

Методы и системы искусственного интеллекта

Бондарев Владимир Николаевич

Вероятностный вывод в сетях Байеса

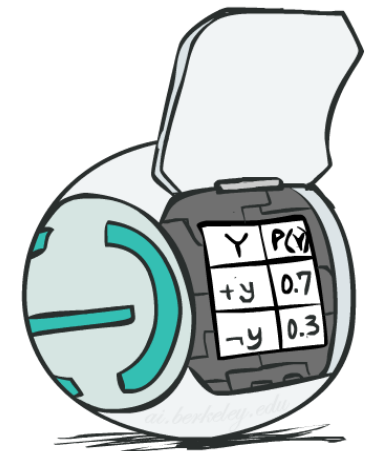
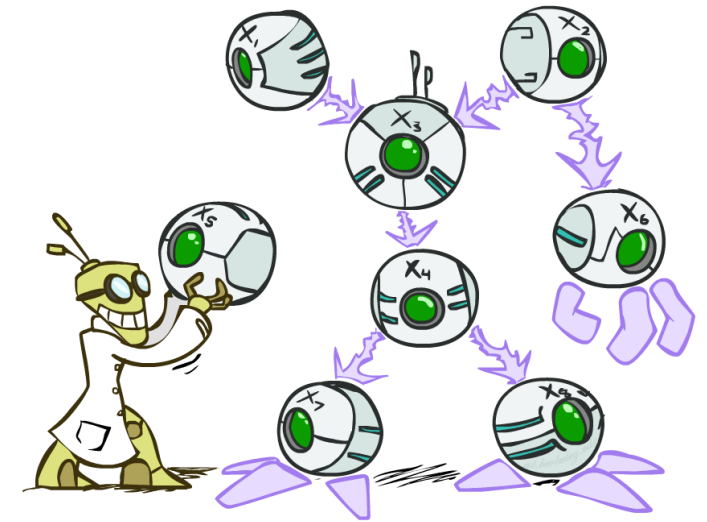
Представление сетей Байеса

- Направленный ациклический граф, в котором вершина – случайная переменная
- С каждой вершиной связана таблица условных вероятностей (CPT- conditional probability table) :
 - распределение X для каждой комбинации значений родительских вершин

$$P(X|a_1 \dots a_n)$$

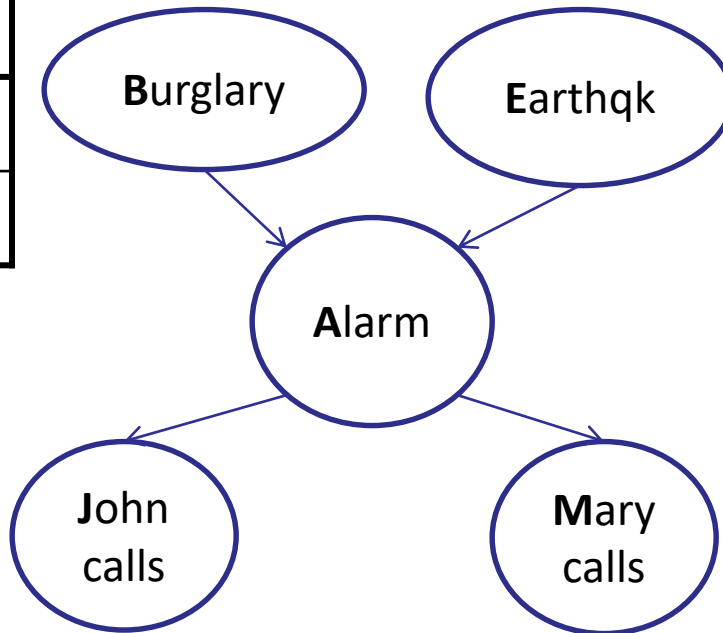
- Сети Байеса неявно кодируют совместное распределение:
 - в виде произведения локальных условных распределений;
 - чтобы определить, какая вероятность соответствует полному присваиванию в BN, перемножьте все соответствующие условные вероятности:

$$P(x_1, x_2, \dots x_n) = \prod_{i=1}^n P(x_i | \text{parents}(X_i))$$

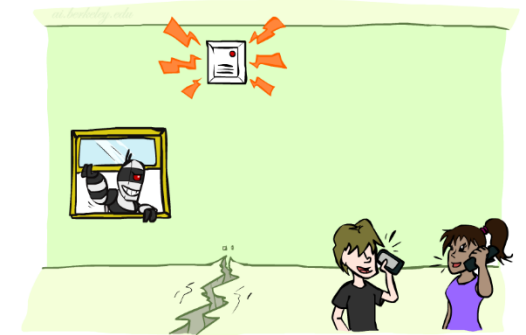


Пример: Сеть Тревоги

B	P(B)
+b	0.001
-b	0.999



E	P(E)
+e	0.002
-e	0.998



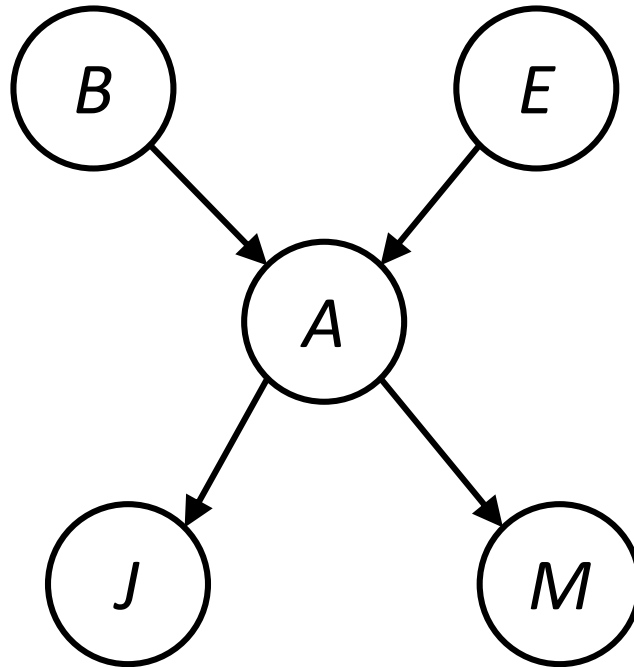
A	J	P(J A)
+a	+j	0.9
+a	-j	0.1
-a	+j	0.05
-a	-j	0.95

A	M	P(M A)
+a	+m	0.7
+a	-m	0.3
-a	+m	0.01
-a	-m	0.99

B	E	A	P(A B,E)
+b	+e	+a	0.95
+b	+e	-a	0.05
+b	-e	+a	0.94
+b	-e	-a	0.06
-b	+e	+a	0.29
-b	+e	-a	0.71
-b	-e	+a	0.001
-b	-e	-a	0.999

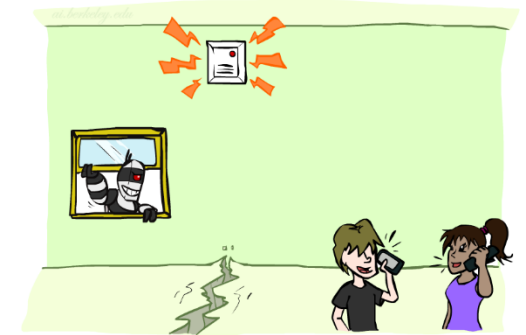
Пример: Сеть Тревоги

B	P(B)
+b	0.001
-b	0.999



E	P(E)
+e	0.002
-e	0.998

A	M	P(M A)
+a	+m	0.7
+a	-m	0.3
-a	+m	0.01
-a	-m	0.99



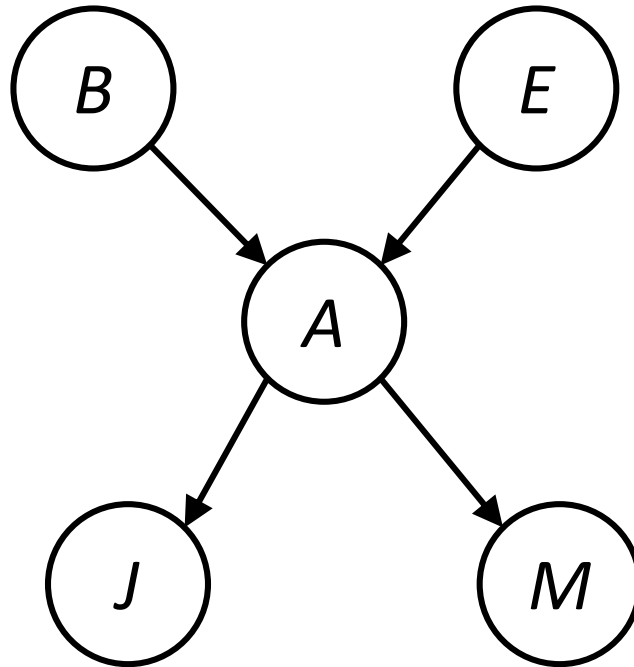
A	J	P(J A)
+a	+j	0.9
+a	-j	0.1
-a	+j	0.05
-a	-j	0.95

