Univerza *v Ljubljani* Fakulteta *za računalništvo in informatiko*



Delovni zapiski izobraževanja

BAYESOVA STATISTIKA S PROGRAMSKIM JEZIKOM STAN

Izvajalca: izr. prof. dr Erik Štrumbelj

dr. Jure Demšar

Akademija FRI

Zakaj naj mi bo mar za probabilistično programiranje?

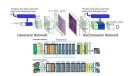
- Temelj statističnega modeliranja in probabilističnega strojnega učenja.
- Prihodnost "podatkovnega inženirstva".
- Obvezno orodje za vsakega, ki se želi resno ukvarjati s kvantitativno analizo podatkov!



uporabna statistika



probabilistični grafični modeli



(generativno) globoko učenje

Oris vsebine

- 1 Negotovost in probabilistično razmišljanje,
- 2 statistično modeliranje,
- **3** probabilistično programiranje,
- 4 programski jezik Stan,
- **5** praktični del.

Predpostavljamo znanje programiranja in osnovno razumevanje verjetnosti.

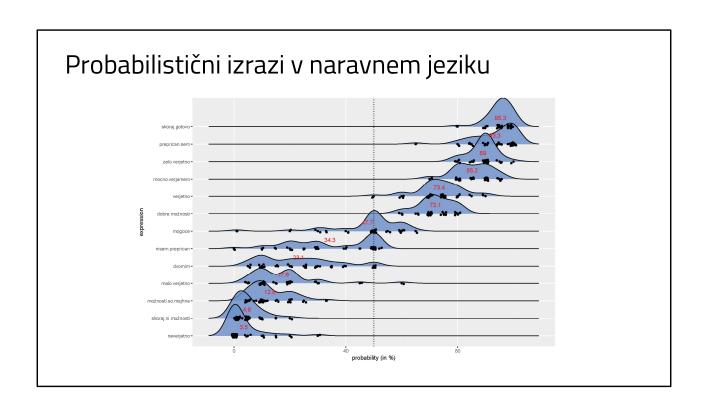


Interaktivni test opreme za delavnico

1 del

Negotovost in probabilistično razmišljanje

Q: Ali bo naslednji teden v Ljubljani deževalo?



Q: Kako toplo (°C) bo jutri opoldne v Ljubljani?

Naravni jezik je nekonsistenten, nenatačnen in premalo ekspresiven za resno kvantitativno delo!

- **Dobra novica** Primeren jezik so že razvili!
- Slaba novica Gre za teorijo verjetnosti matematiki se ne moremo izogniti.
- **Dobra novica** Ni se nam potrebno naučiti niti vse dodiplomske verjetnosti¹ potrebujemo le verjetnost kot jezik, računal pa bo računalnik.

¹ Kar pa ne pomeni, da nam ne bo koristilo! Verjetnost je osnova kvantitativne analize podatkov.

Gramatika verjetnosti

Verjetnost P (pogosto Pr) je funkcija, ki dogodkom prireja numerične vrednosti in zadošča tem aksiomom:

A1
$$P(A) \ge 0$$
.
A2 $P(\Omega) = 1$.
A3 $P(A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup ...) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$,

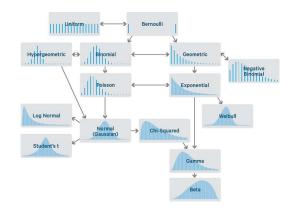
Definicija pogojne verjetnosti:

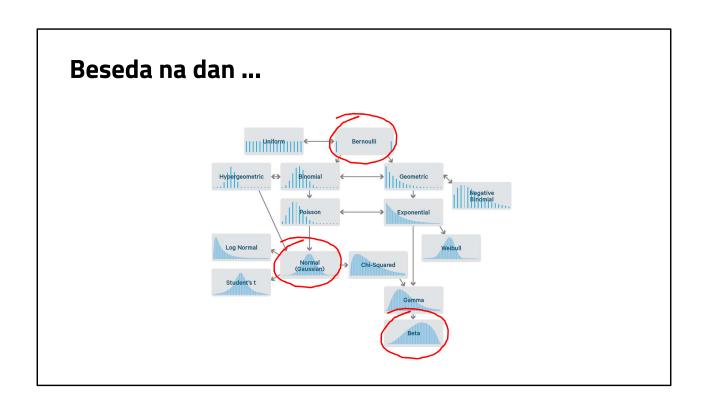
$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

za poljubno sekvenco disjunktnih dogodkov.

Porazdelitve

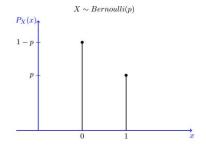
- Porazdelitve so elementarni izrazi probabilističnega razmišljanja in
- osnovni gradniki statističnih modelov.
- Porazdelitve so v skladu s pravili teorije verjetnosti, zato so konsistentne in natančne probabilistične izjave.
- Več kot vemo o porazdelitvah, bolj bogato se lahko izražamo.



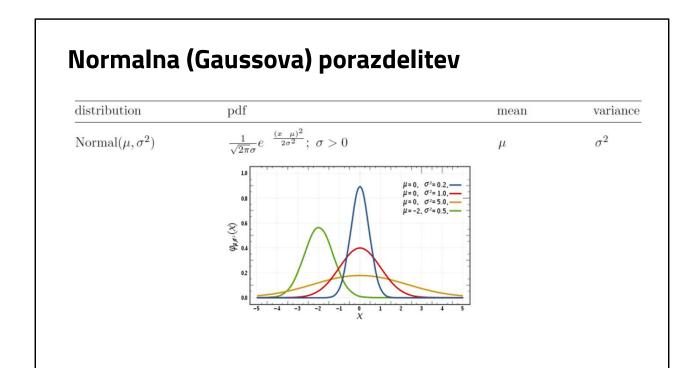


Bernoullijeva porazdelitev

distribution	pmf	mean	variance
Bernoulli (p)	$p^x(1-p)^{1-x}; x=0,1; p\in(0,1)$	p	p(1 - p)



Q: Ali bo naslednji teden v Ljubljani deževalo?



Normalna (Gaussova) porazdelitev

distribution	pdf	mean	variance
$Normal(\mu, \sigma^2)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}};\ \sigma>0$	μ	σ^2
	$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$.0,	

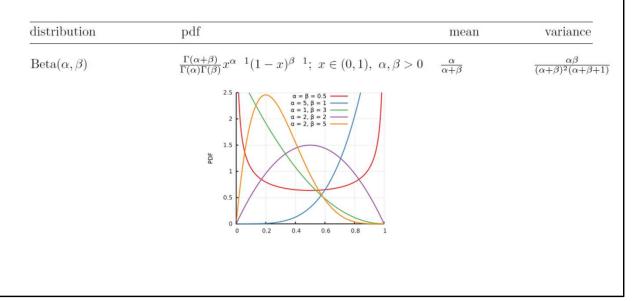
Q: Kako toplo (°C) bo jutri opoldne v Ljubljani?

Normalna (Gaussova) porazdelitev

distribution	pdf	mean	variance
$Normal(\mu, \sigma^2)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}};\ \sigma>0$	μ	σ^2
	$\mu = 0,$ $\mu = 0,$ $\mu = 0,$	$\sigma^2 = 0.2, \dots$ $\sigma^2 = 1.0, \dots$ $\sigma^2 = 5.0, \dots$ $\sigma^2 = 0.5, \dots$	

Q: Kako toplo (°C) je bilo na današnji dan pred 50 leti?





