Bayes-verkkojen mahdollisuudet

Petri Myllymäki Henry Tirri

TEKES
Julkaisu xx/98
Helsinki 1998

Esipuhe

Alkusanat

Oppivien ja älykkäiden järjestelmien tutkimus on viime aikoina organisoitunut kokonaisuudeksi, josta käytetään myös nimiä *laskennallinen älykkyys* (computational intelligence) ja *soft computing.* Ajatuksena on, että vaikeissa päättelyongelmissa korvataan eksplisiittisten mallien ja ihmistietämyksen puute laskennallisilla (numeerisilla) malleilla, jotka sovitetaan tutkittavaan kohteeseen suurelta osin mittaustietoja hyväksikäyttäen. Tämä tietysti vain silloin, kun paremman puutteessa on pakko turvautua dataohjattuihin empiirisiin malleihin. Asiantuntijalla on kyllä näkemys kohteensa (esimerkiksi prosessi tai laite) toiminnasta, mutta tarkkojen ja ennustusvoimaisten mallien aikaansaamiseksi voi olla pakko täyttää puuttuvia osia soft computing-malleilla. Lopputulos on silloin monista osista koostuva *hybridimalli.*

Soft computing-alan valtavirrat ovat neuroverkot ja sumeat järjestelmät. Niillä on eniten sovelluksia niin Suomessa kuin muuallakin, alat ovat jo kypsyneet valmiiden ohjelmistopakettien ja hyvätasoisten oppikirjojen tasolle, ja runsaasti käyttökokemusta on olemassa neuroverkkojen tai sumeiden sääntöjen — tai molempien — soveltamisesta laajaan kirjoon käytännön ongelmia. Näitä kahta alaa sovelluksineen on selostettu Tekesin aikaisemmissa raporteissa "Sumean logiikan mahdollisuudet" (1993) ja "Neurolaskennan mahdollisuudet" (1994). Laskennalliseen älykkyyteen kuuluu kuitenkin muitakin metodiikkoja. Tärkeimmät ovat *evoluutiolaskenta*, etenkin geneettiset optimointialgoritmit, sekä *Bayes-verkot*, jota nyt käsillä oleva raportti käsittelee.

Voi tietenkin kysyä, onko yleensä mielekästä puhua tieteenalasta nimeltä laskennallinen älykkyys tai soft computing, joka määritellään tiettynä suljettuna menetelmäjoukkona. Varmaa ainakin on, että ala on voimakkaassa muutostilassa ja uusia teknologioita ja menetelmiä epäilemättä syntyy lähitulevaisuudessa, joten kuva on koko ajan muutostilassa. Eri menetelmien lähtökohdat ja sovellusmahdollisuudet ovat myös osittain erilaisia. Mielestäni — ja monen muunkin alan tutkijan mielestä — on järkevää niputtaa nämä uudet alat omaksi metodologiakseen tai tieteenalakseen, koska niillä on kuitenkin joukko yhteisiä piirteitä, jotka erottavat ne perinteisestä komputoinnista. Ensinnäkin niiden välillä on yhteyksiä: esimerkiksi neuroverkko-ja käytetään virittämään sumeita järjestelmiä, geneettisillä algoritmeilla voi tehokkaasti optimoida neuroverkkojen rakennetta, ja Bayes-verkot antavat matemaattisesti perustellun ja siksi voimakkaan mallin samoihin päättelyongelmiin, joita ratkotaan neuroverkoilla tai sumeilla järjestelmillä. Toiseksi, ja ehkä vieläkin tärkeämpänä syynä, on menetelmien perusidea ja lähtökohta — enemmän tai vähemmän biologisista tai kognitiivisista prosesseista johdetaan toimintamalleja, jotka yksinkertaistettuina ja muunneltuina sovitetaan oppiviksi ja älykkäiksi ratkaisuiksi käytännön ongelmiin. Tärkeää on nimen omaan laskennallisuuden korostaminen: oppivat ja älykkäät järjestelmät, ainakin realistisissa isoissa ongelmissa, toimivat tehokkaidenkin tietokoneiden äärirajoilla, eikä niitä olisi voinut ajatellakaan käytännön menetelminä vielä kymmenenkään vuotta sitten. Tietokoneiden tehon edelleen kasvaessa tulemme varmasti näkemään uusia laskennallisesti älykkäitä menetelmiä, jotka aina käyttävät kaiken saatavilla olevan laskentatehon yhä parempien ja parempien päättelymallien rakentamiseksi.

Mitä soveltaja tästä alojen niputtamisesta sitten hyötyy? Suoranaisesti ei paljoakaan. Kuitenkin ne valmiit menetelmät, joita hän ongelmiinsa kokeilee tai käyttää, ovat syntyneet tutkimuksen tuloksena, jossa erityyppisten oppivien ja älykkäiden järjestelmien vuorovaikutus on antanut uusia ideoita ja johtanut parempiin tuloksiin.