B	E	A	P(A B,E)
+b	+e	+a	0.95
+b	+e	-a	0.05
+b	-e	+a	0.94
+b	-e	-a	0.06
-b	+e	+a	0.29
-b	+e	-a	0.71
-b	-e	+a	0.001
-b	-e	-a	0.999

$$P(+b, -e, +a, -j, +m) =$$

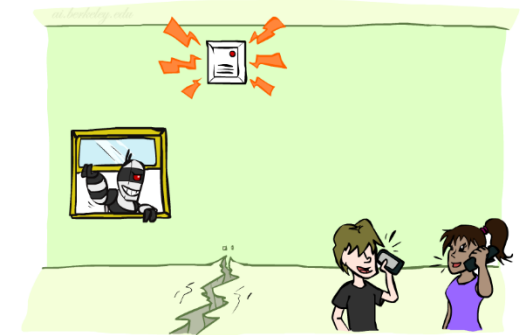
Пример: Сеть Тревоги

B	P(B)
+b	0.001
-b	0.999



E	P(E)
+e	0.002
-e	0.998

A	M	P(M A)
+a	+m	0.7
+a	-m	0.3
-a	+m	0.01
-a	-m	0.99



A	J	P(J A)
+a	+j	0.9
+a	-j	0.1
-a	+j	0.05
-a	-j	0.95

B	E	A	P(A B,E)
+b	+e	+a	0.95
+b	+e	-a	0.05
+b	-e	+a	0.94
+b	-e	-a	0.06
-b	+e	+a	0.29
-b	+e	-a	0.71
-b	-e	+a	0.001
-b	-e	-a	0.999

$$\begin{aligned}
 P(+b, -e, +a, -j, +m) &= \\
 P(+b)P(-e)P(+a|+b, -e)P(-j|+a)P(+m|+a) &= \\
 0.001 \times 0.998 \times 0.94 \times 0.1 \times 0.7 &
 \end{aligned}$$

Сети Байеса



Представление



Условная независимость

- Вероятностный вывод:
 - вывод простым перебором (точный, экспоненциальная сложность);
 - исключение переменных (точный, в наихудшем случае экспоненциальная сложность);
 - вывод относится к NP-полным задачам;
 - выборочный метод (аппроксимация);
- Обучение сетей Байеса на данных

Задачи вывода

- **Вывод** – вычисление вероятностей утверждений относительно переменных запроса на основе совместного распределения вероятностей

- Задачи вывода:

- Вычисление апостериорного распределения запроса Q

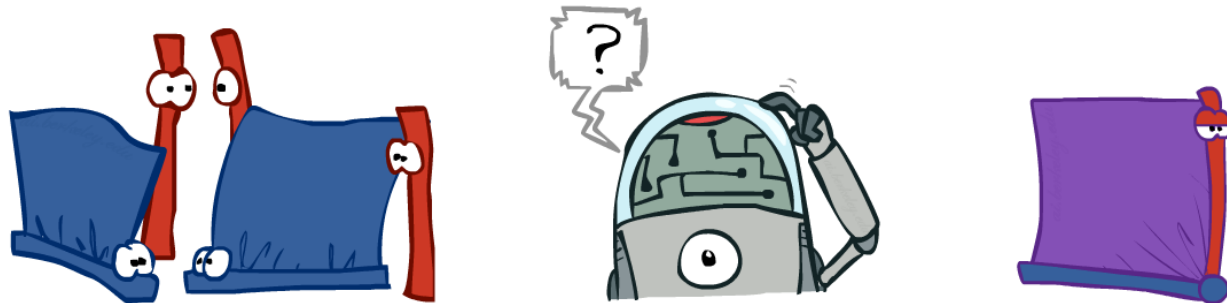
$$P(Q|E_1 = e_1, \dots, E_k = e_k)$$

- Наиболее вероятное объяснение:

$$\operatorname{argmax}_q P(Q = q|E_1 = e_1 \dots)$$

- Вычисление апостериорных распределений конъюнктивных запросов:

$$\mathbf{P}(X_i, X_j|\mathbf{E}=\mathbf{e}) = \mathbf{P}(X_i|\mathbf{E}=\mathbf{e})\mathbf{P}(X_j|X_i, \mathbf{E}=\mathbf{e})$$



Вывод путем перебора (enumeration) значений

Дано:

- Свидетельства: $E_1 \dots E_k = e_1 \dots e_k$
 - Переменная запроса*: Q
 - Скрытые переменные: $H_1 \dots H_r$
- $$\left. \begin{array}{l} E_1 \dots E_k = e_1 \dots e_k \\ Q \\ H_1 \dots H_r \end{array} \right\} \begin{array}{l} X_1, X_2, \dots, X_n \\ \text{Все переменные} \end{array}$$

Требуется:

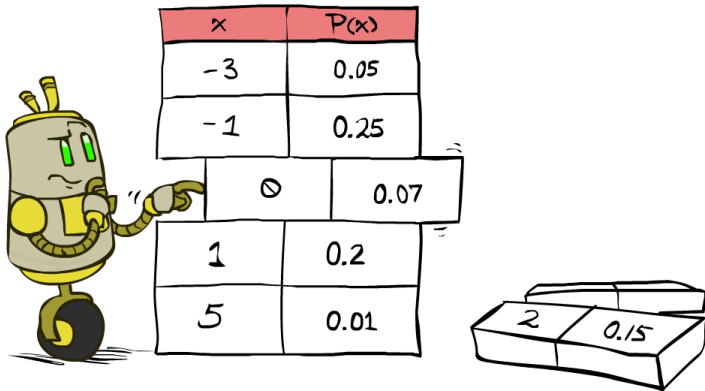
$$P(Q|e_1 \dots e_k)$$

* Также работает хорошо со множеством переменных запроса

- Шаг 1: Выбрать входы СРТ с учетом имеющихся свидетельств

- Шаг 2: Суммировать по H , чтобы получить совместную вероятность запроса и свидетельств

- Шаг 3: Нормализация



$$P(Q, e_1 \dots e_k) = \sum_{h_1 \dots h_r} \underbrace{P(Q, h_1 \dots h_r, e_1 \dots e_k)}_{X_1, X_2, \dots, X_n}$$

$$Z = \sum_q P(Q, e_1 \dots e_k)$$
$$P(Q|e_1 \dots e_k) = \frac{1}{Z} P(Q, e_1 \dots e_k)$$

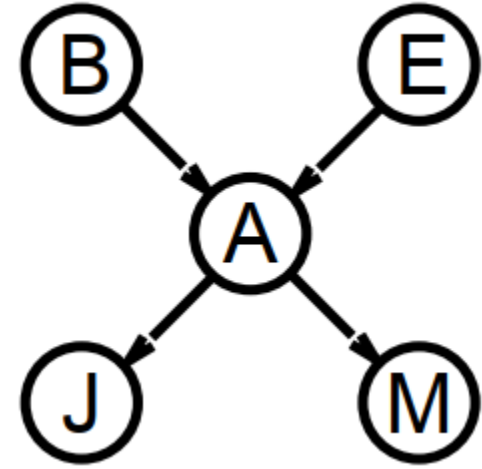
Вывод путем перебора в сетях Байеса

Любую условную вероятность можно вычислить, суммируя элементы из полного совместного распределения:

$$P(B \mid +j, +m) \propto_B P(B, +j, +m) = \sum_{e,a} P(B, e, a, +j, +m)$$

Представим совместное распределение через произведение условных :

$$\begin{aligned} \sum_{e,a} P(B, e, a, +j, +m) &= \sum_{e,a} P(B)P(e)P(a|B, e)P(+j|a)P(+m|a) \\ &= P(B)P(+e)P(+a|B, +e)P(+j|+a)P(+m|+a) + P(B)P(+e)P(-a|B, +e)P(+j|-a)P(+m|-a) \\ &\quad + P(B)P(-e)P(+a|B, -e)P(+j|+a)P(+m|+a) + P(B)P(-e)P(-a|B, -e)P(+j|-a)P(+m|-a) \end{aligned}$$



Для вычисления этого выражения необходимо сложить четыре терма, каждый из которых вычисляется путем умножения пяти чисел. В наихудшем случае, когда приходится находить сумму почти по всем переменным, сложность этого алгоритма для сети с n булевыми переменными равна $O(n2^n)$.

Рекурсивный перебор в глубину: пространств. сложность – $O(n)$, временная – $O(d^n)$

Дерево оценивания

Для упрощения получим соответствующее выражение только для случая Burglary = true:

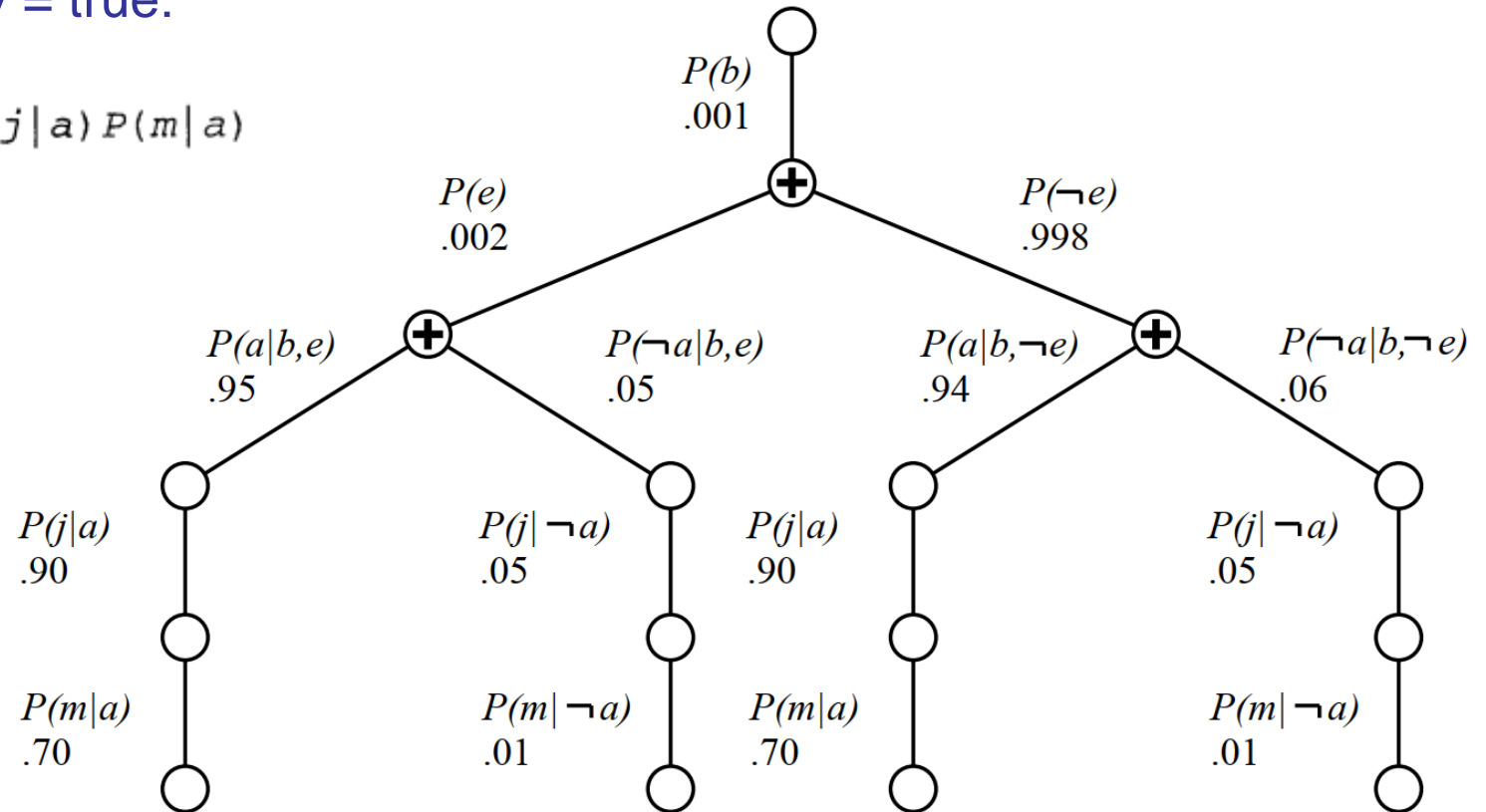
$$P(b|j,m) = \alpha P(b) \sum_e P(e) \sum_a P(a|b,e) P(j|a) P(m|a)$$