Porazdelitev Beta

distribution	pdf	mean	variance
$\mathrm{Beta}(\alpha,\beta)$	$\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1};\ x\in(0,1),\ \alpha,\beta>0$	$\frac{\alpha}{\alpha + \beta}$	$\frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}$
	$\begin{array}{c} 2.5 \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\$		

Q: Kolikšna je verjetnost, da naslednji teden v LJ dežuje?

Preizkus probabilističnega razmišljanja

To so izidi 10 metov (morda nepoštenega) kovanca:

c c g c c g c c c g (?)

Q1: Je enajsti met **c**ifra ali **g**rb?

Q2: Kolikšna je verjetnost *p*, da na tem kovancu pade grb?

Q3: Je kovanec pošten? Poštenost je npr., da je p med 48% and 52%.

V razmislek ...

Verjetnost je koherenten in natančen jezik za izražanje negotovosti:

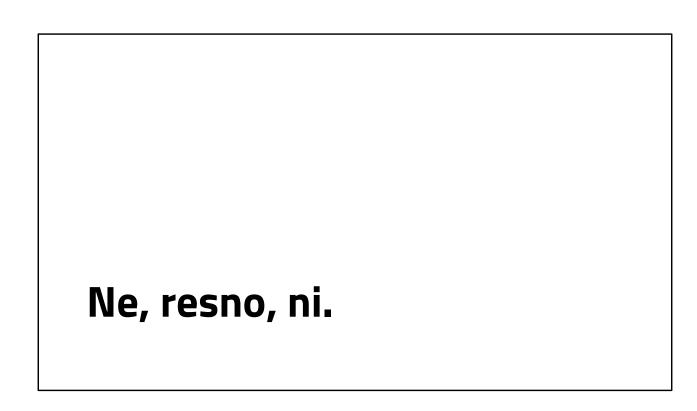
- Če ne sledimo zakonom verjetnosti, nas nihče ne bo razumel!
- Sicer pa so probabilistične izjave lahko subjektivne ali navidez popolnoma nesmiselne.
- Precej naravno nam je, da imamo verjetnostno mnenje o stvareh, ki niso naključne. Naključje je samo eden izmed virov negotovosti (in ne preveč pogost).

Uporaba verjetnosti za izražanje negotovosti je bistvo bayesovskega pogleda na statistično sklepanje!

2 del Statistično modeliranje

Model = Hipoteza, kako so nastali naši podatki.





Q: Zapišite 1 metodo iz statistike ali strojnega učenja, ki se uporablja za napovedovanje, razpoznavanje vzorcev, gručenje, testiranje hipotez, ipd.

Zaporedje enic in ničel (= podatki):

100100101011011001111111111111111

Statistični model (= poskus statistične interpretacije):

Zaporedje je nastalo s 30 neodvisnimi meti kovanca z neznano verjetnostjo enice θ .

Predhodno mnenje o parametrih modela:

Nimam pojma, koliko je θ , zato ne bom izrazil preference do nobene vrednosti θ .

Statistično sklepanje (= učenje):

Pri vseh teh predpostavkah in upoštevajoč zakone verjetnosti, kakšno mora biti moje mnenje o θ , ko vidim podatke?

Zaporedje enic in ničel (= podatki):

100100101011011001111111111111111

$$y_1,\ldots,y_n \qquad \qquad y_i\in\{0,1\}$$

Statistični model (= poskus statistične interpretacije):

Zaporedje je nastalo s 30 neodvisnimi meti kovanca z neznano verjetnostjo enice θ .

$$y_1, y_2, \dots, y_n | \theta \sim_{iid} Bernoulli(\theta)$$

Predhodno mnenje o parametrih modela:

Nimam pojma, koliko je θ , zato ne bom izrazil preference do nobene vrednosti θ .

