Байесовский выбор моделей: гамильтоновы методы Монте-Карло по схеме марковских цепей (HMC)

Александр Адуенко

20е ноября 2019

Содержание предыдущих лекций

- Формула Байеса и формула полной вероятности;
- Определение априорных вероятностей и selection bias;
- (Множественное) тестирование гипотез
- Экспоненциальное семейства. Достаточные статистики.
- Наивный байес. Связь целевой функции и вероятностной модели.
- Линейная регрессия: связь МНК и $\mathbf{w}_{\text{ML}}$, регуляризации и $\mathbf{w}_{\text{MAP}}$.
- Свойство сопряженности априорного распределения правдоподобию.
- Прогноз для одиночной модели:
$$p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{X}_{\text{test}}, \mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}}) = \int p(\mathbf{y}_{\text{test}}|\mathbf{w}, \mathbf{X}_{\text{test}})p(\mathbf{w}|\mathbf{X}_{\text{train}}, \mathbf{y}_{\text{train}})d\mathbf{w}.$$
- Связь апостериорной вероятности модели и обоснованности
- Обоснованность: понимание и связь со статистической значимостью.
- Логистическая регрессия: проблемы ML-оценки $\mathbf{w}$ и связь априорного распределения с отбором признаков.
- EM-алгоритм и отбор признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный EM-алгоритм. Смесь моделей лог. регрессии.
- Гауссовские процессы. Учёт эволюции моделей во времени.
- Построение адекватных мультимоделей.
- Сэмплирование. Схема Гиббса и схема Метрополиса-Хастингса.

Идея MCMC

Пусть имеется однородная марковская цепь с функцией плотности вероятности перехода между состояниями $q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$.

- Возьмем некоторое $p_0(\mathbf{Z})$ и сгенерируем $\mathbf{Z}_0 \sim p_0(\mathbf{Z})$;
- Генерируем $\mathbf{Z}_{i+1} \sim q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$, $i = 0,\ 1,\ \ldots$;
- Выбрасываем первые m_0 наблюдений (и прореживаем, если нужна НОР (i.i.d) выборка).

Вопрос: при каких условиях такая схема приведет к получению выборки из $p(\mathbf{Z})$?

Условие 1: $p(\mathbf{Z})$ инвариантно относительно цепи, то есть $p(\mathbf{Z}_{i+1}) = \int p(\mathbf{Z}_i)q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)d\mathbf{Z}_i$ (стационарное распределение).

Достаточное условие: $p(\mathbf{Z}_{i+1})q(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}_{i+1}) = p(\mathbf{Z}_i)q(\mathbf{Z}_{i+1}|\mathbf{Z}_i)$.

Условие 2: цепь эргодична, то есть стационарное распределение не зависит от начальных условий $\forall\, p_0(\mathbf{Z})\ p_i(\mathbf{Z}_i) \to p(\mathbf{Z})$ при $i \to \infty$.

Достаточное условие: $\forall\, \mathbf{s}\, \forall\, \mathbf{t}:\ p(\mathbf{t}) \neq 0\, q(\mathbf{t}|\mathbf{s}) > 0$.

Схема Метрополиса-Хастингса (Metropolis-Hastings)

$p(\mathbf{Z}) \propto \tilde{p}(\mathbf{Z})$, $r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$ – предложное распределение.

- Имеем $\mathbf{Z}_i$, сэмплируем $\mathbf{Z}^* \sim r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$;
- Вычисляем $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min\left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)r(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_i)}\right)$
- $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}^*$ с вероятностью $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$,
  $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}_i$ с вероятностью $1 - P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$.