Из дерева оценивания видно, что вычисления неэффективны: произведения

$$P(j|a)P(m|a) \text{ и } P(j|\neg a)P(m|\neg a)$$

вычисляются дважды, по одному для каждого значения e .

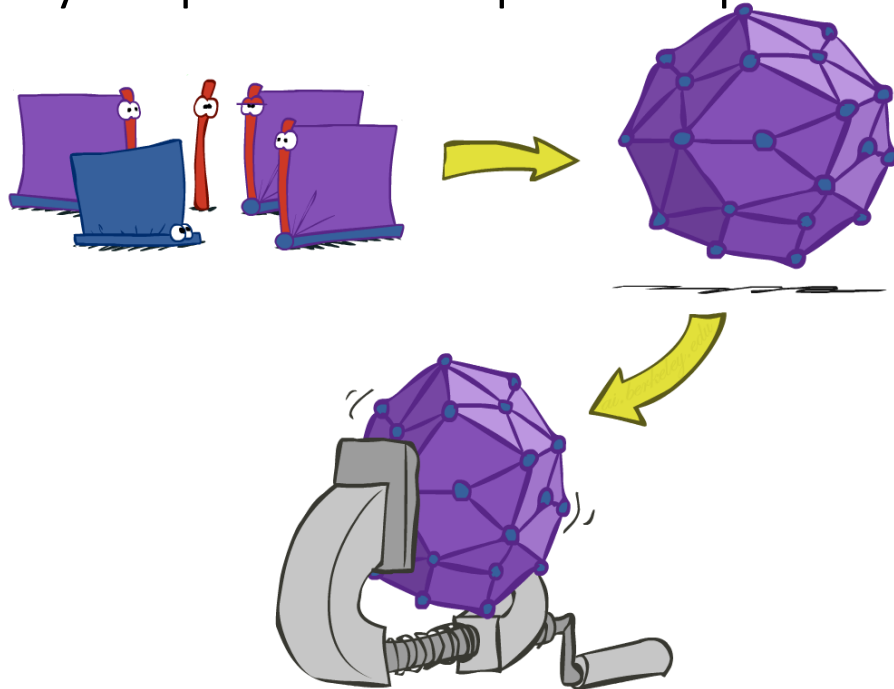
Далее будет рассмотрен **метод исключения переменных**, позволяющий избежать таких избыточных вычислений.



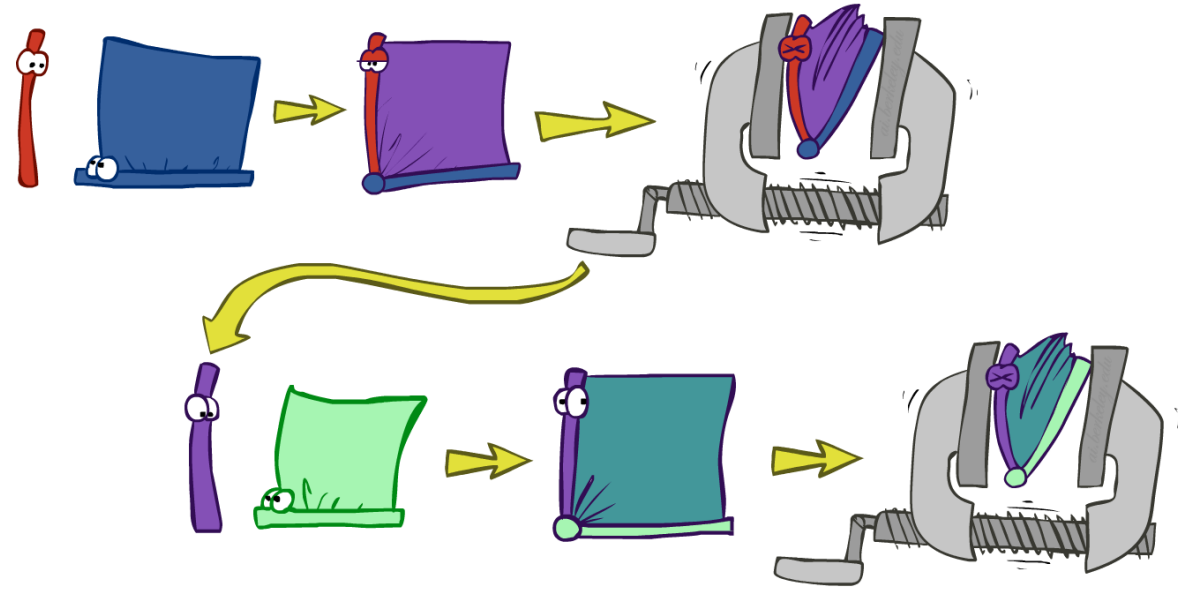
$$P(B|j,m) = \alpha <0.00059224, 0.0014919> \approx <0.284, 0.716>$$

Исключение переменных (VE- variable elimination)

- Почему вывод перебором такой медленный?
 - Объединяем факторы в полное совместное распределение до выполнения суммирования по скрытым переменным



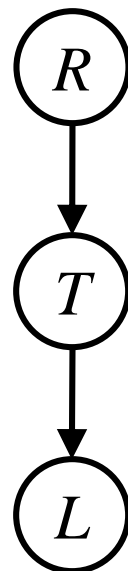
- Идея: разделить объединение и маргинализацию на этапы!
 - Метод называется “Исключение переменных”
 - Все еще NP-трудная задача, но обычно намного быстрее, чем вывод перебором



Пример: Трафик (вывод перебором)

■ Случайные переменные

- R: Дождь
- T: Трафик
- L: Опоздание!



$$P(L) = ?$$

$$= \sum_{r,t} P(r, t, L)$$

$$= \sum_{r,t} P(r)P(t|r)P(L|t)$$

$$P(R)$$

+r	0.1
-r	0.9

$$P(T|R)$$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2
-r	+t	0.1
-r	-t	0.9

$$P(L|T)$$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9

Вывод перебором: процедура

- Выделить **факторы** совместного распределения;
- Определить начальные факторы - локальные CPT ;

$$P(R)$$

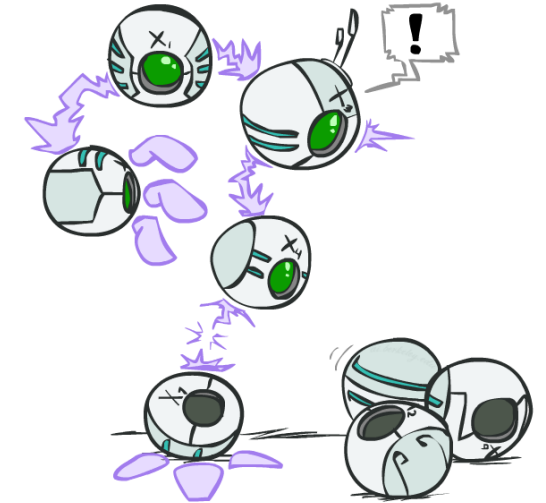
+r	0.1
-r	0.9

$$P(T|R)$$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2
-r	+t	0.1
-r	-t	0.9

$$P(L|T)$$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9



- Использовать все известные значения переменных;
 - Например, если мы знаем $L = +\ell$, то начальные факторы можно упростить

$$P(R)$$

+r	0.1
-r	0.9

$$P(T|R)$$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2
-r	+t	0.1
-r	-t	0.9