Bayes-verkot ovat päättelyjärjestelmiä, jotka nojautuvat vanhaan ja koeteltuun todennäköisyyslaskentaan, etenkin ns. bayesiläiseen päättelyyn. Lyhyesti sanottuna tämä tarkoittaa, että kaikille mallituksen elementeille — itse malliarkkitehtuurille, sovitettaville parametreille ja sovitukseen käytettävälle datalle — oletetaan todennäköisyysjakaumat, ja valitsemme sen mallin ja ne parametrit, jotka ovat kaikkein todennäköisimmät ottaen huomioon saamamme mittausdatan. Ajatus on elegantti ja sallii asiantuntijan tietämyksen käyttämisen, koska hän voi kokemuksensa perusteella valita erilaisten mallien ja parametrien etukäteistodennäköisyydet (priorit). Vaikeutena toisaalta on, että todennäköisyysformalismi eleganttisuudessaan voi olla liiankin yleinen — suurta joukkoa tarvittavia todennäköisyysjakaumia on hankala estimoida ja niitä yhdistäviä hyvin moniulotteisia integraaleja on vaikea laskea. Tällöin joudutaan voimakkaisiin yksinkertaistuksiin, jotka murentavat mallien tyylikästä formalismia. Kuitenkin yksinkertaistetutkin mallit ovat monissa käytännön ongelmissa, esimerkiksi luokittelussa, osoittautuneet hyvin tehokkaiksi ja toimiviksi.

Geneettiset algoritmit ovat optimointimenetelmiä. Niissä pyritään löytämään jonkin annetun kohdefunktion optimaalinen minimi tai maksimi. Funktion ei tarvitse olla annettuna matemaattisessa muodossa, vaan pikemminkin menetelmä puree parhaiten ongelmiin joissa kohdefunktion arvot joudutaan laskemaan tai simuloimaan ehkä kalliistikin tietokoneohjelmilla. Kohdefunktio voi kuvata vaikkapa hissin ohjausjärjestelmää tai jonkin suunniteltavan koneenosan muodon hyvyyttä. Erona useimpiin muihin optimointimenetelmiin geneettinen algoritmi käyttää joukkoa — sukupolvea — rinnakkaisia ratkaisuyritteitä, joista tietyillä satunnaisilla menetelmillä yhdistellään vielä parempi sukupolvi uusia ratkaisuyritteitä. Paremmuus mitataan laskemalla kohdefunktion arvot näille yritteille. Näitä sukupolvia lasketaan yhä uusia, kunnes niiden joukosta löytyy jokin riittävän hyvä ratkaisyksilö. Menetelmä on tehokas ja kohtalaisen helppo toteuttaa valmisohjelmistojen avulla. Vaikeutena on ehkä löytää optimointiongelmaa parhaiten kuvaava kohdefunktio ja sopivat muuttujat, joiden varaan ratkaisusukupolvet rakennetaan.

Korostettakoon tässä, että Bayes-verkot ja geneettiset algoritmit ovat käytännössä aivan eri menetelmiä, joiden sovellusalueetkin ovat erilaiset: Bayes-verkoille päättelymallit, diagnostiikka ja luokittelu, ja puolestaan geneettisille algoritmeille yleiset optimointiongelmat. Ne on kuitenkin tässä kirjassa koottu samoihin kansiin käytännön syistä. Selostukset ovat itsenäiset, ja lukija voi tutustua jompaankumpaan menetelmään aivan toisesta riippumatta.

Erkki Oja

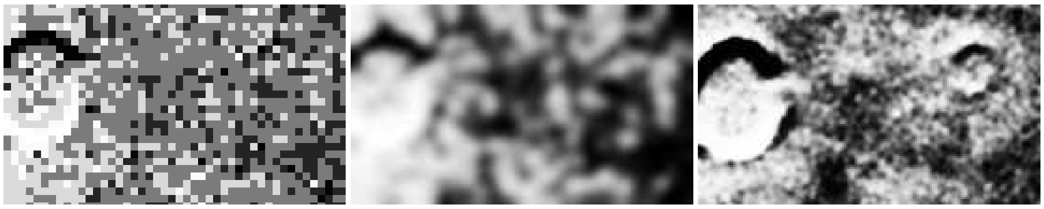
Tiivistelmä

Executive Summary

Sisältö

Johdanto

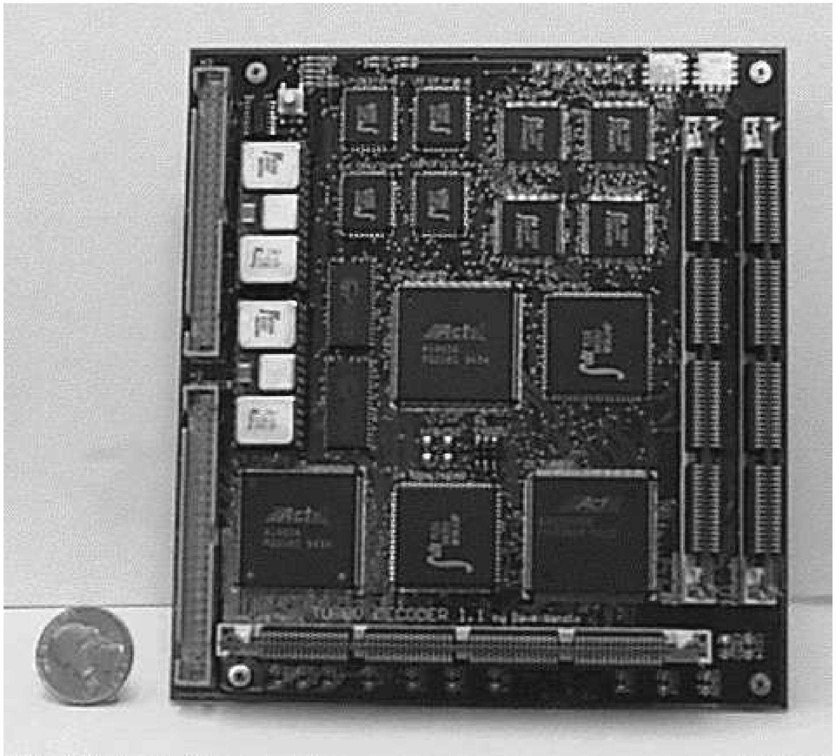
Seuraavassa on lueteltu joukko eri sovellusaloilla (kuvankäsittely, tiedon koodaus ja tiivistys, ohjelmistotekniikka) viime vuosina kehitettyjä merkittäviä teknologioita. Erilaisista sovellusalueistaan huolimatta nämä teknologiat perustuvat samaan taustalla olevaan teoreettiseen kehikkoon.



