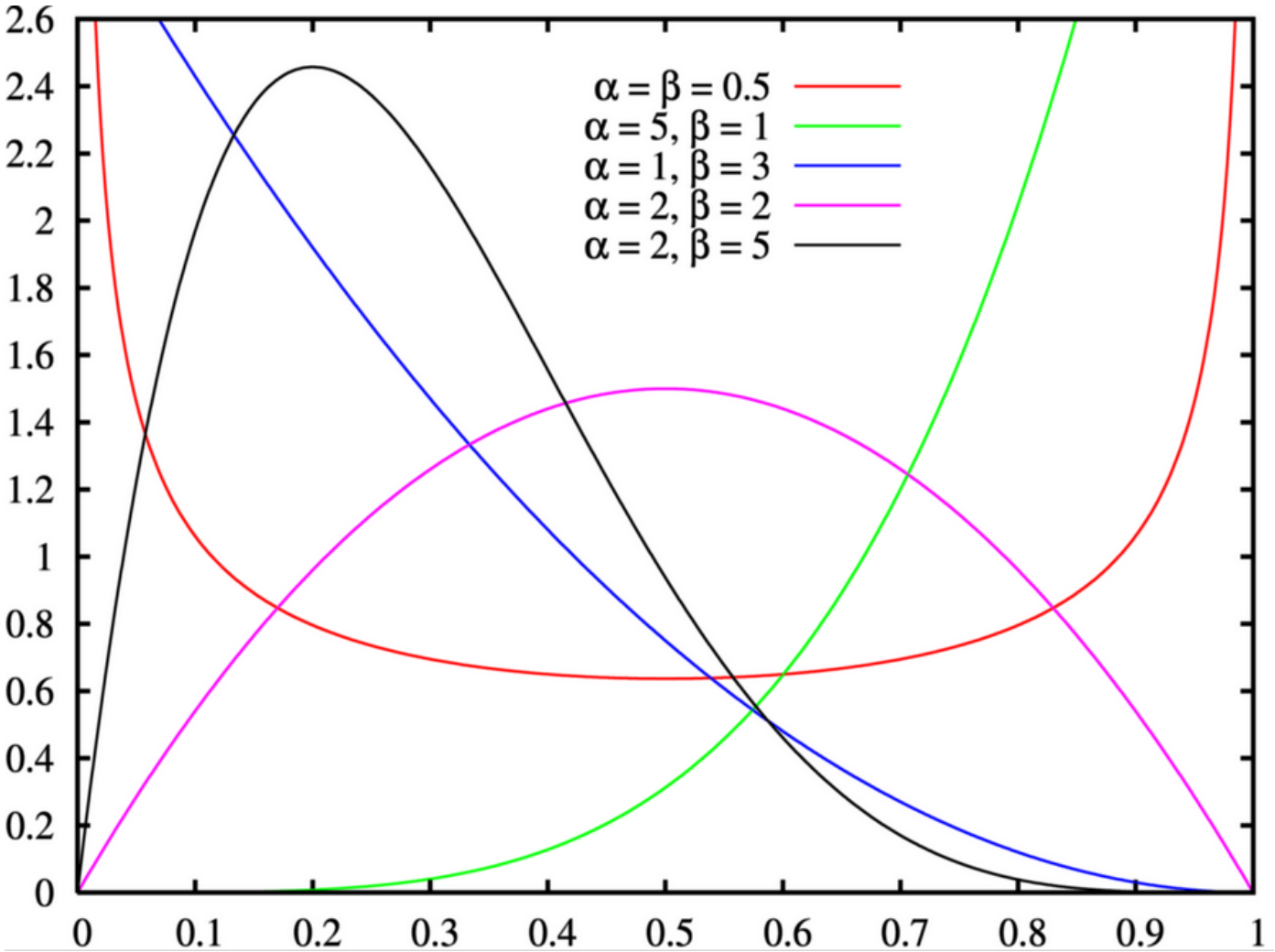
$$p(\theta \mid \alpha, \beta) \propto \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}.$$

- 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



Мультиномиальное 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:

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

- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

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

Мультиномиальное распределение

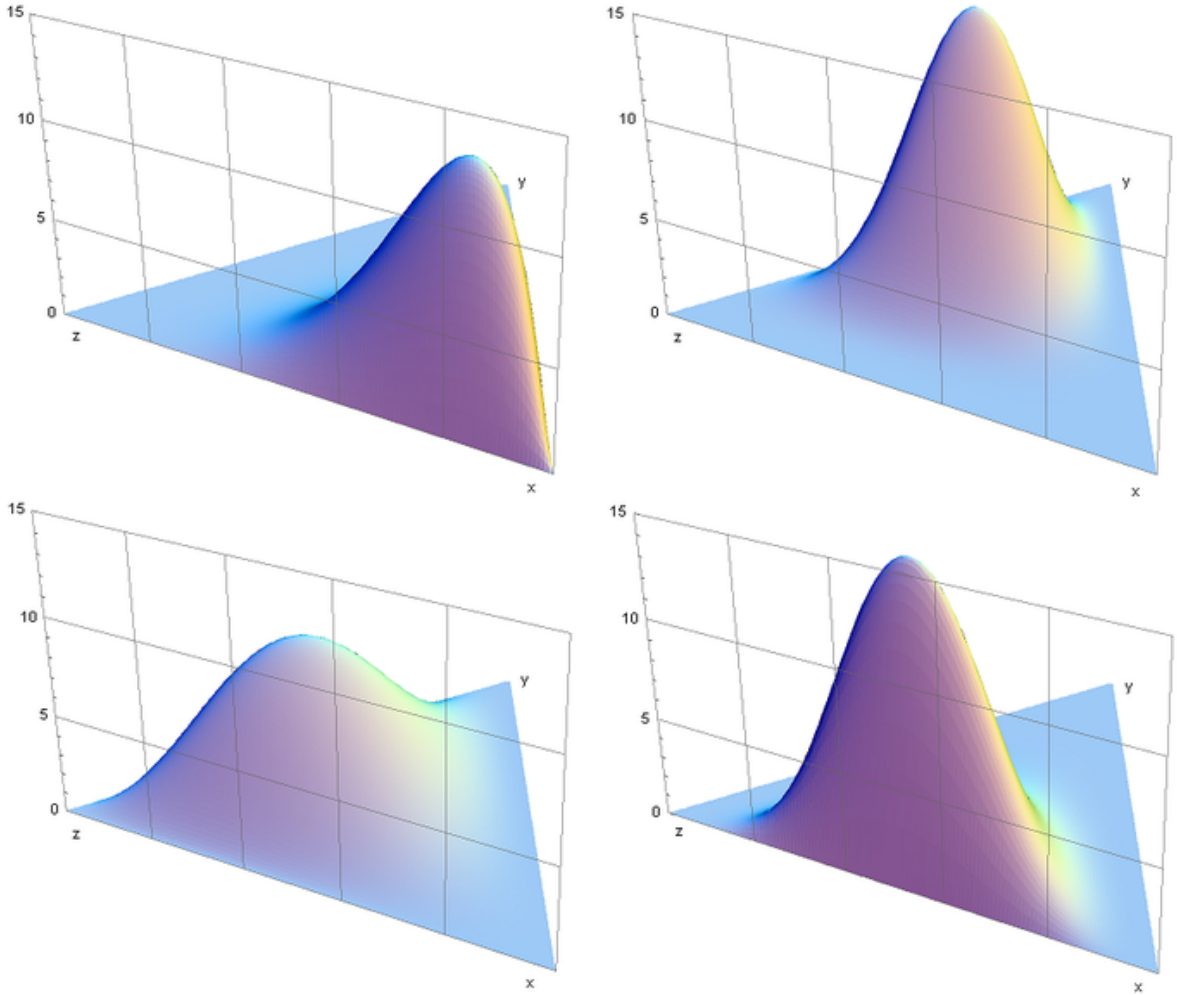
- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

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

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

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

Распределение Дирихле



Outline

1. Априорные распределения
   - Правило Лапласа
   - Сопряжённые априорные распределения
2. Проклятие размерности
   - Параметрические и непараметрические модели
   - Проклятие размерности

Параметрические и непараметрические модели

- Последнее замечание: модели бывают параметрические и непараметрические.
- Мы в основном будем заниматься моделями с фиксированным числом параметров, которые делают сильные предположения.
- Но есть класс непараметрических моделей, которые не делают предположений почти никаких (это не совсем правда), а основаны непосредственно на данных; они в некоторых ситуациях очень хороши, но плохо обобщаются на высокие размерности и большие датасеты.

Метод ближайших соседей

- Пример непараметрической модели: метод ближайших соседей.
- Давайте на примере задачи классификации.
- Не будем строить вообще никакой модели, а будем классифицировать новые примеры как

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\mathbf{x}_i \in N_k(\mathbf{x})} y_i,$$

где $N_k(\mathbf{x})$ – множество k ближайших соседей точки $\mathbf{x}$ среди имеющихся данных $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1}^N$.

Метод ближайших соседей

- Единственный «параметр» – это k, но от него многое зависит.
- Для разумно большого k у нас в нашем примере стало меньше ошибок.
- Но это не предел – для $k = 1$ на тестовых данных вообще никаких ошибок нету!
- Что это значит? В чём недостаток метода ближайших соседей при $k = 1$?
- Как выбрать k? Можно ли просто подсчитать ошибку классификации и минимизировать её?

Проклятие размерности

- В прошлый раз k-NN давали гораздо более разумные результаты, чем линейная модель, особенно если хорошо выбрать k.
- Может быть, нам в этой жизни больше ничего и не нужно?
- Давайте посмотрим, как k-NN будет вести себя в более высокой размерности (что очень реалистично).