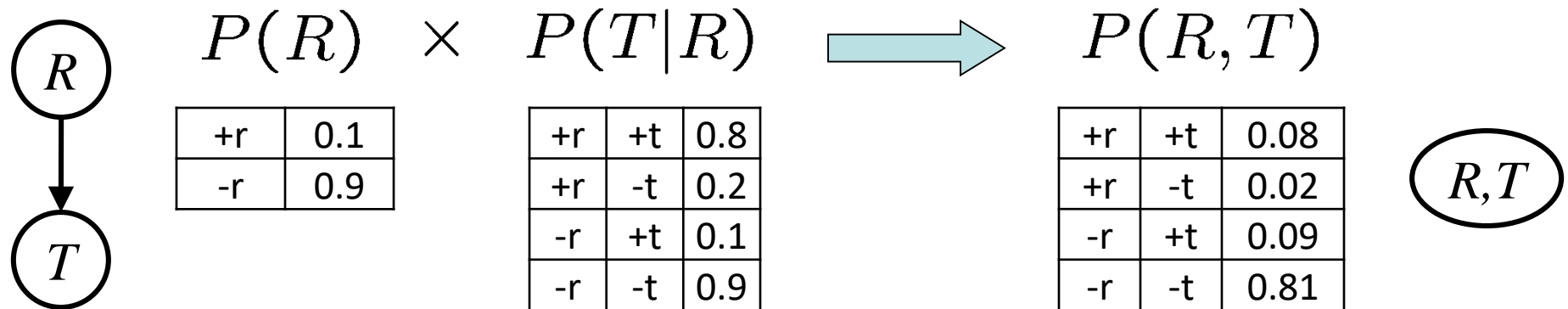
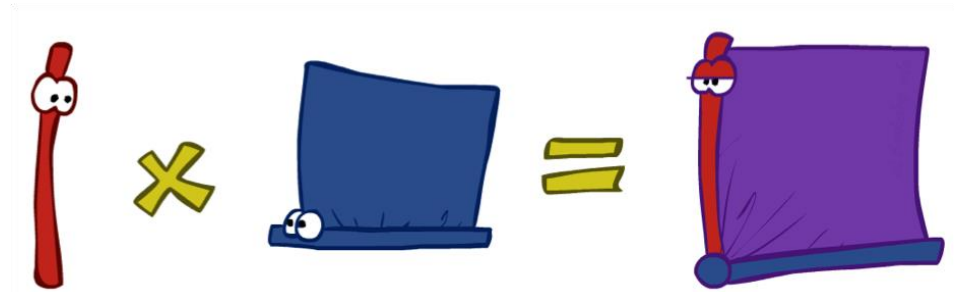
$$P(+\ell|T)$$

+t	+l	0.3
-t	+l	0.1

- **Процедура:** Найти произведение всех факторов, затем выполнить суммирование по всем скрытым переменным

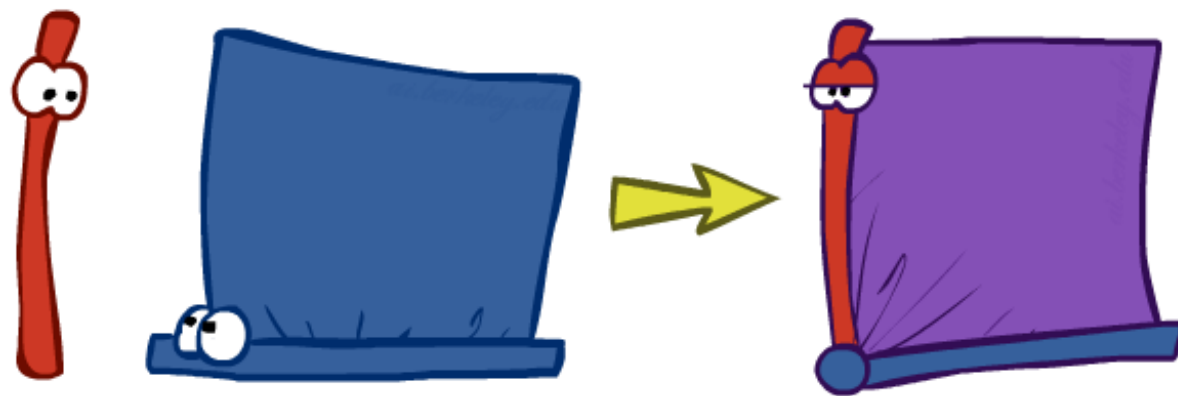
Операция 1: Объединение факторов

- Первая базовая операция: **объединение факторов**
- Комбинирование факторов:
 - Взять все факторы, содержащие объединяемые переменные;
 - Построить новый фактор путём объединения вовлеченных переменных.
- Пример: Объединение по R

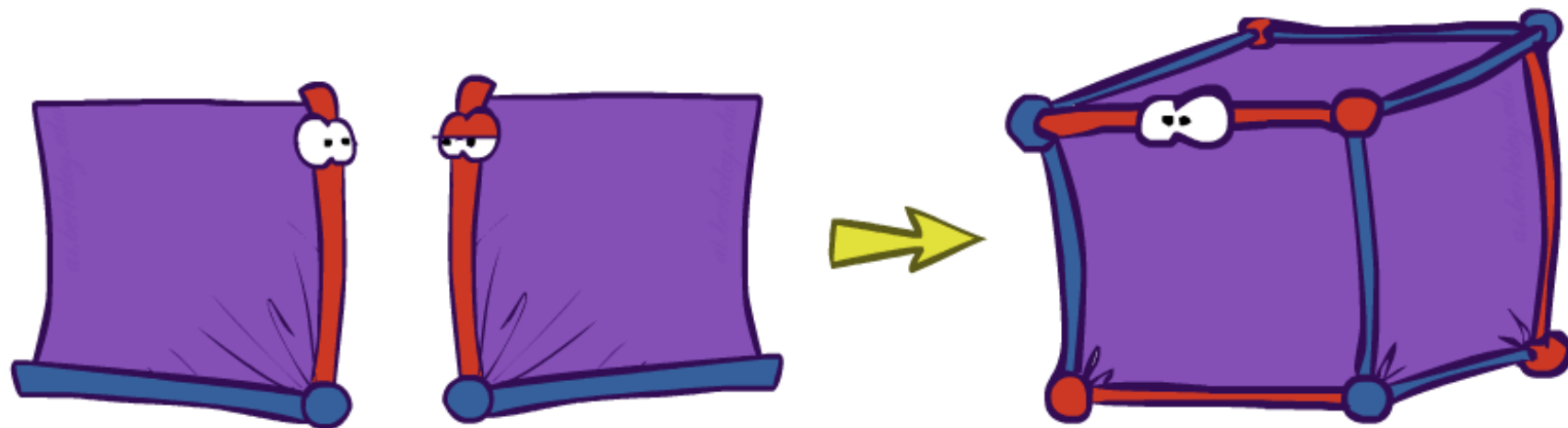


- Вычисление для всех входов точечного произведения: $\forall r, t : P(r, t) = P(r) \cdot P(t|r)$

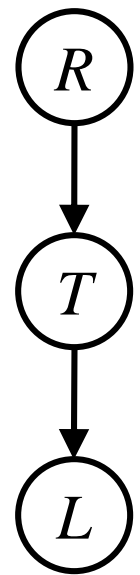
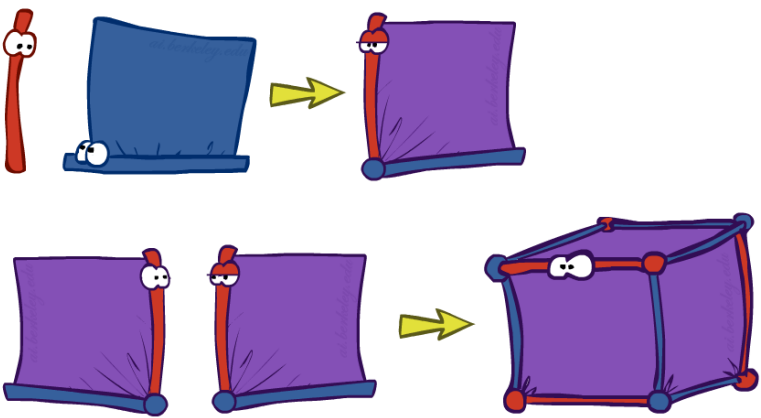
Пример: Многократные объединения



Объединяя
многократно получаем
большую размерность



Пример: Многократные объединения



$P(R)$

+r	0.1
-r	0.9

$P(T|R)$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2
-r	+t	0.1
-r	-t	0.9

$P(L|T)$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9

Объединение
по R

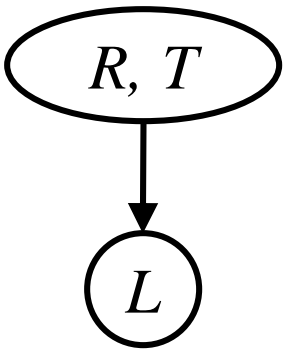


$P(R, T)$

+r	+t	0.08
+r	-t	0.02
-r	+t	0.09
-r	-t	0.81

$P(L|T)$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9



Объединение
по T



$P(R, T, L)$

+r	+t	+l	0.024
+r	+t	-l	0.056
+r	-t	+l	0.002
+r	-t	-l	0.018
-r	+t	+l	0.027
-r	+t	-l	0.063
-r	-t	+l	0.081
-r	-t	-l	0.729

Операция 2: исключение путем суммирования

- Вторая базовая операция: **маргинализация**
- Выбрать фактор и выполнить суммирование по переменным:
 - сжатие фактора ;
 - операция **проекции**.
- Пример:

$P(R, T)$

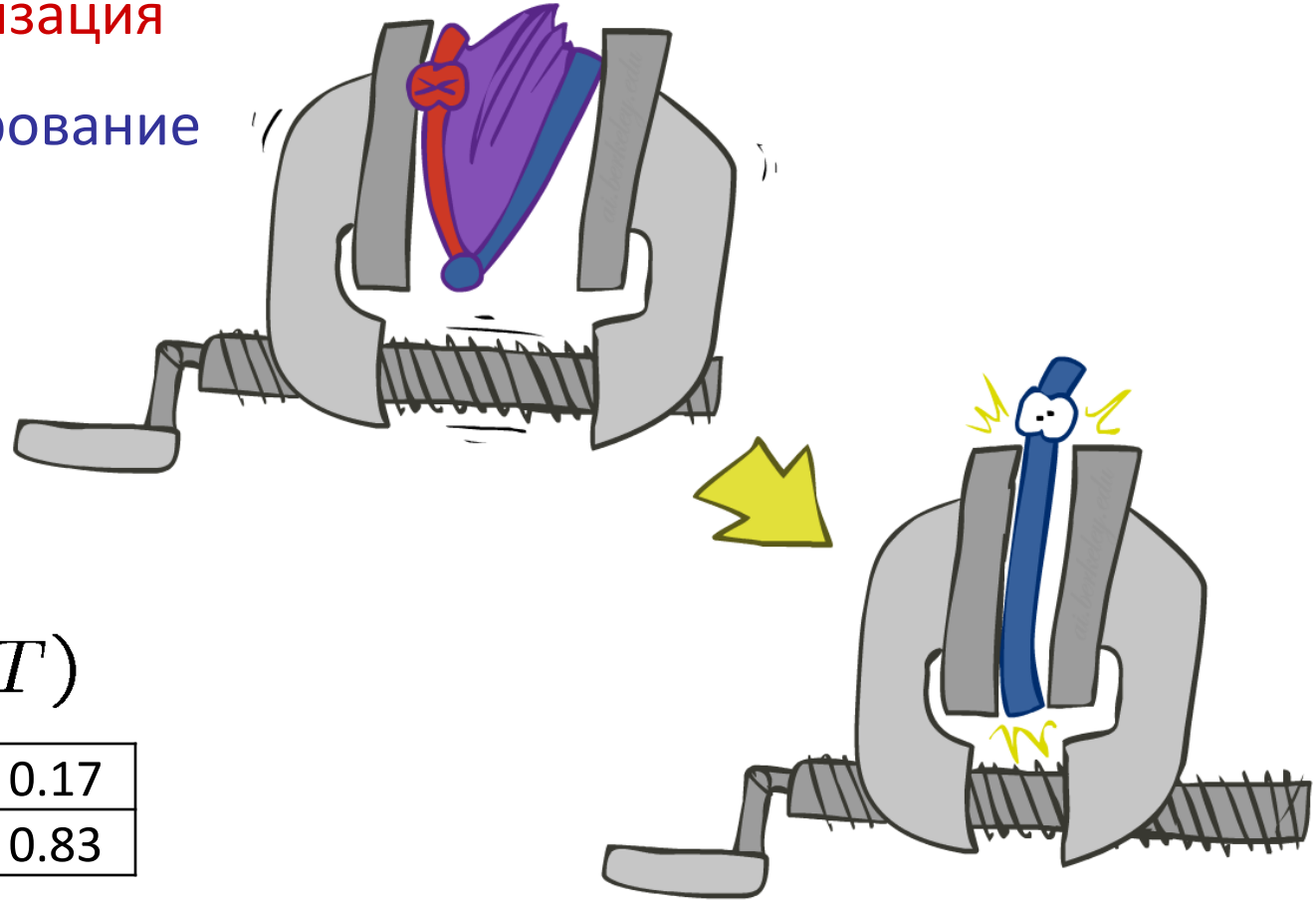
+r	+t	0.08
+r	-t	0.02
-r	+t	0.09
-r	-t	0.81

sum R



$P(T)$

+t	0.17
-t	0.83



Множественное исключение

$P(R, T, L)$

R, T, L			
+r	+t	+l	0.024
+r	+t	-l	0.056
+r	-t	+l	0.002
+r	-t	-l	0.018
-r	+t	+l	0.027
-r	+t	-l	0.063
-r	-t	+l	0.081
-r	-t	-l	0.729

Сумма
по R

→

$P(T, L)$

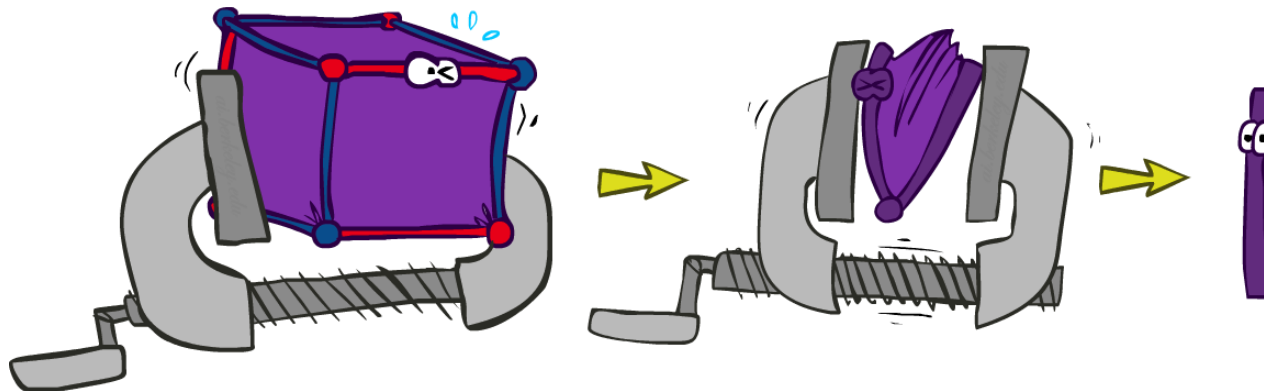
+t	+l	0.051
+t	-l	0.119
-t	+l	0.083
-t	-l	0.747