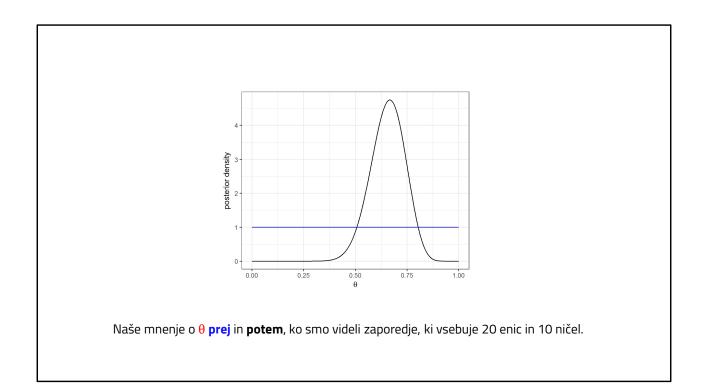
$$heta \sim \textit{Beta}(1,1)$$

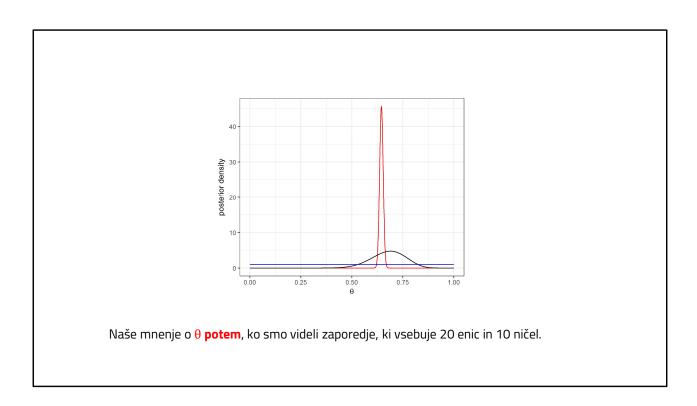
Statistično sklepanje (= učenje):

Pri vseh teh predpostavkah in upoštevajoč zakone verjetnosti, kakšno mora biti moje mnenje o θ , ko vidim podatke?

$$p(\theta|y) = \frac{p(\theta, y)}{p(y)} = \frac{p(y|\theta)p(\theta)}{\int p(y|\theta)p(\theta)d\theta}$$

$$\theta|y_1,\ldots,y_n\sim \textit{Beta}(\sum y_i+1,n-\sum y_i+1)$$





3 delProbabilistično programiranje

Probabilistični programski jezik (PPL) je programski jezik, ki je zasnovan za opisovanje probabilističnih modelov in računsko sklepanje iz teh modelov.

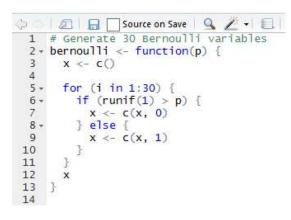
Vir: Wikipedia

Probabilistični programski jezik nam omogoča, da se osredotočimo na modeliranje in preskočimo matematične in računske probleme pri sklepanju.

Dva primera imperativnega programiranja 🧼 🗇 🔝 🔚 🔲 Source on Save 🔍 🙇 🔻 📳 🔻 🦈 🗇 🔝 🔚 🔲 Source on Save 🛚 🔦 🙇 🕶 📳 1 # Generate 30 Bernoulli variables 1 # Bubble Sort 2 r sort <- function(x) { 3 n <- length(x) 2 * bernoulli <- function(p) { 3 x <- c() 4 5 + for (k in n:2) { 5 + for (i in 1:30) { if (runif(1) > p) { 6 i <- 1 6 + while (i < k) { 7 + 7 x <- c(x, 0)if (x[i] > x[i+1]) { 8 -} else { 8 temp <- x[i+1] x[i+1] <- x[i] 9 9 x <- c(x, 1)10 10 x[i] <- temp 11 11 12 12 X i <- i + 1 13 13 } 14 14 15 } 16 X 17 }

Imperativno programiranje

in Statistično modeliranje



$$y_1, \dots, y_n$$
 $y_i \in \{0, 1\}$
 $y_1, y_2, \dots, y_n | \theta \sim_{iid} Bernoulli(\theta)$
 $\theta \sim Beta(1, 1)$

- Podane imamo vhodne podatke in parametre,
- sprogramiramo algoritem, ki generira zahtevane izhodne podatke.
- Podane imamo vhodne in izhodne podatke,
- · opišemo generator, ki naj bi generiral podatke,
- sklepamo o najbolj verjetnih vrednostih parametrov.