Kuva 1: Viking-luotaimen Marsin pinnasta ottamista kuvista muodostettu superresoluutiokuva. Vasemmalla: yksi 24 alkuperäisestä kuvasta. Keskellä: kuva perinteisillä kohinansuodatustekniikoilla käsiteltynä. Oikealla: 24 kuvan aineistosta yhdistetty superresoluutiokuva.

Superresoluutio. Viking-avaruusluotain tuottaa useita kuvia Mars-planeetasta. Kuvat on otettu samankaltaisissa valaistusolosuhteissa ja samoista kohteista. Tällöin instrumenttien pienet orientaatio- ja kohdennuserot tuottavat kuitenkin hieman erilaisia kuvia samasta kohteesta. Tällaisesta kuvajoukosta voidaan yhdistelemällä tuottaa tietokoneella “superresoluutiokuva”: kuva joka on tarkempi kuin millään kohinansuodatustekniikalla yksittäisestä kuvasta saatu kuva (kuva 1). National Aeronautics & Space Administration (NASA) käyttää tätä useaan kuvaan perustuvaa superresoluutiotekniikkaa avaruusluotainten tuottamien kohinaisten kuvien parantamiseen, ja tällaisella kuvankäsittelytekniikalla on merkittäviä sovelluksia mm. lääketieteessä ja biotieteissä.

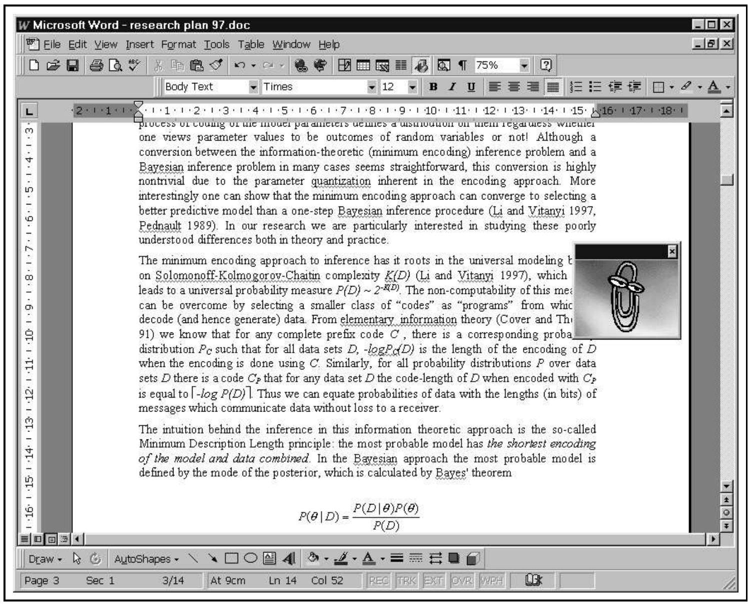
Turbo-koodaus. Tietoliikenteen määrän jatkuvasti kasvaessa tulee tiedon tehokkaasta koodaamisesta ja tiivistämisestä yhä keskeisempiä ongelmia. Vuonna 1993 kehitettyä turbo-koodausta pidetään koodausteorian merkittävimpänä keksintönä vuosikymmeniin. Turbo-koodaus soveltuu tiedon välittä-



Kuva 2: Turbo-koodauksen toteuttava piiri.

miseen kohinaista tiedonsiirtokanavaa käyttäen, ja sen tehokkuus tiedon välityksessä on moninverroin parempi aiempiin menetelmiin verrattuna. Turbokoodit ovat erityisen merkittävä edistysaskel avaruusteknologiassa, jossa ne ylittävät mm. Voyagerin käyttämän ns. "katenointikoodin" (concatenated codes) moninkertaisesti. Turbo-koodaus osoittaa myös kuinka nopeasti teoreettinen tutkimus siirtyy käytännön sovellukseksi, erilaisia turbo-koodeihin perustuvia piirejä valmistavat jo useat yhtiöt kuten Efficient Channel Coding Inc. (kuva 2).