Сумма
по T

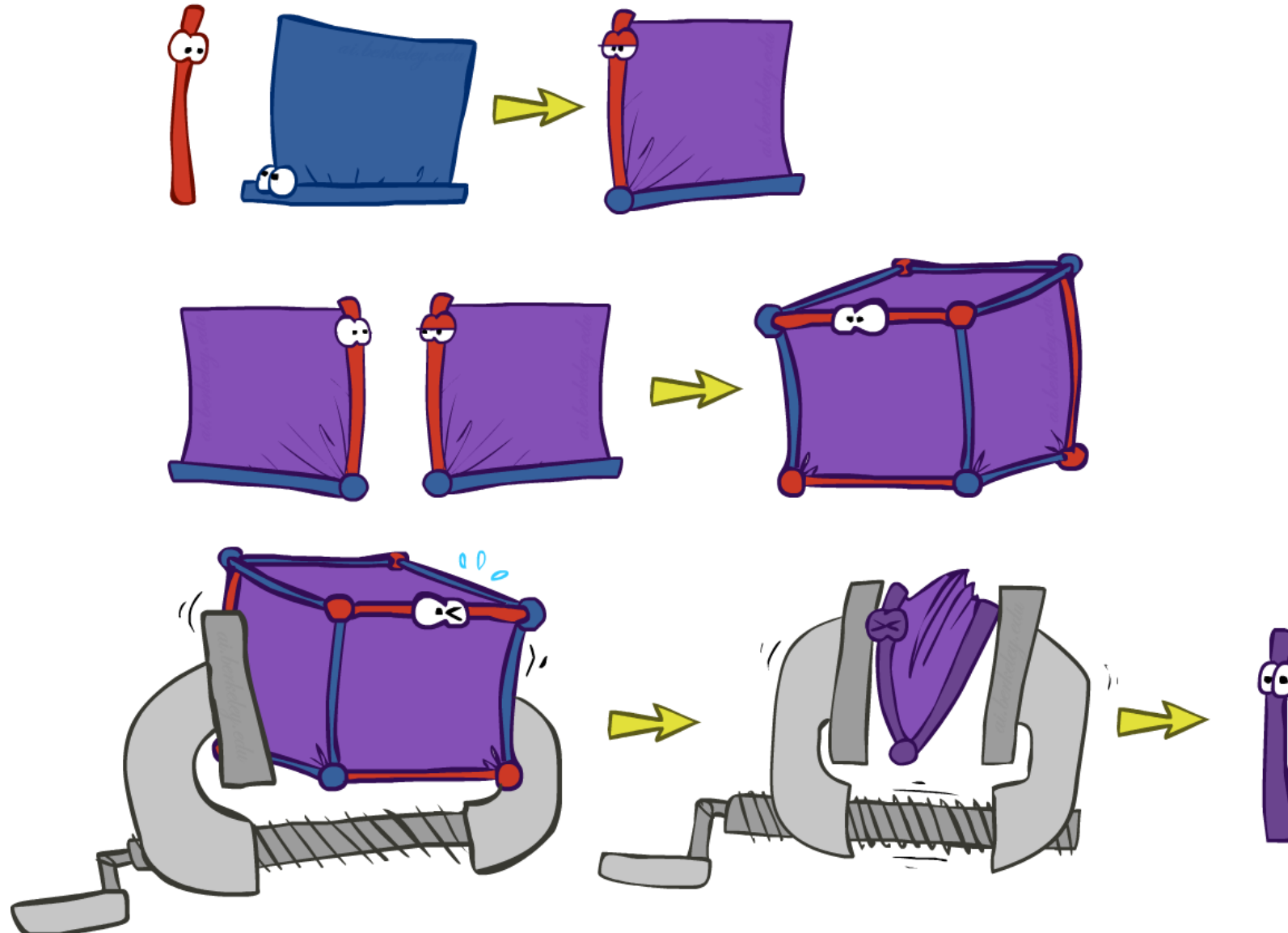
→

$P(L)$

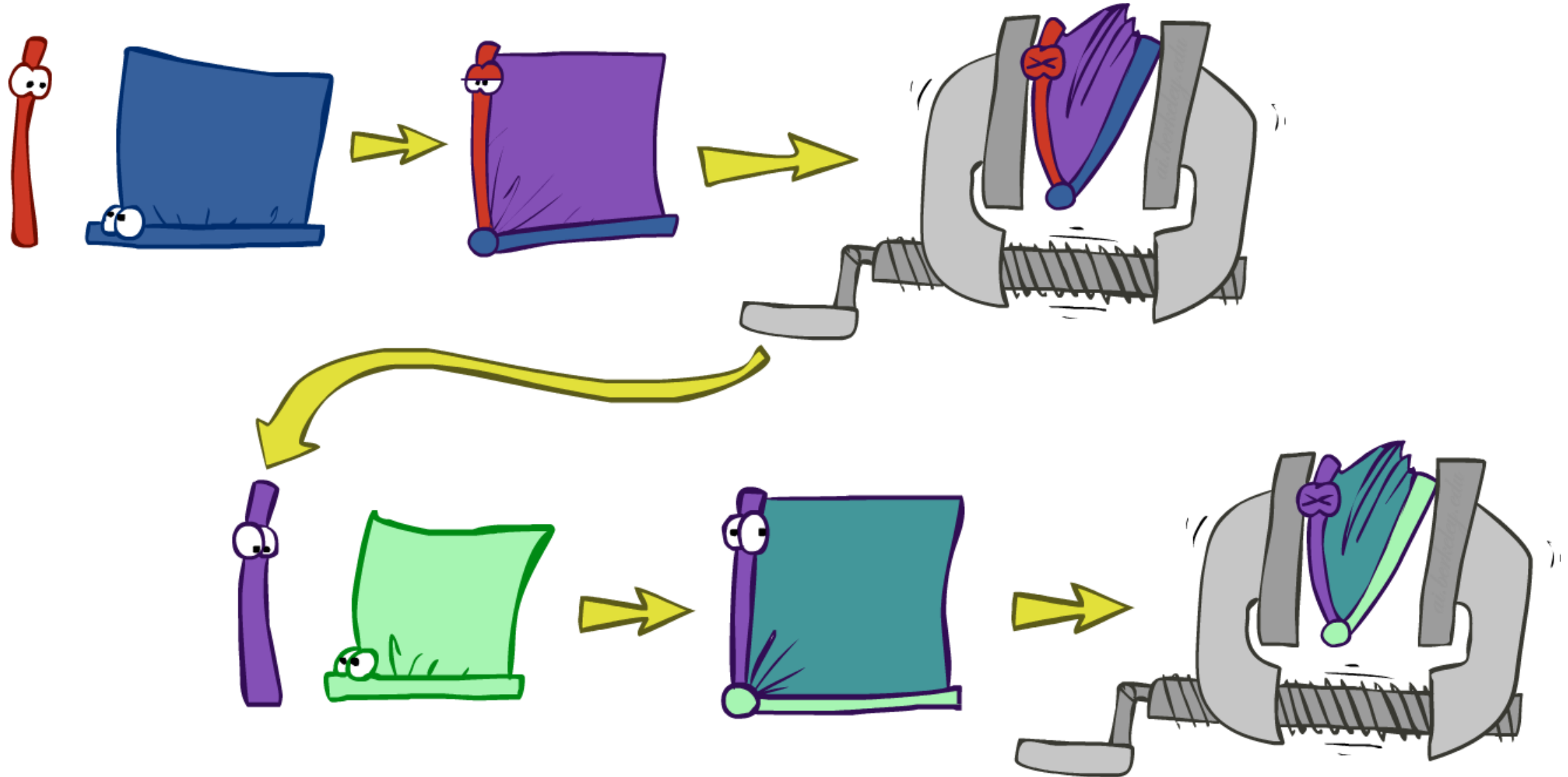
+l	0.134
-l	0.866



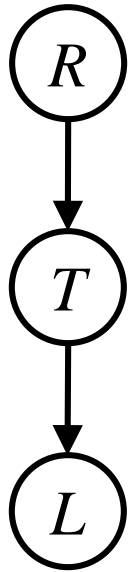
Итог: Вывод перебором = Многократное объединение + Многократное исключение



Ранняя маргинализация (= Исключение переменной)



Исключение переменных: пример Траффик



$$P(L) = ?$$

- Вывод перебором

$$= \sum_t \sum_r \underbrace{P(L|t)P(r)P(t|r)}_{\text{Объединение по } r}$$

Объединение по t

Исключение r

Исключение t

- Исключение переменных

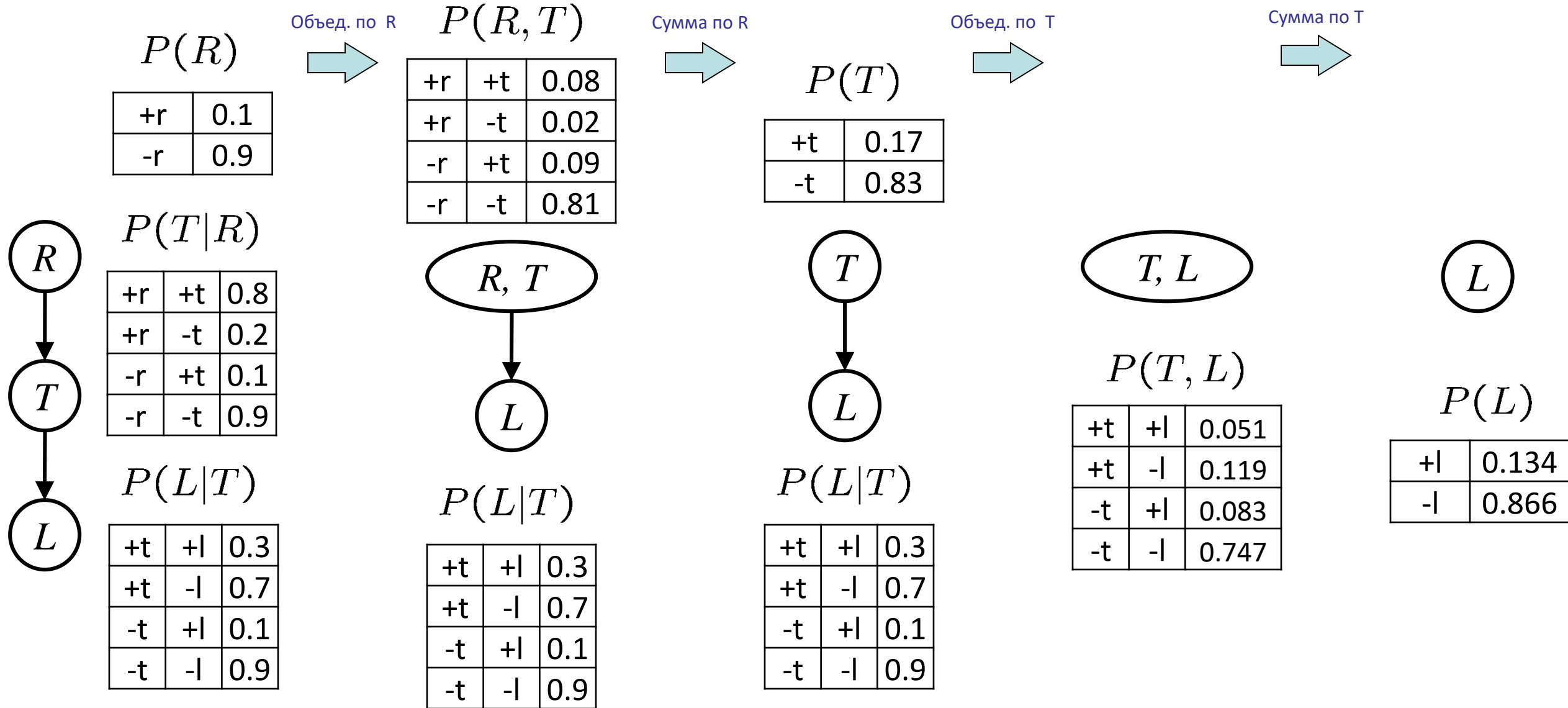
$$= \sum_t P(L|t) \underbrace{\sum_r P(r)P(t|r)}_{\text{Объединение } r}$$

Исключение r

Объединение t

Исключение t

Ранняя маргинализация! (она же VE)



Исключение переменных: операции

1. **Суммирование по переменной** в выражении в виде произведения факторов: вынести любые постоянные множители за пределы суммирования, добавить подматрицу суммы в точечное произведение оставшихся множителей:

$$\sum_x f_1 \times \cdots \times f_k = f_1 \times \cdots \times f_i \sum_x f_{i+1} \times \cdots \times f_k = f_1 \times \cdots \times f_i \times f_{\bar{X}}$$

Предполагаем, что f_1, \dots, f_i не зависит от X .

2. **Точечное произведение факторов** f_1 и f_2 :

$$\begin{aligned} f_1(x_1, \dots, x_j, y_1, \dots, y_k) \times f_2(y_1, \dots, y_k, z_1, \dots, z_l) \\ = f(x_1, \dots, x_j, y_1, \dots, y_k, z_1, \dots, z_l) \end{aligned}$$

Например:

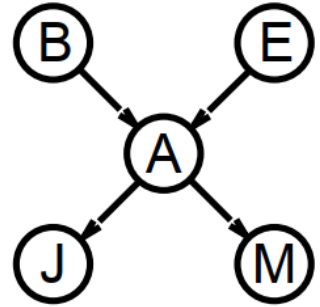
$$f_1(a, b) \times f_2(b, c) = f(a, b, c)$$

Исключение переменных: нерелевантные переменные

Рассмотрим запрос: $P(\text{JohnCalls} | \text{Burglary} = \text{true})$

$$P(J|b) = \alpha P(b) \sum_e P(e) \sum_a P(a|b, e) P(J|a) \sum_m P(m|a)$$

Сумма по m даёт 1. M не имеет отношения (нерелевантная) к запросу.



