

Grafické pravděpodobnostní modely – učení z dat

Jiří Kléma

Katedra kybernetiky,
FEL, ČVUT v Praze



<http://ida.felk.cvut.cz>

Učení parametrů bayesovské sítě z dat

- pro každý uzel řešíme optimalizaci: $\widehat{\Theta}_j = \arg \max_{\Theta} L_j(\Theta_j : D)$
- demonstrujeme pro uzel RM, kde $\Theta_{RM} = \{Pr(rm)\}$
 - nechť $N(rm)$ je počet příkladů, v nichž platí $RM_j = TRUE$
 - maximalizaci L_{RM} provedeme derivací a srovnáním s 0

$$L_{RM}(\Theta_{RM} : D) = \prod_{m=1}^M Pr(RM : \Theta_{RM}) = Pr(rm)^{N(rm)}(1 - Pr(rm))^{M-N(rm)}$$

$$\frac{\partial L_{RM}(Pr(rm) : D)}{\partial Pr(rm)} = 0 \rightarrow Pr(rm) = \frac{N(rm)}{M}$$

- zobecněný vztah pro odhad parametrů je intuitivně zřejmý

$$\widehat{\theta}_{P_j | rodice(P_j)} = \frac{N(P_j, rodice(P_j))}{N(rodice(P_j))} \approx Pr(P_j | rodice(P_j))$$

- tento typ odhadu není možný pro řídká nebo neúplná data
 - pro řídká data Dirichlet priors a metoda max aposteriorní psti,
 - pro chybějící data Monte-Carlo vzorkování,
 - nebo EM optimalizace multimodální věrohodnostní funkce.

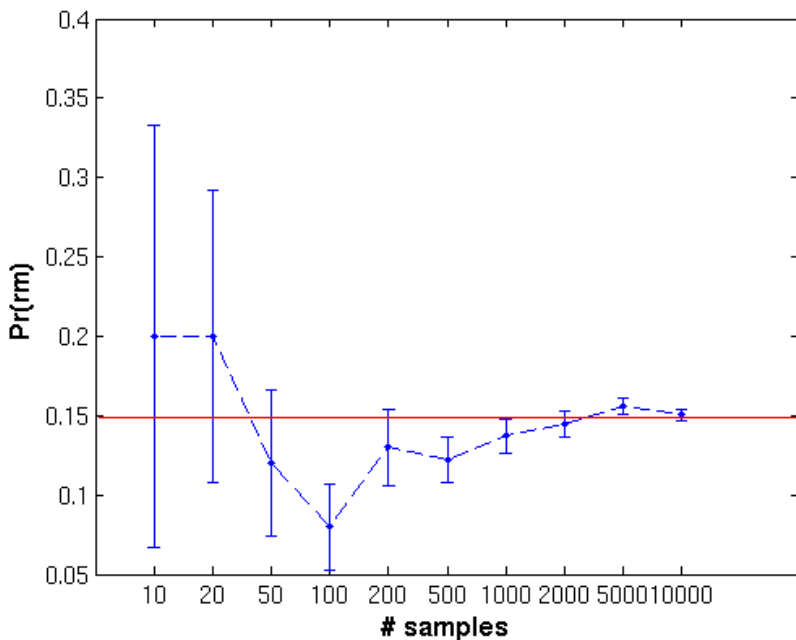
Učení parametrů z dat – ilustrace nároků na data

1. z existujícího modelu sítě generujeme data
 - model RODINA, různě velká m (počty pozorování),
 - jak se data generují?
 - již dříve Gibbsovo vzorkování,
 - v dané situaci nejnazší **dopředné vzorkování**, viz dále
2. kvantitativní parametry sítě znáhodníme
 - zůstane pouze struktura sítě,
 - původní CPTs jsou zapomenuty,
3. z dat naučíme parametry znovu
 - úplná pozorování – metoda maximální věrohodnosti (MLE),
 - neúplná pozorování – kombinace MLE odhadu a EM algoritmu,
4. porovnáme původní a naučené CPTs pro různě velká m
 - proč $Pr(rm)$ stanovíme snáze než $Pr(pv|rm, pn)$? viz grafy ...