Älykkäät agentit. Nykyiset tekstin ja kuvien käsittelyyn kehitetyt ohjelmistot ovat laajoja ohjelmakokonaisuuksia joiden monien piirteiden tehokas käyttäminen on vaikeaa, ja käytön oppiminen hidasta. Microsoft Office'97-ohjelmistossa käyttäjän apuna ovat "älykkäät agentit" (Office Assistants), jotka itsenäisinä moduuleina tarkkailevat käyttäjän toimintaa ja tarjoavat apuaan käyttäjälle mm. monimutkaisten muotoilujen toteuttamisessa (kuva 3). Tällainen teknologia edellyttää varsin monimutkaista ohjelman toimintojen ja käyttäjän tarpeiden yhteismallinnusta, jotta agentti ei tarjoaisi vain triviaaleja ohjeita. Älykäs agenttiteknologia on erityisesti verkottumisen myö-



Kuva 3: Microsoftin Office Assistant-agentti.

tä muodostumassa yhdeksi tärkeimmistä uusista ohjelmistosuuntauksista, ja sen keskeisimpiä sovellusalueita ovat tiedon haussa avustaminen, liikkuva tietojenkäsittely sekä ohjelmistojen ja laitteiden konfiguroinnissa avustaminen.

Mikä sitten on yhteistä näille edellä lyhyesti esitetyille tekniikoille? Vastaus liittyy sovellusten taustalla olevaan mallinnukseen joka perustuu ns. bayesiläiseen lähestymistapaan muodostaa malleja ja käyttää niitä päätöksenteossa. Yksinkertaisimmillaan bayesiläisen mallinnuksen voi ymmärtää todennäköisyyslaskentaan perustuvana menetelmänä, joka vastaa kysymykseen, miten käsityksemme jostakin asiasta (uskomuksemme jonkin asian totuudesta) muuttuu kun saamme asiaan liittyvää uutta tietoa. Bayesiläinen mallintaminen on kunnioitettavasta iästään huolimatta — perusteet esitettiin jo 200 vuotta sitten — yksi nopeimmin kehittyviä ja kasvavia mallinnusmenetelmiä, ja sen soveltamisella on kauaskantoisia ja merkittäviä vaikutuksia mm. lääketieteessä, teollisessa mallintamisessa, ekonometriassa ja yhteiskuntatieteissä.

Tässä raportissa käsitellään bayesiläistä mallintamista keskittyen erityisesti ns. Bayes-verkkomalleihin, jotka ovat mm. edellä esitettyjen turbo-koodauksen ja Office Assistant-teknologian perustana. Tarkastelemme ensin luvussa 1 bayesiläistä lähestymistapaa yleisesti oppivien ja älykkäiden järjestelmien rakentamisen kannalta, ja sitä kuinka lähestymistapaa voidaan soveltaa mallien konstruoimisessa ja epätäydellisen tiedon varassa toimivassa päättelyssä. Luvussa 2 arvioidaan bayesiläisen mallinnuksen suhdetta muihin oppivien ja älykkäiden järjestelmien yhteydessä esiintyviin menetelmiin kuten esimerkkeihin perustuvaan päättelyyn (Case-Based Reasoning, CBR), ja tarkastellaan lyhyesti bayesiläiseen mallintamiseen liittyvää informaatioteoreettista tulkintaa. Luku 3 tarjoaa katsauksen erilaisiin Bayes-verkkomalleihin ja niihin liittyviin käsitteisiin. Luvussa 4 esitellään Bayes-verkkojen sovelluksia ja Bayes-verkkojen sovellusten kehittämiseen suunniteltuja kaupallisia ohjelmistoja. Lopuksi luvun 5 tavoitteena on esitellä alueen keskeisiä tietolähteitä sekä bayesiläiseen mallintamiseen yleensä että erityisesti Bayes-verkkoihin liittyen.