Odmor koda za drugi del:

https://github.com/bstatcomp/Stan-Intro-Workshop

4 del Programski jezik

Kaj je Stan?

- Orodje za učinkovito Bayesovo statistično modeliranje.
- Najlažje ga uporabljamo preko vmesnikov (na primer RStan, PyStan, ...).
- Stan je "compiled" jezik, to pomeni, da se statistični model preslika v c++ kodo, ki se nato pred uporabo prevede (zato je potrebno pred uporabo modela malo počakati).



Obvezni bloki vsakega Stan programa

- data blok, v katerem s pomočjo spremenljivk deklariramo vhodne podatke. Vrednosti vhodnih podatkov pripravi uporabnik/razvijalec, običajno v programskem jeziku, ki ga uporabljamo kot vmesnik.
- parameters blok, v katerem deklariramo parametre, ki jih želimo oceniti (kateri parametri našega statističnega modela nas zanimajo). Stan preko vmesnika (na primer RStan) vrne vrednosti parametrov nazaj v izhodiščni programski jezik.
- model opis statističnega modela.

```
/*
Primer komentarja, ki obsega
več vrstic.
*/

data {
    // tukaj definiramo vhodne podatke
}

parameters {
    // parametri modela, ki jih želimo oceniti
}

model {
    // sem spada statistično modeliranje
}
```

Osnovni tipi spremenljivk

• int – celo število int a;

• real – realno število real b;

• **seznam** (array) – seznam celih ali realnih števil int a[10]; real b[n];

• matrika (matrix) – 2D seznam [vrstice, stolpci] int A[10, 10];

• vector – vektor realnih števil (optimiziran seznam) vector[n] v;

• **simplex** – vektor pozitivnih realnih števil, ki se seštejejo v 1 simplex[n] s;

real<lower=0> sigma;

• (skoraj) vsem spremenljivkam lahko določimo zgornjo in spodnjo mejo real<lower=0,upper=1> success_rate;

Porazdelitve

5 del Praktični primeri



Izjemno kratek uvod v R

Jure Demšar 30/5/2019

R in RStudio

R (https://www.r-project.org/) je odprto kodni programski jezik namenjen primarno statisičnim izračunom. Osnovni vmesnik za delo z Rjem je precej okoren, zato si delo lahko precej olajšamo z namestitvijo drugega razvojnega okolja. Najbolj razširjeno ter razmeroma kvalitetno razvojno okolje se imenuje RStudio (https://www.rstudio.com).

Paketi

Ker je R odprto kodni programski jezik, lahko vsak prispeva k njegovem razvoju s pomočjo dodatnih paketov. Uporaba paketov nam močno olajša delo, večina uporabnih paketov se nahaja v repozitoriju CRAN. V RStudiu lahko pakete iz repozitorija CRAN naložimo preko menuja Tools in izbire Install Packages. Če poznamo ime paketa, ki ga želimo namestiti, lahko to naredimo tudi neposredno preko ukazne vrstice, na primer ukaz install.packages("dplyr") namesti paket dplyr. Ko paket namestimo, ga moramo pred uporabo še uvoziti v našo skripto, to storimo s pomočjo ukaza library(). Spodnja koda namesti ter uvozi vse pakete, ki jih bomo potrebovali pri reševanju današnjih nalog.

```
# install packages
install.packages("dplyr")
install.packages("ggplot2")
install.packages("mcmcse")
install.packages("reshape2")
install.packages("rstan")

# load packages into workspace
library(dplyr)
library(ggplot2)
library(mcmcse)
library(rstan)
library(reshape2)
```