Теорема: Y нерелевантна запросу, если она не принадлежит $Y \in \text{Ancestors}(\{X\} \cup \mathbf{E})$

Здесь $X = \text{JohnCalls}$ -- переменная запроса, $\mathbf{E} = \{\text{Burglary}\}$ -- свидетельство, множество предков:

$$\text{Ancestors}(\{X\} \cup \mathbf{E}) = \{\text{Alarm}, \text{Earthquake}\}$$

Следовательно MaryCalls нерелевантная переменная.

К запросу не относится любая переменная, которая не является предком переменной запроса или переменной свидетельства. Поэтому алгоритм исключения переменных должен удалять все эти переменные, прежде чем приступит к вычислению ответа на запрос.

Учет свидетельств I

- Для учета свидетельств начните с факторов, которые содержат эти свидетельства
 - Если нет свидетельств, то начальные факторы соответствуют CPT:

$$P(R)$$

+r	0.1
-r	0.9

$$P(T|R)$$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2
-r	+t	0.1
-r	-t	0.9

$$P(L|T)$$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9

- При запросе $P(L|+r)$, начальные факторы станут проще:

$$P(+r)$$

+r	0.1
----	-----

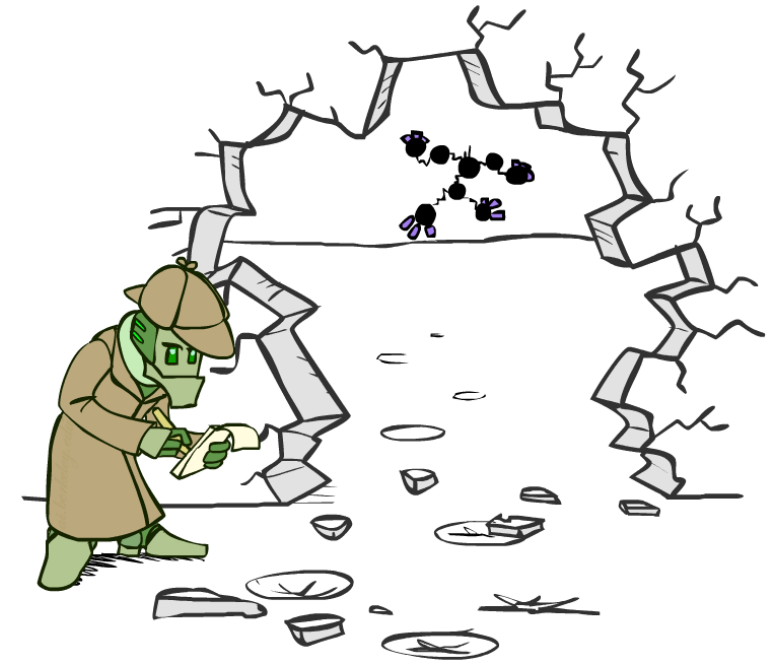
$$P(T|+r)$$

+r	+t	0.8
+r	-t	0.2

$$P(L|T)$$

+t	+l	0.3
+t	-l	0.7
-t	+l	0.1
-t	-l	0.9

- В ходе вывода исключаются все переменные, кроме тех которые входят в множество {запрос + свидетельства}



Учет свидетельств II

- Результат получается объединением запроса и свидетельств

- Например для $P(L \mid +r)$ мы получим:

$$P(+r, L)$$

+r	+l	0.026
+r	-l	0.074

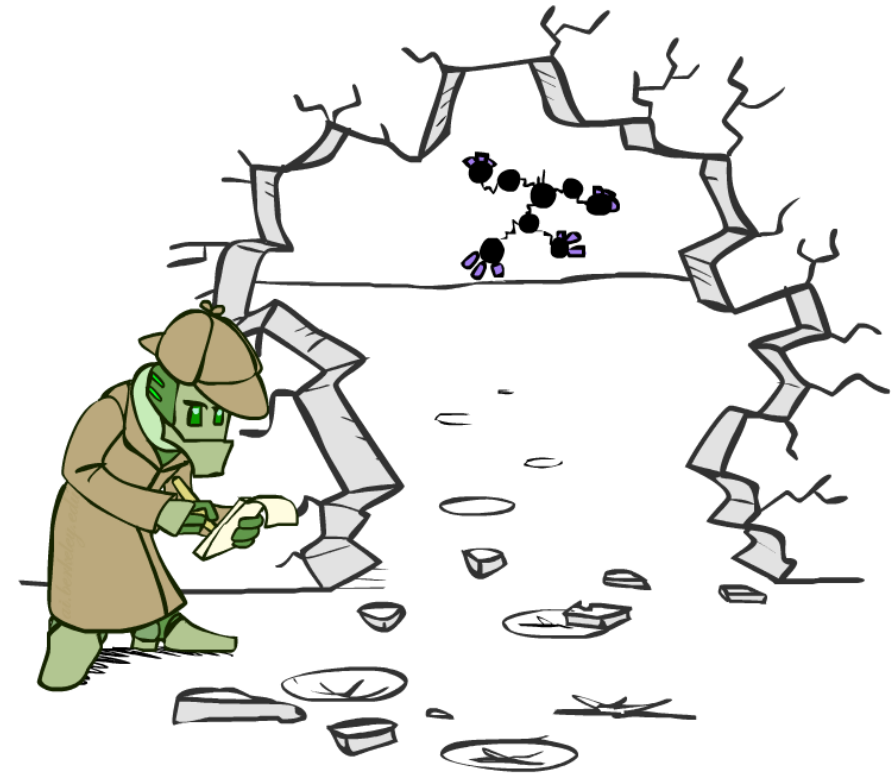
Нормализация



$$P(L \mid +r)$$

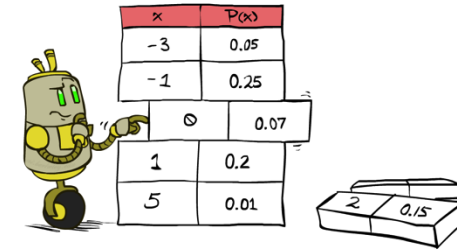
+l	0.26
-l	0.74

- Для получения ответа просто нормализуйте его!



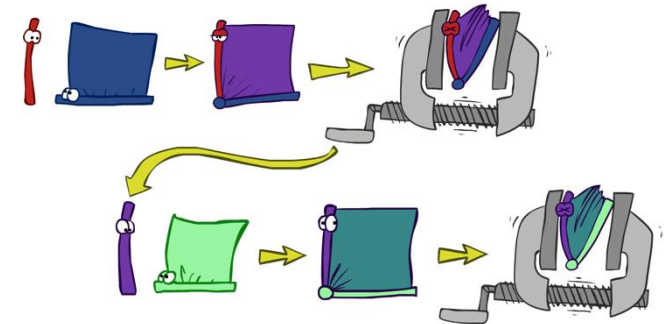
Исключение переменных: обобщение

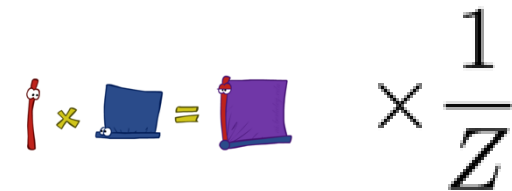
- Запрос: $P(Q|E_1 = e_1, \dots, E_k = e_k)$
- Начните с начальных факторов:
 - Локальные CPT (без инициализации свидетельств)
- Пока еще остаются скрытые переменные (не Q и не свидетельства):
 - Возьмите скрытую переменную H ;
 - Объедините все факторы, в которых упоминается H ;
 - Исключите H суммированием.
- Объедините все оставшиеся факторы и нормализуйте



x	$P(x)$
-3	0.05
-1	0.25
0	0.07
1	0.2
5	0.01

2 0.15

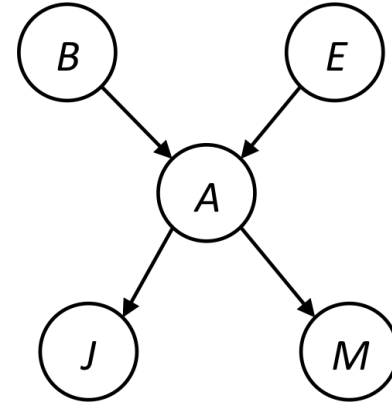



$$\text{stick} \times \text{blue square} = \text{purple square} \times \frac{1}{Z}$$

Пример: сеть Тревоги (исключение переменных)

$$P(B|j, m) \propto P(B, j, m)$$

$P(B)$	$P(E)$	$P(A B, E)$	$P(j A)$	$P(m A)$
--------	--------	-------------	----------	----------

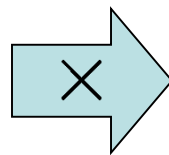


Выберите A

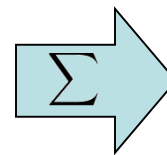
$$P(A|B, E)$$

$$P(j|A)$$

$$P(m|A)$$



$$P(j, m, A|B, E)$$



$$P(j, m|B, E)$$

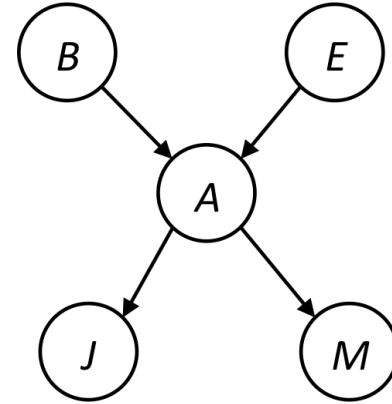
$P(B)$	$P(E)$	$P(j, m B, E)$
--------	--------	----------------

Пример: сеть Тревоги (исключение переменных)