Luku 1

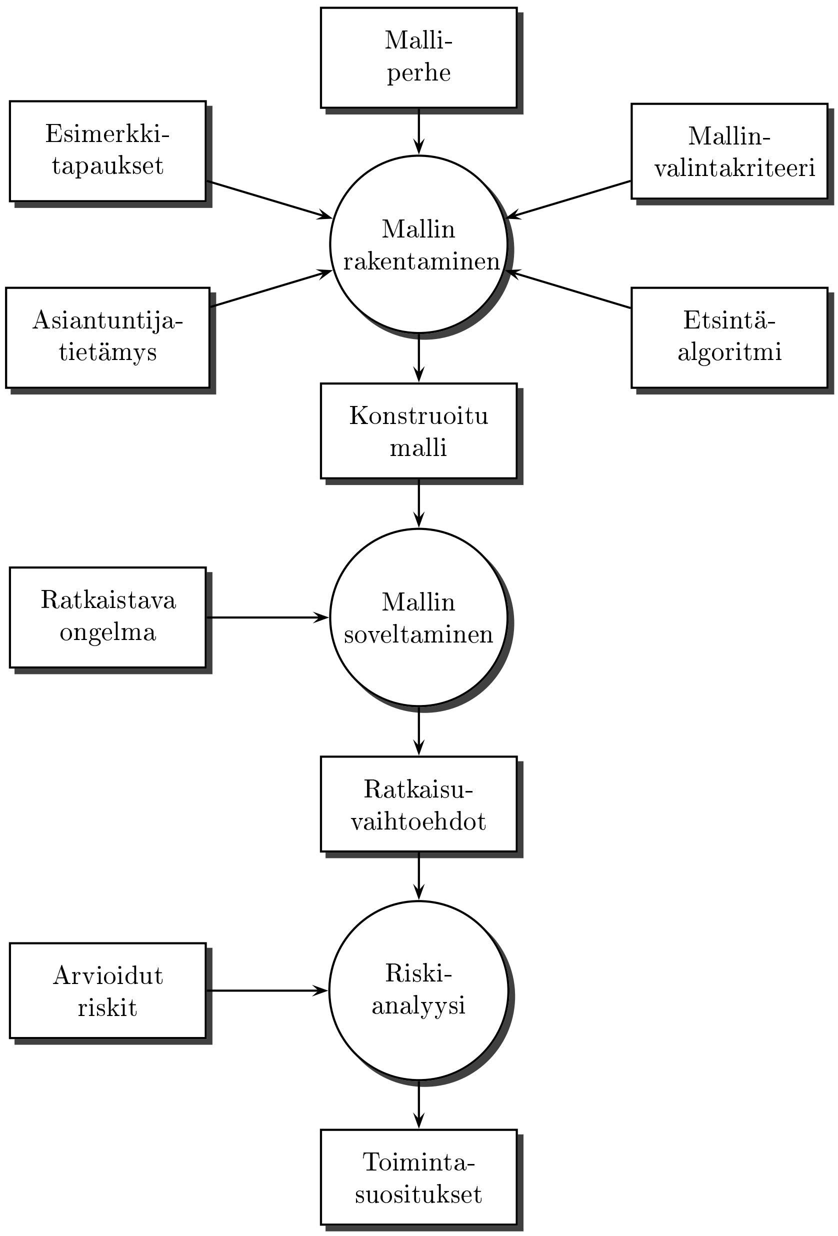
Bayesiläinen mallinnus

Täydellisen tietokoneperustaisen mallin rakentamisen mahdottomuus. Oppivien ja älykkäiden järjestelmien yleinen rakenne — mallien oppiminen ja niiden soveltaminen. Mallien oppiminen bayesiläisittäin: mallien rakenteen ja parametrien oppimisen erottaminen. Ylioppiminen ja Occamin partaveitsi. Oppimisen ja taustatietämyksen yhdistäminen. Bayesiläisten mallien soveltaminen.

1.1 Bayesiläinen mallintaminen oppivissa ja älykkäissä järjestelmissä

Oppivissa ja älykkäissä järjestelmissä pyritään rakentamaan käsiteltävästä sovellusalueesta yksinkertaistettu matemaattinen malli siten, että mallin toteuttavaa tietokoneohjelmaa voidaan käyttää avuksi erilaisissa ongelmanratkaisutilanteissa. Kuvassa 1.1 on tällaisen järjestelmän rakenne jaettu kolmeen komponenttiin: mallien rakentaminen, mallien soveltaminen, ja riskianalyysi. "Mallien soveltaminen" on tässä yhteydessä intuitiivisesti määritelty käsite, joka kattaa mm. seuraavat ongelmakentät:

Tilastollinen päättely ja ennustaminen:
Rakennettu malli on ongelmakentän matemaattinen kuvaus, ja mallinsovellusmoduulille annettua syötettä voidaan tässä tapauksessa ajatella mallinnetussa maailmassa esiintyvän tilanteen osittaisena kuvauksena. Tilastollisessa päättelyssä ja ennustamisessa on päämääränä selvittää mitä annetuista tiedoista seuraa annetun mallin puitteissa, tai mitkä ovat annettuun tilanteeseen johtaneet syyt. Tähän ryhmään kuuluvat muun muassa luokittelu-, diagnosointi-, ja aikasarjaongelmat.



Kuva 1.1: Oppivien ja älykkäiden järjestelmien yleisrakenne.

Ongelmakentästä kerätyn tiedon analysointi (data mining):
Ongelmakentästä kerätystä tiedosta muodostetaan malli, jonka avulla tutkitaan ongelmakentässä esiintyviä yleisiä säännönmukaisuuksia. Mallille annettu syöte (ratkaistava ongelma) määrittelee tässä tapauksessa esimerkiksi millaisista säännönmukaisuuksista käyttäjä on kiinnostunut.

Teollisten prosessien säätö ja ohjaus:
Rakennettu malli kuvaa jotakin todellisen maailman teollista prosessia. Mallille annettu syöte on tässä tapauksessa joukko malliin vaikuttavia parametreja, ja mallin soveltamisessa on tehtävänä päätellä kuinka määrätä loput parametrit optimaalisella tavalla annetun mallin puitteissa.

Tiedon tiivistäminen ja signaalinkäsittely:
Mallinnettu todellisen maailman prosessi käsittelee tässä tapauksessa signaalien tiivistämistä (compression), suodattamista (filtering), tai korjaamista (correction). Mallin sovellusvaiheessa on tehtävänä optimoida tätä prosessia ohjaavat parametrit.

Mikäli mallien sovellusmoduulin antamien tulosten perusteella tehdään toiminnallisia päätöksiä, on riskianalyysivaiheen tehtävänä arvioida eri vaihtoehdoista seuraavat hyödyt ja haitat.