Отсюда $q(\mathbf{Z}_{n+1}|\mathbf{Z}_n) = \begin{cases} r(\mathbf{Z}_{n+1}|\mathbf{Z}_n)P(\mathbf{Z}_{n+1}, \mathbf{Z}_n), \ \mathbf{Z}_{n+1} \neq \mathbf{Z}_n, \\ 1 - \int r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_n)P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_n)d\mathbf{Z}^*, \ \mathbf{Z}_{n+1} = \mathbf{Z}_n. \end{cases}$

Достаточное условие эргодичности: $\forall\, \mathbf{s}\, \forall\, \mathbf{t} : \tilde{p}(\mathbf{t}) > 0,\ q(\mathbf{t}|\mathbf{s}) > 0.$

Замечание 1: для выполнения этого требования достаточно $r(\mathbf{t}|\mathbf{s}) > 0\, \forall\, \mathbf{s} \forall\, \mathbf{t}$.

Достаточное условие инвариантности: $\forall\, \mathbf{s}\, \forall\, \mathbf{t}\, \tilde{p}(\mathbf{s})q(\mathbf{t}|\mathbf{s}) = \tilde{p}(\mathbf{t})q(\mathbf{s}|\mathbf{t})$.

Замечание 2: Убеждаемся в выполнении условия подстановкой. Для $\mathbf{s} = \mathbf{t}$ очевидно. Пусть $\mathbf{s} \neq \mathbf{t}$, тогда $\tilde{p}(\mathbf{s})q(\mathbf{t}|\mathbf{s}) = \tilde{p}(\mathbf{s})q(\mathbf{t}|\mathbf{s}) = \tilde{p}(\mathbf{s})r(\mathbf{t}|\mathbf{s}) \min\left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{t})r(\mathbf{s}|\mathbf{t})}{\tilde{p}(\mathbf{s})r(\mathbf{t}|\mathbf{s})}\right) = \min(\tilde{p}(\mathbf{s})r(\mathbf{t}|\mathbf{s}),\ \tilde{p}(\mathbf{t})r(\mathbf{s}|\mathbf{t})) = \tilde{p}(\mathbf{t})q(\mathbf{s}|\mathbf{t})$.

Схема Метрополиса-Хастингса (продолжение)

- Имеем $\mathbf{Z}_i$, сэмплируем $\mathbf{Z}^* \sim r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}_i)$;
- Вычисляем $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min\left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)r(\mathbf{Z}_i|\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}_i)}\right)$
- $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}^*$, $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$, $\mathbf{Z}_{i+1} = \mathbf{Z}_i$, $1 - P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i)$.

Если $r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = r(\mathbf{Z}|\mathbf{Z}^*)$, то $P(\mathbf{Z}^*, \mathbf{Z}_i) = \min\left(1, \frac{\tilde{p}(\mathbf{Z}^*)}{\tilde{p}(\mathbf{Z}_i)}\right)$.

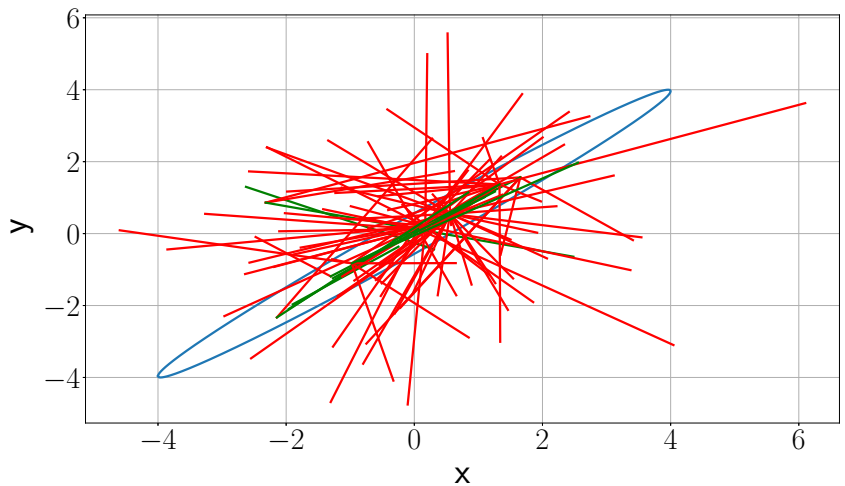
Пример

$$p(\mathbf{x}) = N(\mathbf{0}, \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0.95 \\ 0.95 & 1 \end{pmatrix}),$$

$\sigma = 2$,

$r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = N(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}, \sigma^2\mathbf{I})$.