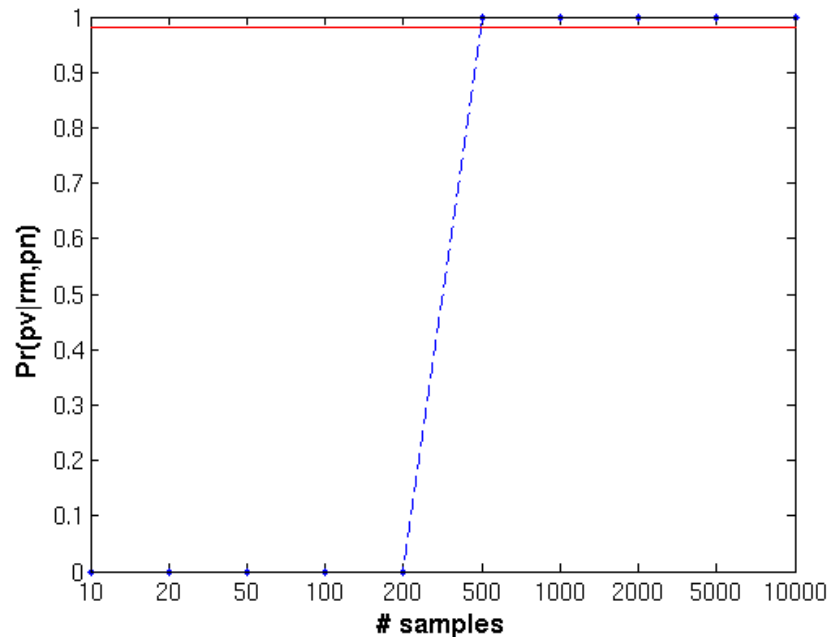
Učení parametrů z dat – úplná pozorování

- Jaká je pst, že rodina bude mimo dům?
 - $Pr(rm) = ?$
- K odhadu lze použít všechny vzorky ...

$$Pr(rm) = \frac{\sum_{m=1}^M \delta(RM^m, rm)}{M}$$



- Jaká je podmíněná pst, že je pes venku?
 - $Pr(pv|rm, pn) = ?$
- Podmínka splněna pouze pro 1.5 ‰ vzorků.
 - $Pr(rm) = 0.15$, $Pr(pn) = 0.01$,
 - RM a PN nezávislé veličiny.



Učení parametrů z dat – neúplná pozorování (50% ztráta)

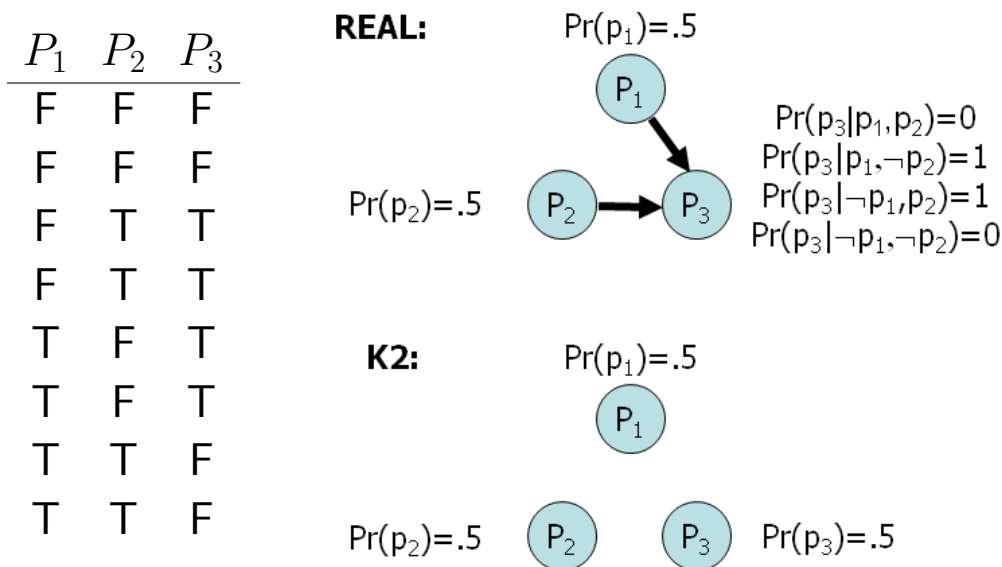
- absence pozorování jsou nezávislé na stavu proměnných
 - jednodušší varianta,
- není vhodné chybějící hodnoty ignorovat
 - ztráta i existujících pozorování,
- MLE odhad kombinujme s **EM** algoritmem:
 1. inicializuj parametry sítě (typicky náhodně),
 2. **E krok**: dopočítej chybějící pozorování z aktuální sítě (inference),
 3. **M krok**: parametry sítě modifikuj dle aktuálních úplných pozorování a kritéria MLE,
 4. opakuj kroky 2 a 3
 - (a) po předem daný maximální počet iterací (v experimentu 10),
 - (b) dokud nedojde ke konvergenci MLE kritéria (změna log L mezi kroky < 0.001).