Bayesiläinen mallintaminen on yksi kiinnostava lähestymistapa oppivien ja älykkäiden järjestelmien rakentamiseksi. Lähestymistapa tarjoaa yhtenäisen, todennäköisyyslaskentaan perustuvan formaalin kehikon, jonka avulla rakennettavan järjestelmän eri vaiheissa esiintyvät osaongelmat voidaan muotoilla ristiriidattomalla, teoreettisesti tyydyttävällä tavalla. Termiä “bayesiläinen” käytetään seuraavassa korostamaan kahta mallintamiselle keskeistä seikkaa. Ensinnäkin verrattuna moniin muihin lähestymistapoihin, bayesiläisen mallintamisen lähtökohtana on konstruoida probabilistinen malli ongelmakentän *yhteistodennäköisyysjakaumalle*, siis malli ongelmakentässä esiintyville tilanteille kokonaisuutena, eikä pelkästään tietylle ongelmakentän osalle (esimerkiksi yhden muuttujan todennäköisyysjakaumalle). Yhteistodennäköisyysjakaumaa voidaan luonnollisesti edelleen soveltaa vain tietyn ongelmakentän osa-alueen jakauman estimointiin. Toiseksi termi viittaa myös siihen, että lähestymistavassa käytetään todennäköisyyksien semanttisessa tulkinnassa modernia, *subjektivistista* näkökantaa, jonka mukaan todennäköisyys on subjektiivinen epävarmuuden mitta, eikä perinteisen, ns. *objektivistisen* lähestymistavan mukainen “toistokoefrekvenssi” (tätä seikkaa käsitellään tarkemmin luvussa 2.2). Todennäköisyyslaskennan käyttämisessä ei tietenkään sinänsä ole mitään subjektiivista, vaan teoria johtaa yhteen tiettyyn ristiriidattomaan l. konsistenttiin tapaan käsitellä epävarmaa tietoa. Subjektivistinen lähestymistapa hyväksyy kuitenkin sen tosiseikan, että mikäli päättelyn lähtökohtana käytetään ihmisten arvioimia todennäköisyyksiä, saattavat eri ihmisten antamat arviot tapahtumien todennäköisyyksistä vaihdella hyvinkin paljon, mikä puolestaan vaikuttaa laskennan lopputulokseen. Yksi käytettävän teoreettisen formalismin suurimmista ansioista on se, että kunkin osaongelman ratkaisemisessa käytettävät perusoletukset on luetteloitava eksplisiittisesti, jolloin eri ratkaisujen järkevyyttä voidaan arvioida paitsi empiirisesti, myös analyyttisesti. Seuraavassa käsitellään kutakin järjestelmän kolmesta komponentista erikseen.

1.2 Mallien rakentaminen

Mallien rakentamista voidaan ajatella yleisesti etsintäprosessina, jossa tavoitteena on löytää ongelmakenttää hyvin kuvaavia numeerisia malleja. Etsintäavaruuden muodostava mallien joukko, *malliperhe*, määritellään yleensä käyttäen ns. parametrisia malliperheitä[1]: yksittäistä mallia voidaan tässä lähestymistavassa ajatella parina (M, θ), missä M määrittelee mallin *struktuurin*, esimerkiksi neuroverkon rakenteen tai sumeiden sääntöjen määrän ja muodon, kun taas θ kiinnittää struktuuriin liittyvät parametrit, esimerkiksi neuroverkon kaarten painot tai sumeiden sääntöjen jäsenyysasteet. *Probabilistisella mallilla* tarkoitetaan seuraavassa mallia joka tuottaa todennäköisyysjakauman mallimaailmassa esiintyville tilanteille.

Käytännössä mallien rakentamisessa joudutaan aina rajoittumaan äärelliseen määrään mallistruktuureja, esimerkiksi joukkoon kolmikerroksisia suunnattuja backpropagation-neuroverkkoarkkitehtuureja, joissa piilosolmujen lukumäärä vaihtelee välillä 1–K. Tässä tapauksessa käytettävissä olevia mallistruktuureja on K kappaletta: $M_1, \ldots, M_K$. Malliperheen voidaan nyt ajatella muodostuvan siitä joukosta malleja (M_k, θ), jotka saadaan aikaan käyttämällä mallistruktuurijoukkoa $\{M_1, \ldots, M_K\}$. Tässä yksittäisen neuroverkon kaarien painoja on merkitty (vektorilla) θ. Mallistruktuuria M_k vastaavaksi *malliluokaksi* kutsutaan sitä malliperheen osajoukkoa, joka sisältää kaikkia muotoa (M_k, θ) olevat mallit. Tyypillisiä esimerkkejä oppivissa ja älykkäissä järjestelmissä käytetyistä mallistruktuureista ovat erilaiset neuroverkkorakenteet, päätöspuut, sumeat sääntöjoukot, ja Bayes-verkot, joita käsitellään tarkemmin luvussa 3.

Bayesiläisessä lähestymistavassa mallien rakentamisprosessissa erotetaan eksplisiittisesti *mallinvalintakriteeri*, jonka perusteella päätetään mitkä mallit ovat sopivia käytettäviksi eri ongelmakentissä, ja *etsintäalgoritmi*, jonka avulla etsintäavaruudesta yritetään löytää mallinvalintakriteerin mielessä hyviä malleja. Mikäli käytetty menetelmä mallien konstruoimiseksi ei tuota toivotun kaltaisia tuloksia, voidaan menetelmän evaluoinnissa tämän erottelun ansiosta keskittyä tarkastelemaan erikseen joko käytettyä valintakriteeriä tai etsintäalgoritmia. Esimerkiksi useissa päätöspuualgoritmeissa ei tämänlaa-

[1]Ei-parametrisia malleja ja esimerkkeihin perustuvaa päättelyä (case-based reasoning) käsitellään luvussa 2.3.