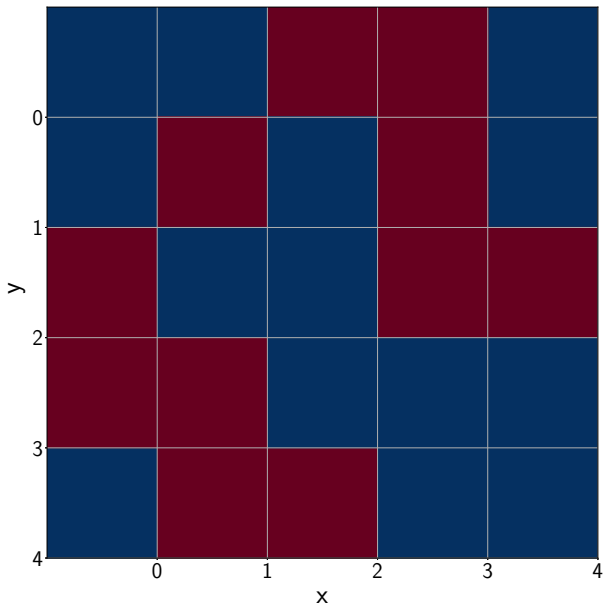
Результат сэмплирования



Релаксация модели Изинга

Пусть в каждой точке есть магнитный момент $x_i \in [-1, 1]$ и $p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z}\exp(-E(\mathbf{x})/T)$, где $E(\mathbf{x}) = -\sum_{(i,j)\in\varepsilon} x_i x_j - \sum_i h_i x_i$.

Реализация магнитных моментов



Намагниченность: $\mu = \left|\frac{1}{N}\sum_i x_i\right|$,

где N – число атомов в решетке.

Вопрос 1: как оценить среднюю намагниченность: $\mathsf{E}_p\mu$?

Уравнения Гамильтона

Пусть есть частица, которая движется в поле с потенциалом $U(\mathbf{x})$.

$\mathbf{x}$, $\mathbf{p}$ – координаты и импульс частицы.

$K(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^\top \mathbf{p}}{2m}$ – кинетическая энергия.

$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = U(\mathbf{x}) + K(\mathbf{p})$ – гамильтониан.

$$\boxed{\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i};\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}.}$$

Вопрос 2: зачем нам уравнения Гамильтона?

Свойства гамильтоновой динамики (HD)

$\boxed{\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i};\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}}$ – уравнения Гамильтона

$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{J}\nabla_{\mathbf{z}} H(\mathbf{z})$, где $\mathbf{z} = (\mathbf{x},\ \mathbf{p})$, $\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_n & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & \mathbf{0}_n \end{pmatrix}$.

Закон сохранения полной энергии: $\frac{dH(\mathbf{x},\mathbf{p})}{dt} = 0$.

Обратимость: $[\mathbf{x}(t+s),\ \mathbf{p}(t+s)] = \mathrm{HD}(\mathbf{x}(t),\ \mathbf{p}(t),\ s)$;

$[\mathbf{x}(t),\ \mathbf{p}(t)] = \mathrm{HD}(\mathbf{x}(t+s),\ \mathbf{p}(t+s),\ -s) = \mathrm{HD}(\mathbf{x}(t+s),\ -\mathbf{p}(t+s),\ s)$.

Сохранение фазового объема: $d\mathbf{p}d\mathbf{x} = \text{const}$.

Симплектичность: $\mathbf{B}^{\mathsf{T}}\mathbf{J}^{-1}\mathbf{B} = \mathbf{J}^{-1}$, где $\mathbf{B}$ – якобиан HD по паре $(\mathbf{x},\ \mathbf{p})$.

