Probability Graph 08 Belief Propagation

Chen Gong

08 December 2019

在上一小节中,我们已经介绍了变量消除 (Variable Elimination), Variable Elimination 的思想是 Probability Graph 中的核心思想之一。上一节中我们就已经介绍了,这实际上就是乘法对加法的分配律。但是,Variable Elimination 中有很多的问题,比如重复计算和最优计算次序不好确定的问题。所以,我们这一节来介绍 Belief Propagation 来解决重复计算的问题。

1 Forward and Backward Algorithm

假设, 我们现在有一个马氏链模型:



图 1: 链式马氏链模型结构图

联合概率可以被我们表示为: $p(a,b,c,d,e) = p(a) \cdot p(b|a) \cdot p(c|b) \cdot p(d|c) \cdot p(e|d)$ 。 如果,我们想要求的是 p(e),那么:

$$p(e) = \sum_{a,b,c,d} p(a,b,c,d,e)$$

$$= \sum_{a} p(e|d) \cdot \sum_{c} p(d|c) \cdot \sum_{b} p(c|b) \cdot \sum_{a} p(b|a) \cdot p(a)$$
(1)

为了简化表达,这里我们需要定义一个很重要的符号。因为, $\sum_a p(b|a) \cdot p(a)$,是一个关于 b 的表达式,也就是相当于把 a 给约掉了。所以我们可以把 $\sum_a p(b|a) \cdot p(a)$ 记为 $m_{a\longrightarrow b}(b)$ 。同理,我们也可以将 $\sum_c p(d|c) \cdot \sum_b p(c|b) \cdot m_{a\longrightarrow b}(b)$ 记为 $m_{b\longrightarrow c}(c)$ 。那么为了求得 p(e),我们依次的求解顺序为 $m_{a\longrightarrow b}(b)$, $m_{b\longrightarrow c}(c)$, $m_{c\longrightarrow d}(d)$ 和 $m_{d\longrightarrow e}(e)$ 。也就相当于沿着这个链这个马氏链一直往前走,也就是前向算法 (Forward Algorithm)。我们用公式表达即为:

$$a \xrightarrow{m_a \to b(b)} b \xrightarrow{m_b \to c(c)} c \xrightarrow{m_c \to d(d)} d \xrightarrow{m_d \to e(e)} e$$
 (2)

如果是要求 p(c),那么我们的传递过程为 $a \longrightarrow b \longrightarrow c \longleftarrow d \longleftarrow e$ 。这里,我们就不能只用前向算法来解决了,需要用到 Forward-Backward 算法来解决了。也就是同时使用 Forward 和 Backward 的方法,那么我们来看看 p(c) 怎么求?

$$p(c) = \sum_{a,b,d,e} p(a,b,c,d,e)$$

$$= (\sum_{b} p(c|b) \sum_{a} p(b|a)p(a)) \cdot (\sum_{d} p(d|c) \sum_{e} p(e|d))$$
(3)

对比上面的计算 p(e) 的过程,我们就可以发现, $\sum_b p(c|b) \sum_a p(b|a) p(a)$ 部分的计算也就是 $m_{b\longrightarrow c}(c)$ 的计算是一模一样的。所以说,Variable Elimination 里面有大量的重复计算。Belief 的想法很简单,也就是将 $m_{i\longrightarrow j}(j)$,全部事先计算好,就像一个个积木一样,然后再用这个积木来搭建运算。那么也就是,我们事先将方向全部定义好,正向和反向的全部都求了再说。为了进一步探究 Belief Background,我们需要讨论一些更加 Generalize 的情况。也就是从 Chain—Tree,有向 — 无项的情况。

2 Belief Propagation 的扩展

我们的 Generalize 的后,分析了一个树形的无向图结构。图的网络结构如下所示:

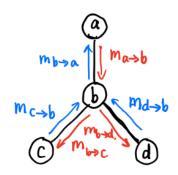


图 2: 树形无向图结构拓扑结构

下面第一步,我们把上面那个模型的设置写出来。所以,我们需要进行因式分解,我们用 $\varphi(i)$ 来表示和 i 有关的部分。所以,我们可以将联合概率密度写为:

$$p(a,b,c,d) = \frac{1}{Z}\varphi_a(a)\varphi_b(b)\varphi_c(c)\varphi_d(d) \cdot \varphi_{a,b}(a,b)\varphi_{b,c}(b,c)\varphi(b,d)(b,d)$$
(4)

我们要求 $p(a) = \sum_{b,c,d} p(a,b,c,d)$ 和 $p(b) = \sum_{a,c,d} p(a,b,c,d)$,其间一定会出现大量的重复计算。这个模型中有四个点,三条边,每条边都有两个方向,所以我们要求的是 6 个"积木"。我们来一步步的看看,如何可以得到想要的 p(a)。