Nalaganje podatkov

Podatki so običajno shranjeni v obliki .csv (angl. comma separated value) datotek. Vsaka vrstica v datoteki predstavlja eno meritev, v vsaki vrstici lahko najdemo več atributov te meritve, atributi so ločeni s posebnim znakom, ki v vrednostih atributov ne nastopa. V R podatke iz datoteke csv naložimo s pomočjo ukaza read.csv(). Privzeti znak za ločevanje atributov je vejica, zaradi praktičnih razlogov (zmeda z decimalno vejico/piko, vejice v tekstovnih podatkih) se vejica običajno ne uporablja. Delilni znak (angl. separator) lahko nastavimo z uporabo parametra par. Spodnja koda v spremenljivko basket_data naloži podatke iz datoteke basketball_shots.csv, ki se nahaja v direktoriju data.

```
# load data
basket_data <- read.csv("../data/basketball_shots.csv", sep=";")</pre>
```

Podatki se naložijo v podatkovno strukturo imenovano podatkovni okvir (angl. data frame). Ta podatkovni tip si lahko predstavljate kot tabelo, kjer stolpci predstavljajo atribute, vrstice pa kot primerke/meritve. V posameznih celicah se tako nahajajo vrednosti atributa za določen primerek.

S pomočjo konstruktorja data.frame() lahko naredimo tudi nov podatkovni okvir, operacija c() v spodnjem primeru predstavlja combine in združi več posameznih elementov v vektor.

```
# we can create new data frames like this, c() combines elements into a vector
new_df <- data.frame(first_column=c(1, 2), second_column=c(10, 11))</pre>
```

Do posameznih stolpcev podatkovnega okvirja dostopamo z znakom \$, do števila vrstic v okvirju pa pridemo z ukazom nrow().

```
# to access columns of a data frame use the $ sign
new_df$first_column
```

```
## [1] 1 2
# to get number of rows in a data frame use nrow
nrow(new_df)
```

```
## [1] 2
```

Z ukazom rbind() lahko združimo več podatkovnih okvirjev v enega, pogoj je, da se okvirji ujemajo v vseh stolpcih.

```
# create another data frame
new_df2 <- data.frame(first_column=c(3, 4), second_column=c(12, 13))
# we can merge data frames together (if they have same columns) using rbind
new_df3 <- rbind(new_df, new_df2)</pre>
```

Pri pripravi podatkov za Stan moramo običajno iz podatkovnega okvirja izluščiti samo določen stolpec. Ko stolpec shranimo v spremenljivko, dobimo spremenljivko tipa vektor. Za izračun dolžine vektorja ne uporabljamo ukaza nrow(), saj vektor nima vrstic, ampak uporabimo ukaz length().

```
# we can extract a column and save it into a vector
first_column <- new_df$first_column

# to get length of a vector use the length function
length(first_column)</pre>
```

```
## [1] 2
```

Ko pripravljamo podatke za Stan, jih shranimo v podatkovno struktoro list. Gre za seznam spremenljivk različnega tipa, v spodnjem primeru tako naredimo seznam, ki vsebuje celo število (n) ter vektor realnih števil (y).

```
# we pass data to stan through lists
n <- nrow(new_df)
y <- new_df$first_column
stan_data <- list(n = n, y = y)</pre>
```

Osnovne operacije nad podatki

Za potrebe delavnice bomo spoznali zgolj najbolj osnovne operacije za delo s podatki. Urejanje podatkov si bomo olajšali z uporabo knjižnice dplyr. V naših podatkih o metih na koš nastopa več igralcev, vsak izmed njih je 60 krat vrgel na običajen koš ter 60 krat na koš z manjšim obsegom obroča. Spodnji primer

prikazuje, kako iz vseh podatkov izluščimo samo podatke o metih prvega igralca (atribut PlayerID je enak 1) na običajen obroč (atribut SpecialRim je enak 0).

```
player1_data <- filter(basket_data, PlayerID == 1 & SpecialRim == 0)</pre>
```

Za vsak met imamo 5 podatkov: * ID igralca (*PlayerID*), * ID meta (*ThrowNum*), * kot izmeta (*Angle*), * uspešnost (*Made*), * tip obroča (*SpecialRim*).