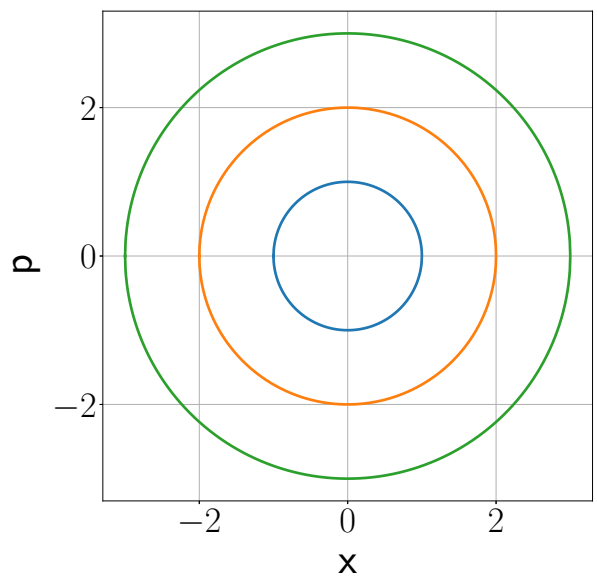
Пример

$U(x) = \frac{x^2}{2},\ K(p) = \frac{p^2}{2}$.

$\frac{dx}{dt} = p,\ \frac{dp}{dt} = -x$.

$x(t) = r\sin(t+\varphi)$,

$p(t) = r\cos(t+\varphi)$.



Гамильтоновы методы Монте-Карло (HMC)

$p(\mathbf{x},\, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z}\exp(-U(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\mathbf{p}^{\mathsf{T}}\mathbf{p})$, $U(\mathbf{x}) = -\log\tilde{p}(\mathbf{x})$ (считаем $m = 1$).
Идея: сэмплируем $(\mathbf{x}_1,\, \mathbf{p}_1),\, \ldots,\, (\mathbf{x}_m,\, \mathbf{p}_m)$ из $p(\mathbf{x},\, \mathbf{p})$ и выбрасываем $\mathbf{p}_i$.

Схема сэмлирования HMC:

1. Выбираем $\mathbf{x}^0$;
2. На шаге $j \geq 1$ сэмплируем $\mathbf{p}^j = N(\mathbf{0},\, \mathbf{I})$;
3. Решаем уравнения Гамильтона за интервал $\Delta t = T\varepsilon$, стартуя из $(\mathbf{x}^{j-1},\, \mathbf{p}^j)$ и получаем $(\mathbf{x}^j,\, \mathbf{p}^j_{\text{new}})$, переворачиваем импульс: $(\mathbf{x}^j,\, -\mathbf{p}^j_{\text{new}})$;
4. Принимаем новую точку с вероятностью $A = \min(1,\, \exp(-H(\mathbf{x}^j,\, -\mathbf{p}^j_{\text{new}}) + H(\mathbf{x}^{j-1},\, \mathbf{p}^j)))$;
5. Переходим на шаг 2.

Замечение: HMC есть частный случай схемы Метрополиса-Хастингса.

Вопрос 1: Чем задается предложное распределение в HMC?
Вопрос 2: Зачем переворачивать знак импульса?
Вопрос 3: Что было использовано при получении формулы шага 4?
Вопрос 4: Какие значения может принимать $-H(\mathbf{x}_1,\, \mathbf{p}_1) + H(\mathbf{x}_0,\, \mathbf{p}_0)$?
Вопрос 5: Гарантируется ли эргодичность для такой цепи?

Решение уравнений Гамильтона

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

– уравнения Гамильтона.

Настройка HMC

- $\mathbf{x}_0 : U(\mathbf{x}_0) \approx \max_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x})$;
- Запуск нескольких цепей;
- Выбор шага $\Delta t : A(1-A) \gg 0$;
- Оценка эффективной размерности выборки.

Вопрос 1: Зачем $U(\mathbf{x}_0) \approx \max_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x})$?