$P(B)$	$P(E)$	$P(j, m B, E)$
--------	--------	----------------

Выберите E

$$\begin{array}{c} P(E) \\ P(j, m|B, E) \end{array} \xrightarrow{\times} P(j, m, E|B) \xrightarrow{\Sigma} P(j, m|B)$$



$P(B)$	$P(j, m B)$
--------	-------------

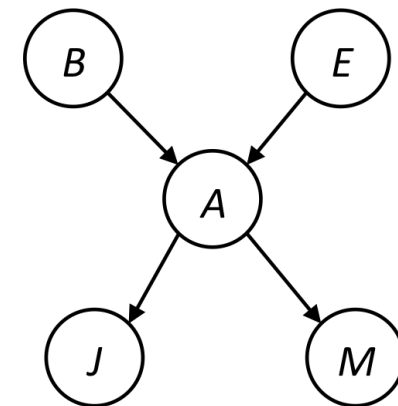
Объединяем оставшиеся факторы и нормализуем:

$$\begin{array}{c} P(B) \\ P(j, m|B) \end{array} \xrightarrow{\times} P(j, m, B) \xrightarrow{\text{Нормализация}} P(B|j, m)$$

Пример: сеть Тревоги (VE с использованием выражений)

$$P(B|j, m) \propto P(B, j, m)$$

$P(B)$	$P(E)$	$P(A B, E)$	$P(j A)$	$P(m A)$
--------	--------	-------------	----------	----------



$$P(B|j, m) \propto P(B, j, m)$$

$$= \sum P(B, j, m, e, a)$$

$$= \sum_{e, a} P(B)P(e)P(a|B, e)P(j|a)P(m|a)$$

$$= \sum_{e, a} P(B)P(e) \sum_a P(a|B, e)P(j|a)P(m|a)$$

$$= \sum_e P(B)P(e)f_1(j, m|B, e)$$

$$= P(B) \sum_e P(e)f_1(j, m|B, e)$$

$$= P(B)f_2(j, m|B)$$

Маргинальное может быть получено по СР суммированием

Используйте выражение для совместного распределения сети Байеса

используйте $x^*(y+z) = xy + xz$

Объединяя по a и затем суммируя, получаем f_1

Используйте $x^*(y+z) = xy + xz$

Объединяя по e и затем суммируя, получаем f_2

Другой пример исключения переменных

Запрос: $P(X_3|Y_1 = y_1, Y_2 = y_2, Y_3 = y_3)$

Используя свидетельства, получим следующие начальные факторы

$$P(Z), P(X_1|Z), P(X_2|Z), P(X_3|Z), P(y_1|X_1), P(y_2|X_2), P(y_3|X_3)$$

Удаляем X_1 и вводим фактор $f_1(y_1|Z) = \sum_{x_1} P(x_1|Z)P(y_1|x_1)$,
получаем

$$P(Z), P(X_2|Z), P(X_3|Z), P(y_2|X_2), P(y_3|X_3), f_1(y_1|Z)$$

Удаляем X_2 и вводим фактор $f_2(y_2|Z) = \sum_{x_2} P(x_2|Z)P(y_2|x_2)$,
получаем

$$P(Z), P(X_3|Z), P(y_3|X_3), f_1(y_1|Z), f_2(y_2|Z)$$

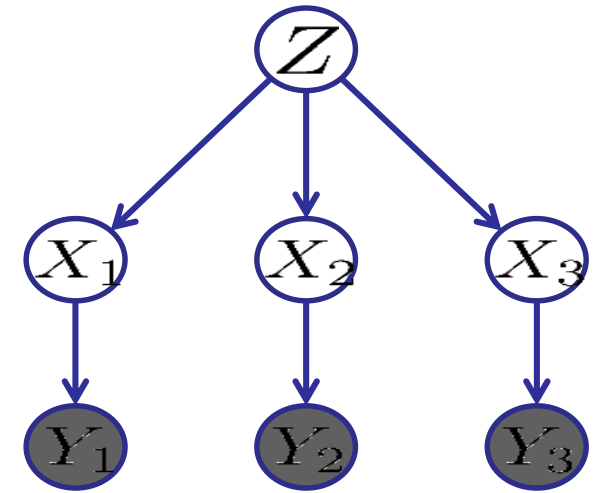
Удаляем Z и вводим фактор $f_3(y_1, y_2, X_3) = \sum_z P(z)P(X_3|z)f_1(y_1|Z)f_2(y_2|Z)$,
получаем

$$P(y_3|X_3), f_3(y_1, y_2, X_3)$$

Скрытых переменных нет. Объединяем оставшиеся факторы:

$$f_4(y_1, y_2, y_3, X_3) = P(y_3|X_3), f_3(y_1, y_2, X_3)$$

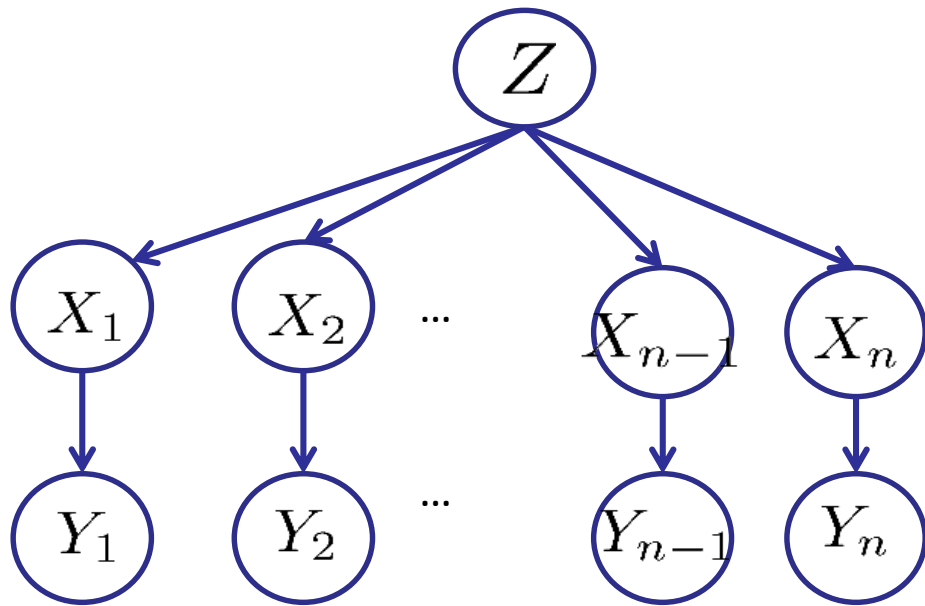
Нормализация по X_3 даёт $P(X_3|y_1, y_2, y_3) = f_4(y_1, y_2, y_3, X_3) / \sum_{x_3} f_4(y_1, y_2, y_3, x_3)$



Временная (вычислительная) сложность зависит от наибольшего фактора. **Размер фактора = числу входов таблицы.** В примере (бинарные переменные) размер всех факторов (f_1, f_2, f_3) равен 2 – так как все они зависят только от одной переменной (соответственно от Z и X_3).

Упорядочение удаляемых переменных

- Для запроса $P(X_n | y_1, \dots, y_n)$ в соответствии с примером на рисунке возможны 2 варианта упорядочения (объединения):
- X_1, \dots, X_{n-1}, Z и Z, X_1, \dots, X_{n-1} .
- Какой будет размер сгенерированного максимального фактора для каждого варианта упорядочения, где X_n - переменная запроса, y_1, \dots, y_n - это свидетельства?



Мы хотим знать какое распределение, у X_n , т.к. X_n - это переменная запроса. Все остальные переменные - это скрытые переменные, которые будут исключаться.

Начнем с объединения по X_1 : $P(y_1 | X_1) * P(X_1 | Z) = P(y_1, X_1 | Z)$. Затем суммируем по X_1 и получаем $P(y_1 | Z)$ и т.д.

Если начнем с объединения по Z , то $P(Z), P(X_1 | Z), \dots, P(X_n | Z)$ дают распределение $P(Z, X_1, \dots, X_n)$ - получаем монстра.

- Ответ: 2^n против 2 (для бинарных переменных)
- В общем: упорядочение может существенно влиять на эффективность.

VE: Временная и пространственная сложность

- Временная и пространственная сложности метода исключения переменных определяются размером наибольшего фактора
- Порядок исключения оказывает существенное влияние на размер наибольшего фактора.
 - Например, сложность для предыдущего слайда 2^n против 2
- Всегда ли существует такое упорядочение, которое обеспечивает малый размер фактора?
 - Нет!

Сложность точного вероятностного вывода

Сеть Тревоги принадлежит к семейству сетей, в которых имеется самое большее один неориентированный путь между любыми двумя вершинами в сети. Такие сети называются **односвязными** (singly connected) сетями или **полидеревьями** (polytree), и обладают одним привлекательным свойством: временная и пространственная сложности точного вероятностного вывода в полидеревьях линейно зависят от размера сети: $O(d^k n)$, где k – размерность наибольшего фактора (кол-во родителей для каждого узла).

Для **полидеревьев** можно всегда найти упорядочение, которое будет эффективным. Для приведения многосвязных ((multiply connected)) сетей к полидереву можно использовать удаление подмножества переменных, образующих подмножество разрыва цикла (аналогично CSP задачам).

Для **многосвязных** сетей процедура исключения переменных в наихудшем случае может иметь **экспоненциальную временную и пространственную сложность**, даже если количество родительских вершин в расчете на каждую вершину ограничено.

Сети Байеса



Представление



Условная независимость



Вероятностный вывод:

- вывод простым перебором (точный, экспоненциальная сложность);
- исключение переменных (точный, в наихудшем случае экспоненциальная сложность);
- вывод относится к NP-трудным задачам;
- **выборочный метод (аппроксимация);**
- Обучение сетей Байеса на данных