Recimo, da za nadaljno analizo potrebujemo zgolj stolpca s podatki o zaporedni številki meta ter o uspešnosti meta, ostalih stolpcev se lahko znebimo z uporabo operacije select. Reduciranje števila stolpcev je še posebej koristno, če operiramo z ogromnimi količinami podatkov.

```
player1_data <- select(player1_data, ThrowNum, Made)</pre>
```

Operacijo melt iz paketa reshape2 bomo uporabljali predsem za pripravo podatkov pred vizualizacijami. Spodnji primer prikaže uporabo melt, ko želimo primerjati zneske, ki so jih zagonska podjetja vložila v raziskave in razvoj, marketing in administracijo.

```
## research marketing administration
## 1 165349.2 471784.1 136897.8
## 2 162597.7 443898.5 151377.6
## 3 153441.5 407934.5 101145.6
```

Osnovna uporaba ukaza melt nam podatke zreducira na 2 stolpca, poimenovana variable in value, kjer vsaka vrstica predstavlja eno celico (par variable/value) iz izhodiščnega podatkovnega okvirja. Tako pripravljene podatke lahko nato v vizualizacijah grupiramo po vrednosti atributa variable, medtem ko vrednosti (value) preslikamo na želeno os grafa.

```
melt_investments <- melt(investments)</pre>
```

```
##
           variable
                        value
## 1
           research 165349.2
## 2
           research 162597.7
## 3
           research 153441.5
## 4
          marketing 471784.1
## 5
          marketing 443898.5
## 6
          marketing 407934.5
## 7 administration 136897.8
## 8 administration 151377.6
## 9 administration 101145.6
```

Cev (angl. pipe)

V kodi boste srečali tudi cev (pipe operator, %>%), s pomočjo tega operatorja lahko kodo precej skrajšamo. Operator nam omogoča, da podatke, ki so rezultat ene operacije, prenesemo neposredno v naslednjo operacijo (kot bi naredili cev med dvema operacijama, po cevi se rezultat prve operacije prenese na vhod druge operacije). Spodnji primer prikazuje, kako lahko združimo filtriranje in selektiranje podatkov iz zgornjega primera.

```
player1_data <- basket_data %>%
  filter(PlayerID == 1 & SpecialRim == 0) %>%
  select(player1_data, ThrowNum, Made)
```

V datoteki **basketball_shots.csv** so podatki o metih na koš. Vsak košarkaš je 60 krat vrgel na koš običajne velikosti, nato pa še 60 krat na koš z manjšim obsegom.

Zanima nas:

- 1) Primerjava med uspešnostjo košarkaša #1 ter košarkaša #2:

 - Kdo je boljši?
 Kako prepričani smo v to ugotovitev?
 Kolikšna je razlika v uspešnosti?
- 2) Primerjava med metanjem na običajni ter manjši obroč za košarkaša #1.

Namigi: Za modeliranje uspešnosti uporabi Bernoullijevo porazdelitev. Predznanje v model lahko vnesemo s pomočjo Beta porazdelitve.