Mallistruktuuri: Rakenne, joka määrää mallien määrittelemiseen tarvittavat osat (**p**arametrit). Esimerkiksi neljä syötesolmua, kaksi piilosolmua, ja neljä tulossolmua sisältävä täydellisesti kytketty neuroverkkoarkkitehtuuri muodostaa yhden mallistruktuurin. Yksittäisen mallin määrittelevät parametrit ovat tässä tapauksessa verkon kaarien painot.

Malli: Mallistruktuuri + siihen liittyvien parametrien ilmentymät l. parametrien kiinnitetyt arvot (esimerkiksi $4{\times}2{\times}4$–neuroverkkostruktuuri ja siihen liittyvien kaarten painot).

Malliperhe: Joukko mallistruktuureja (esimerkiksi kaikki muotoa $4 \times X \times 4$ olevat neuroverkot, joissa on neljä syötesolmua ja neljä tulossolmua, ja yksi piilokerros). Malliperhettä voidaan ajatella myös kaikkien kiinnitetyllä mallistruktuurijoukolla aikaansaatavien mallien muodostamana joukkona.

Opetusjoukko: Ongelmakentästä saatu otos esimerkkitapauksia.

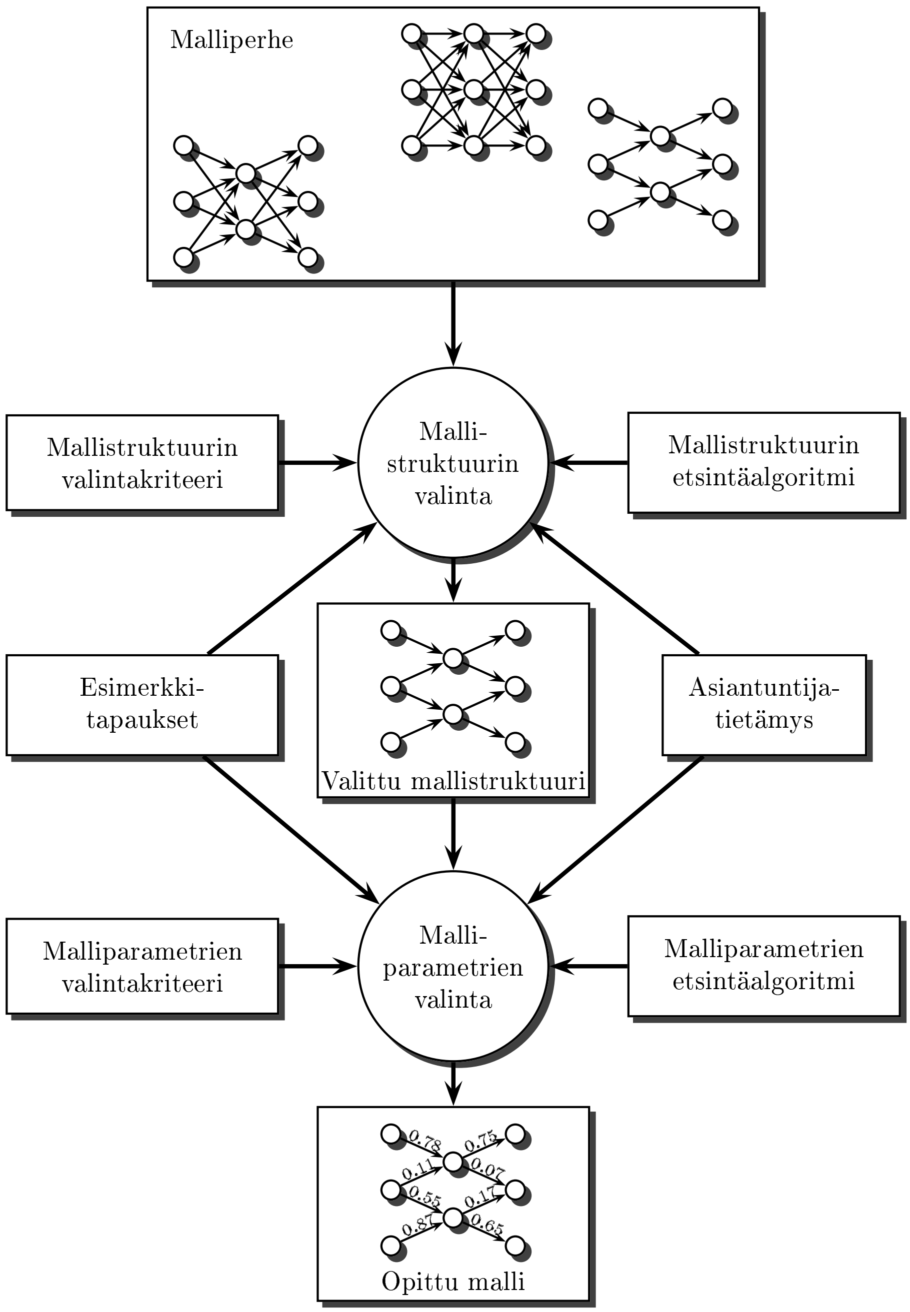
Oppiminen: Mallin (siis mallistruktuurin ja malliparametrien arvojen) valinta kiinnitetystä malliperheestä annettua opetusjoukkoa hyväksikäyttäen.

tuista erottelua ole mahdollista tehdä, vaan etsintä ja valintakriteeri muodostavat yhtenäisen kokonaisuuden, jolloin algoritmien heikkouksien analysointi on vaikeaa.