Učení struktury sítě – realizace

- nelze aplikovat hodnotící fci na všechny z 2^{n^2} grafů,
- aplikujeme heuristiky a metaheuristiky pro řešení obtížných problémů
 - př. metaheuristiky – **lokální prohledávání**
 - * začíná s danou sítí (prázdnou, expertovou, náhodnou),
 - * poté sestaví všechny “blízké” sítě, ohodnotí je a přejde na nejlepší,
 - * skončí, pokud žádná změna už nevylepší ohodnocení,
 - př. doprovodných heuristik
 - * definice “blízké” sítě,
 - * řešení problému uváznutí v lokálním minimu nebo na plateaux
 - náhodné restarty, simulované žíhání, TABU search.

K2 – lokalita hladového prohledávání

- mějme binární veličiny P_1, P_2, P_3 , nechť $\pi = \{1, 2, 3\}$ a D jsou dána tabulkou



$$g(P_2, \emptyset) = \frac{4!4!}{9!} = \frac{4!}{9 \times 8 \times 7 \times 6 \times 5} = \frac{1}{630}$$

$$g(P_2, \{P_1\}) = \left(\frac{2!2!}{5!}\right)^2 = \left(\frac{1}{180}\right)^2 = \frac{1}{32400}$$

K2: STOP, žádná hrana z P_1 do P_2

$$g(P_3, \emptyset) = g(P_2, \emptyset) = \frac{1}{630}$$

$$g(P_3, \{P_1\}) = \left(\frac{2!2!}{5!}\right)^2 = \left(\frac{1}{180}\right)^2 = \frac{1}{32400}$$

$$g(P_3, \{P_2\}) = g(P_3, \{P_1\})$$

K2: STOP, žádná hrana do P_3 , přitom

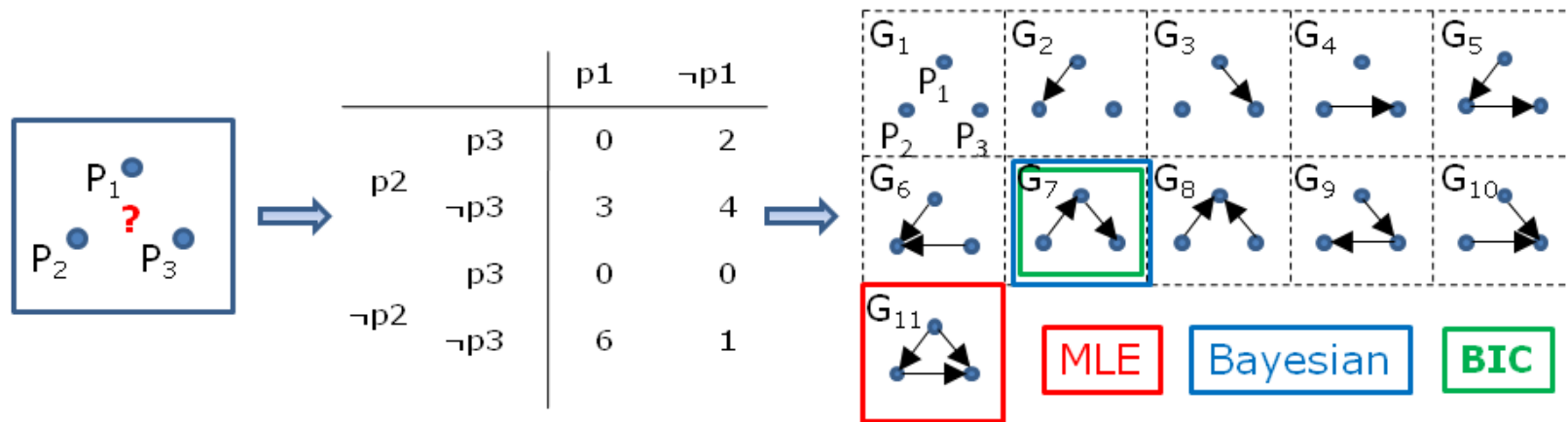
$$g(P_3, \{P_1, P_2\}) = \left(\frac{2!}{3!}\right)^4 = \left(\frac{1}{3}\right)^4 = \frac{1}{81}$$