Вопрос 2: Как определить, что цепь сошлась?

Вопрос 3: Что дает условие $A(1-A) \gg 0$ на вероятность принятия объекта?

Вопрос 4: Как оценить эффективную размерность?

Метод Эйлера

$$\begin{cases} p_i(t+\varepsilon) = p_i(t) - \varepsilon \frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i}, \\ x_i(t+\varepsilon) = x_i(t) + \varepsilon p_i(t). \end{cases}$$

Проблема: Невязка через время T есть $O(T\varepsilon)$ (метод первого порядка).

Метод leapfrog

$$\begin{cases} p_i(t+\frac{\varepsilon}{2}) = p_i(t) - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial U(\mathbf{x}(t)}{\partial x_i}, \\ x_i(t+\varepsilon) = x_i(t) + \varepsilon p_i(t+\varepsilon), \\ p_i(t+\varepsilon) = p_i(t+\frac{\varepsilon}{2}) - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial U(\mathbf{x}(t+\varepsilon)}{\partial x_i}. \end{cases}$$

Замечание 1: Невязка через время T есть $O(T\varepsilon^2)$ (метод II порядка).

Замечание 2: Метод обратим: если сначала идти вперед по времени ΔT, а затем назад, то через ΔT вернемся в исходную точку.

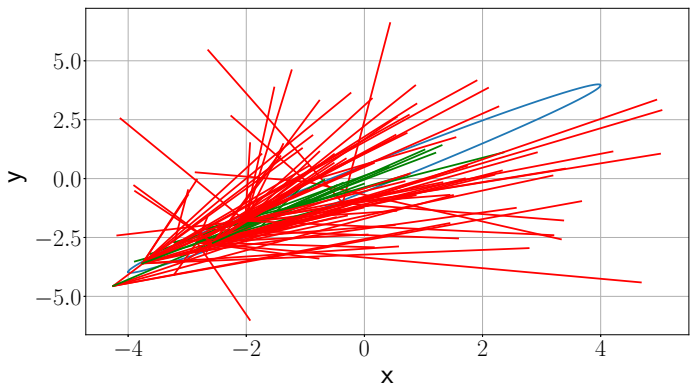
Замечание 3: Сохраняет модифицированную полную энергию.

Сравнение HD со схемой Метрополиса-Хастингса с диагональным предложным распределением

$$p(\mathbf{x}) = N\left(\mathbf{0},\, \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0.95 \\ 0.95 & 1 \end{pmatrix}\right),\ \sigma = 2.$$

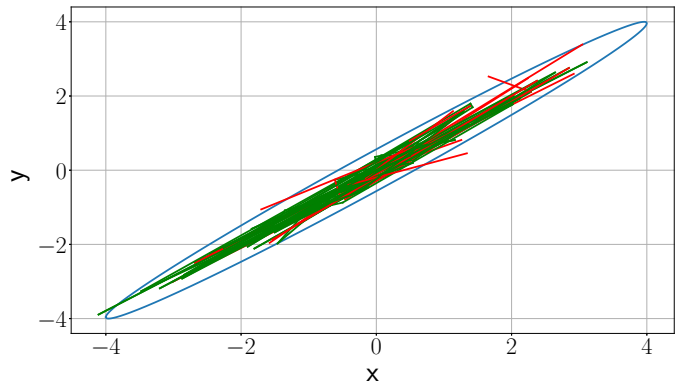
Метрополис-Хастингс

$r(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z}) = N(\mathbf{Z}^*|\mathbf{Z},\, \sigma^2\mathbf{I})$