Naš prvi model – meti na koš

```
• data
```

```
n – število metov
y – rezultat meta (0 – neuspešen met, 1 – uspešen)
```

parameters

theta – parameter Bernoulli distribucije, ki ocenjuje uspešnost

model

predznanje (prior) opis modela

```
data {
  int<lower=1> n;
  int y[n];
}

parameters {
  real<lower=0,upper=1> theta;
}

model {
  // prior
  theta ~ beta(1,1);

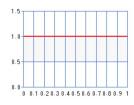
for (i in 1:n) {
   y[i] ~ bernoulli(theta);
  }
}
```

Prior za parameter theta

• brez

"flat" porazdelitev na intervalu $[-\infty, \infty]$

beta(1, 1)



beta(4, 2)



V datoteki **temperature.csv** so podatki o temperaturi, za Slovenijo imamo podatke o povprečni temperaturi za vsak mesec med 1901 in 2015.

Zanima nas, ali je bila temperatura julija (najbolj vroč mesec) med 1970 in 1985 nižja kot med 2000 in 2015?

- Kako prepričani smo v to trditev?
- Za koliko je bila temperatura nižja?

Namig:

Za modeliranje uspešnosti uporabi normalno porazdelitev - $N(\mu, \sigma)$.

V datoteki **temperature.csv** so podatki o temperaturi. Za Slovenijo imamo podatke o povprečni temperaturi za vsak mesec med 1901 in 2015, za Finsko pa med 2000 in 2015.

Zanima nas:

- 1) Ali julijska temperatura skozi čas na Finskem narašča?
 - Kakšno je naše zaupanje v napovedi modela, zakaj?
 - Kako lahko ta problem rešimo?
- 2) Ali julijska temperatura skozi čas v Sloveniji narašča?
- 3) Kakšna bo temperatura leta 2019, kakšna 2070? Kakšna je verjetnost, da bo leta 2019, oziroma 2070, pričakovana temepratura višja od 25°C?

Namig:

za modeliranje uspešnosti uporabi normalno linearno regresijo – normalni linearni model, kjer je μ porazdelitve linearno odvisno (a + bx) od leta (x).

Novo nastalo zagonsko podjetje nas je najelo, da jim pomagamo pri dveh pomembnih odločitvah: (ob predpostavki, da želijo maksimizirati svoj dobiček)

- 1) Kam vlagati sredstva (razvoj, marketing ali administracija)?
- 2) Kje naj imajo svoje prostore (na voljo imajo Florido, Kalifornijo in New York)?

S pomočjo analiziranja podatkov iz datoteke **50_startups.csv** jim pomagaj pri odločitvi. V datoteki se nahajajo podatki o 50 zagonskih podjetjih (kako so vlagali denar, kje imajo pisarno ter koliko so zaslužili).

Namig:

Nadgradi linearno normalno regresijo iz prejšnjega problema. Odvisna spremenljivka (profit) je odvisna od več atributov (research, marketing ...) – vhod X je torej matrika. Za vsak atribut želimo svojo beta (b) vrednost – parameter b je torej vektor. Iz kategorične spremenljivke (state) naredimo več binarnih spremenljivk.

Parlamentarne stranke se odločajo ali bi razpisale predčasne volitve ali ne. Na podlagi zadnje javnomnenjske raziskave (**elections.csv**) jim pomagaj pri tej odločitvi. Naročnika zanima:

- 1) Ocena uspešnosti za vse stranke.
- 2) Kakšna je verjetnost, da bo stranka po volitvah imela več sedežev v državnem zboru?
- 3) Kakšna je verjetnost, da ima po volitvah trenutna koalicija (LMŠ, SAB, SD, DeSUS in SMC) večino?
- 4) Kakšna je verjetnost, da ima po volitvah trenutna opozicija (SDS, SLS, NSi in SNS) večino?

Namigi:

Uporabite Bernoulli-beta model (problem #1) – tukaj ima vsaka stranka svoj parameter theta. Namesto vektorja za thete lahko uporabite simplex – ta poskrbi, da se verjetnosti seštejejo v 1. Večina v slovenskem državnem zboru pomeni več kot 44 sedežev (algoritem za izračun sedežev je v R datoteki). Večina algoritmov (izračun sedežev, primerjava s trenutnim stanjem) je že pripravljenih.