- drobná vylepšení

- aplikuj K2 a K2Reverse a vyber lepší řešení
 - * K2Reverse vychází z plně propojeného grafu a hrany hladově odebírá,
 - * řeší problém výše, není obecným řešením problému,
- náhodně restartuj algoritmus (různá uspořádání uzlů i počáteční grafy).

Učení struktury z dat – příklad pro 3DAG

- zvol model se 3 uzly, generuj 16 příkladů,
- úplně prohledej všech 11 reprezentantů tříd markovské ekvivalence,
- použij 3 různá kritéria (věrohodnost, bayesovké a BIC) k identifikaci optimálního modelu.



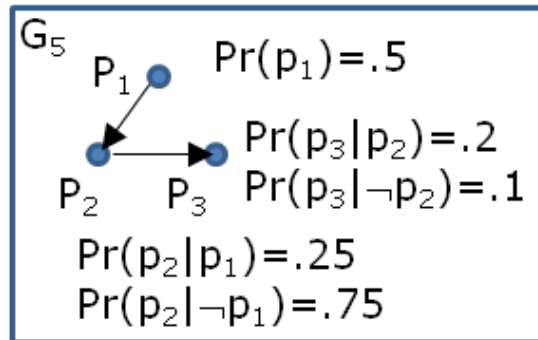
- hodnotím G_1 postupně pomocí tří kritérií:

– věrohodnost: nejprve MLE optimální parametry $Pr(p_1) = Pr(p_2) = \frac{9}{16}$, $Pr(p_3) = \frac{1}{8}$

$$\ln L(G_1 : D) = \sum_{m=1}^{16} Pr(d_m : G_1) =$$

$$= 2 \ln\left(\frac{7}{16} \frac{9}{16} \frac{1}{8}\right) + 3 \ln\left(\frac{9}{16} \frac{9}{16} \frac{7}{8}\right) + 10 \ln\left(\frac{9}{16} \frac{7}{16} \frac{7}{8}\right) + \ln\left(\frac{7}{16} \frac{7}{16} \frac{7}{8}\right) = -27.96$$

Učení struktury z dat – příklad pro 3DAG



| | | | | |
|---|---|-------------------------------------|-------------------------------------|--|
| G_1 -27.96 -31.98 -32.12 | G_2 -25.59 -30.56 -31.14 | G_3 -26.12 -31.78 -31.67 | G_4 -26.70 -32.32 -32.25 | G_5 -24.33 -30.92 -31.26 |
| G_6 -25.32 -31.03 -33.64 | G_7 -23.75 -30.36 -30.68 | G_8 -24.64 -30.56 -32.96 | G_9 -24.86 -31.33 -31.79 | G_{10} -25.75 -33.04 -34.07 |
| G_{11} -23.38 -31.62 -33.08 | MLE | Bayesian | BIC | |

- ani jedno z kritérií neodhalilo původní graf
 - u MLE došlo podle očekávání k přeučení,
 - BIC a Bayes trpí nedostatkem příkladů.