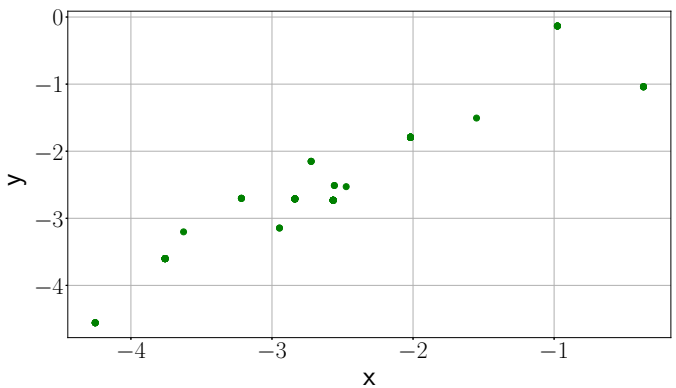


Гамильтонов МС

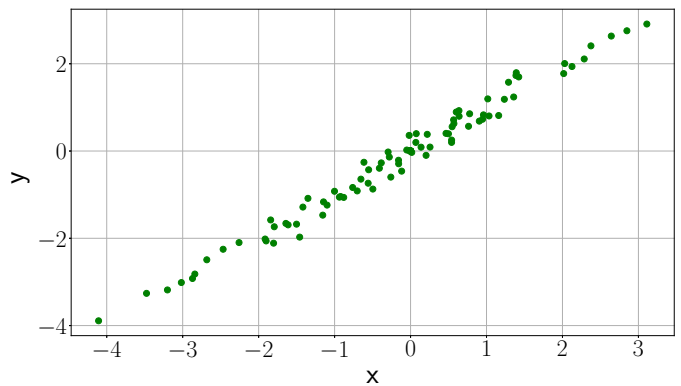
Leapfrog, $\varepsilon = 0.25$, $T = 6.25$.



Сгенерированные сэмплы



Сгенерированные сэмплы



Методы Монте-Карло по Ланжевену (Langevin Monte-Carlo)

Эквивалентная запись метода leapfrog:

$$\begin{cases} x_i(t+\varepsilon) = x_i(t) - \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} + \varepsilon p_i(t), \\ p_i(t+\varepsilon) = p_i(t) - \frac{\varepsilon}{2}\left(\frac{\partial U(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} + \frac{\partial U(\mathbf{x}(t+\varepsilon))}{\partial x_i}\right). \end{cases}$$

Схема сэмлирования LMC:

1. Выбираем $\mathbf{x}_0$;
2. На шаге $j \geq 1$ сэмплируем $\mathbf{p}^j = N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$;
3. Решаем уравнения Гамильтона за интервал малый интервал ε:
$$\begin{cases} \mathbf{x}^j = \mathbf{x}^{j-1} - \frac{\varepsilon^2}{2}\nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^{j-1}) + \varepsilon \mathbf{p}^j, \\ \mathbf{p}^j_{\text{new}} = \mathbf{p}^j - \frac{\varepsilon}{2}\left(\nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^{j-1}) + \nabla_{\mathbf{x}} U(\mathbf{x}^j)\right) \end{cases}$$
и переворачиваем импульс $(\mathbf{x}^j, -\mathbf{p}^j_{\text{new}})$;
4. Принимаем новую точку с вероятностью 1 в силу малости шага ε;
5. Переходим на шаг 2.

Замечание 1: Обычно LMC работает хуже, чем общий HMC.

Вопрос 1: В чём преимущество HMC по сравнению со схемой Гиббса?

Hint: Подумайте, может ли HMC генерировать из разных мод мультимодального распределения?

Литература

1. Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 523-556.
2. Steve Brooks et al. «Handbook of Markov Chain Monte Carlo», Chapter 5. URL: http://www.mcmchandbook.net/HandbookChapter5.pdf
3. MacKay, David JC. Bayesian methods for adaptive models. Diss. California Institute of Technology, 1992.
4. MacKay, David JC. "The evidence framework applied to classification networks."Neural computation 4.5 (1992): 720-736.
5. Gelman, Andrew, et al. Bayesian data analysis, 3rd edition. Chapman and Hall/CRC, 2013.
6. Дрейпер, Норман Р. Прикладной регрессионный анализ. Рипол Классик, 2007.