Проклятие размерности

- Давайте поищем ближайших соседей у точки в единичном гиперкубе. Предположим, что наше исходное распределение равномерное.
- Чтобы покрыть долю α тестовых примеров, нужно (ожидаемо) покрыть долю α объёма, и ожидаемая длина ребра гиперкуба-окрестности в размерности p будет $e_p(\alpha) = \alpha^{1/p}$.
- Например, в размерности 10 $e_{10}(0.1) = 0.8$, $e_{10}(0.01) = 0.63$, т.е. чтобы покрыть 1% объёма, нужно взять окрестность длиной больше половины носителя по каждой координате!
- Это скажется и на k-NN: трудно отвергнуть по малому числу координат, быстрые алгоритмы хуже работают.

Проклятие размерности

- Второе проявление the curse of dimensionality: пусть N точек равномерно распределены в единичном шаре размерности p. Тогда среднее расстояние от нуля до точки равно

$$d(p, N) = \left(1 - \frac{1}{2}^{1/N}\right)^{1/p},$$

  т.е., например, в размерности 10 для $N = 500$ $d \approx 0.52$, т.е. больше половины.
- Большинство точек в результаты ближе к границе носителя, чем к другим точкам, а это для ближайших соседей проблема – придётся не интерполировать внутри существующих точек, а экстраполировать наружу.

Проклятие размерности

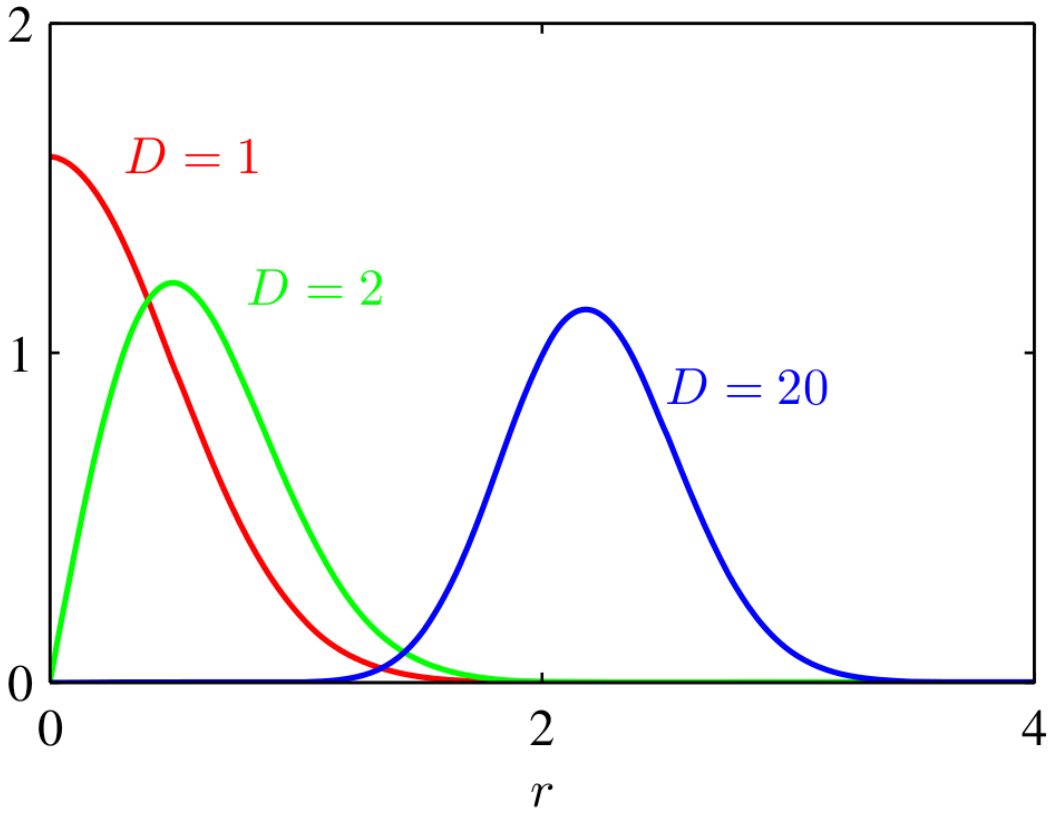
- Третье проявление: проблемы в оптимизации, которые и имел в виду Беллман.
- Если нужно примерно оптимизировать функцию от d переменных, на решётке с шагом ϵ понадобится примерно $\left(\frac{1}{\epsilon}\right)^d$ вычислений функции.
- В численном интегрировании – чтобы интегрировать функцию с точностью ϵ, нужно тоже примерно $\left(\frac{1}{\epsilon}\right)^d$ вычислений.

Проклятие размерности

- Плотные множества становятся очень разреженными. Например, чтобы получить плотность, создаваемую в размерности 1 при помощи $N = 100$ точек, в размерности 10 нужно будет 100^{10} точек.
- Поведение функций тоже усложняется с ростом размерности – чтобы строить регрессии в высокой размерности с той же точностью, может потребоваться экспоненциально больше точек, чем в низкой размерности.
- А у линейной модели ничего такого не наблюдается, она не подвержена проклятию размерности.

Проклятие размерности

- Ещё пример: нормально распределённая величина будет сосредоточена в тонкой оболочке.



Упражнение. Переведите плотность нормального распределения в полярные координаты и проверьте это

Thank you!

Спасибо за внимание!