- 1. 首先,我们需要求的是 $c \longrightarrow b$ 和 $d \longrightarrow b$ 两个过程。其中, $c \longrightarrow b$ 的过程也就是 $m_{c \longrightarrow b}(b)$,可以被我们表达为 $\sum_{c} \varphi_{c} \cdot \varphi_{b,c}$ 。同理, $m_{d \longrightarrow b}(b)$ 可以被我们表达为 $\sum_{d} \varphi_{b} \cdot \varphi_{b,d}$ 。
- 2. 第二步,我们需要求 $b \longrightarrow a$ 的过程,也就是 $m_{b \longrightarrow a}(a)$ 。它等于 $m_{c \longrightarrow b}(b)$, $m_{d \longrightarrow b}(b)$ 乘上 b 自己的部分求和得到,我们可以写为:

$$m_{b \longrightarrow a}(a) = \sum_{b} m_{c \longrightarrow b}(b) \cdot \varphi_b \cdot \varphi_{a,b} \cdot m_{d \longrightarrow b}(b)$$
 (5)

3. 最后, $m_{b\longrightarrow a}(a)$ 乘上 a 自己的部分就得到了 p(a),也就是: $p(a)=\varphi_a\cdot m_{b\longrightarrow a}(a)$ 。 所以,我们总结一下:

$$m_{b \longrightarrow a}(x_a) = \sum_{x_b} \varphi_{a,b} \varphi_b m_{c \longrightarrow b}(x_b) m_{d \longrightarrow b}(x_b)$$
(6)

而,

$$p(a) = \varphi_a m_{b \to a}(x_a) \tag{7}$$

我相信到这里,大家应该是可以理解这个意思的,会有点抽象,但并不是很难。下一步我想做个 Generalize 为了便于大家进行理解,我这里尽量不跳步:

$$m_{b \longrightarrow a}(x_a) = \sum_{x_b} \varphi_{a,b} \varphi_b \prod_{\{k \in NB(b)\} \longrightarrow a} m_{k \longrightarrow b}(x_b)$$
(8)

这里的 NB(b) 代表的是所有节点 b 的邻接节点。我们可以进一步表示为:

$$m_{j \longrightarrow i}(x_i) = \sum_{x_j} \varphi_{i,j} \varphi_j \prod_{\{k \in NB(j)\} \longrightarrow i} m_{k \longrightarrow j}(x_j)$$
(9)

而,

$$p(x_i) = \varphi_i \prod_{k \in NB(i)} m_{k \Longrightarrow i}(x_i) \tag{10}$$

通过对上面表达式的观察,我们是不是发现了一个很有意思的现象。也就是这些概率都是由 $m_{i op j}$ 这样的小积木拼接起来的。所以我们可以 get a conclusion:我们不要一上来就直接去求边缘概率密度,比如 p(a), p(b), p(c), p(d) 这些的。我们可以先建立一个 Cache,把 $m_{i op j}$ 全部算出来。然后,要求什么的话,直接进行搭建和拼接就可以了。从这里,我们就引出了 Belief Propagation。

3 Belief Propagation

我们之前就已经得到了信息传递的表达式:

$$m_{b \longrightarrow a} = \sum_{b} \varphi_{a,b} \varphi_b \cdot m_{c \longrightarrow b} \cdot m_{d \longrightarrow b} \tag{11}$$

在开始理解 Belief Propagation 之前,我们在分析一下 $m_{b \to a}$ 的公式中,每个部分表达的具体含义。其中, $m_{c \to b} \cdot m_{d \to b}$ 中反映的是孩子 (Children) 的信息。而 φ_b 中表示是 b 节点自己的信息。那么, $\varphi_b \cdot m_{c \to b} \cdot m_{d \to b}$ 可以被我们看成是 b 节点的所有信息,包括节点自己本身的信息和其他节点传播来的信息,所以我们将这个部分记为:Belief。所以,Belief(b) = φ_b · children。b 节点收集孩子和自己的信息,整合和 b 相关的所有信息,通过 Belief(b) = φ_b · children 向 a 传去。

那么,Belief Propagation 可以看成是 BP = VE + Cashing。这个算法的核心思想就在于,直接求 $m_{i oup j}$,然后再导出边缘概率 $p(x_i)$ 。第二小节中我们已经详细的给出了 $p(x_i)$ 的推导方法。下一步,我们需要知道如何来求 $m_{i oup j}$ 。

3.1 Sequential Implementation

顺序计算的思路, 我们需要借助一个队列来实现:

- 1. Get Root: 首先我们需要假设一个节点为根节点。
- 2. Collect Message: 对于每一个在根节点的邻接点中的节点 x_i , Collect Message (x_i) 。对应的就是图 2 中蓝色的线条。
- 3. Distribute Message: 对于每一个在根节点的邻接点中的节点 x_i , Distribute Message (x_i) 。对应的就是图 2 中红色的线条。

经过这三个步骤以后,我们可以得到所有的 $i,j \in v$,从而计算出 $p(x_k), k \in v$ 。

3.2 Parallel Implementation

这种思想在图结构的网络中经常使用,大致也就是随意选一个节点,然后向四周其他的节点辐射信息。其他节点收到信息之后,更新自己的状态,然后反馈自己的信息给源节点,源节点再更新自己的信息。不断地重复这个工作,直到最后收敛为止。

4 小结

实际上, Belief Propagation 就是一种 Variable Elimination。但是, 我们发现了 Variable Elimination 中有很多的重复计算。所以, 我们想到了提取出来先算好, 要用的时候直接放进去就行了。所以, Belief Propagation 中分解了传递的过程, 先计算消息传递的机制, 再来组装出计算边缘概率。其实本质还是 Variable Elimination 算法, 不过就是使表达更加的规范了, 通过拆解的方法来消除重复计算。