Kuvassa 1.1 esitetyssä järjestelmässä mallien konstruoiminen tapahtuu käyttäen ongelmankentästä olevaa (asiantuntija)tietämystä, ja/tai saatavilla olevaa ns. *opetusjoukon* (training set) muodostavaa esimerkkiaineistoa. Oletetaan seuraavassa aluksi yksinkertaisuuden vuoksi että käytettävä malli halutaan konstruoida pelkästään opetusjoukon perusteella, jolloin mallien rakennusprosessia kutsutaan mallien *oppimiseksi*, ja käytetään kyseisestä otosjoukosta merkintää $\mathcal{D}$. Asiantuntijatietämyksen yhdistämistä oppimisprosessiin käsitellään luvussa 1.2.4.

Bayesiläisessä mallintamisessa mallien oppiminen voidaan jakaa kahteen erilliseen vaiheeseen: ensimmäisessä vaiheessa määrätään mallistruktuuri M, ja toisessa vaiheessa määrätään kiinnitetyn mallistruktuurin M parametrit θ. Kuvassa 1.2 esitetään tarkennettu kaavio mallien oppimisprosessissta.

Keskeinen ongelma mallien konstruoimisessa on mallien ylisovittamisen välttäminen, jota käsitellään tarkemmin seuraavassa luvussa. Luvuissa 1.2.2



Kuva 1.2: Tarkennettu kuva mallien rakennusvaiheesta.

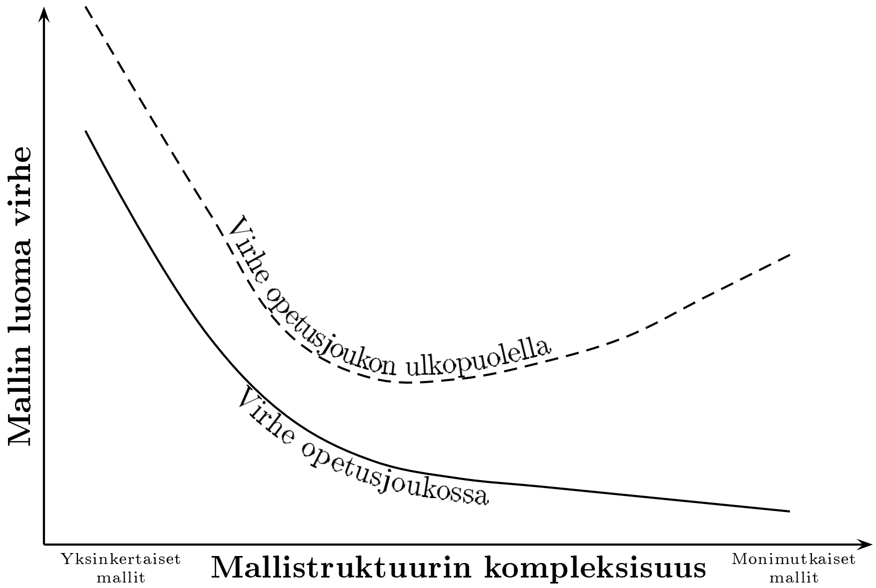
ja 1.2.3 kuvataan bayesiläinen kriteeri mallistruktuurin ja malliparametrien valitsemiseksi. *Tässä yhteydessä on huomattava että bayesiläinen mallintaminen ei ota kantaa oppimisessa käytettävään etsintäalgoritmiin*, joka voi olla mikä tahansa. Yhden vaihtoehdon tällaiseksi algoritmiksi muodostavat *geneettiset algoritmit*, joita käsitellään tarkemmin erillisessä TEKESin teknologiaraportissa.

1.2.1 Mallien ylisovittaminen ja Occamin partaveitsi

Kuten Rissanen "Älykkäiden ja oppivien järjestelmien sovellukset"–teknologiaohjelman evaluointiraportissaan [113] toteaa, valitettavan suuri osa oppiviin ja älykkäisiin järjestelmiin liittyvästä tutkimuksesta on keskittynyt nimenomaan mallien parametrien estimointiongelmaan, vaikka mallin struktuurin valitseminen on käytännön kannalta paljon merkittävämpi ongelma: rakenteellisesti liian monimutkaisissa malleissa on parametrien lukumäärä niin suuri että mallit voidaan *ylisovittaa* (overfit) annettuun opetusjoukkoon. Ylisovittamisen tuloksena syntyvät *ylioppineet* (overtrained) mallit adaptoituvat liian tarkasti opetusjoukkoon, jolloin mallien *yleistyskyky* (generalization capability) eli ennustustarkkuus opetusjoukon ulkopuolisissa tilanteissa on huono. Sanomattakin on selvää, että tällainen järjestelmä, joka toimii hyvin vain tietyissä, ennalta kiinnitetyissä tapauksissa on käytännön sovellusten kannalta hyödytön.

Ylioppiminen: Mallin sovittaminen opetusjoukkoon niin tarkasti, että mallin käyttökelpoisuus on hyvä vain opetusjoukkoon kuuluvissa tapauksissa, ei opetusjoukon ulkopuolella.

Yksi syy ylioppimisilmiöön on se että opetusjoukko on vain suppea ja mahdollisesti virheitä sisältävä otos ongelmakentästä, eikä siten edusta ongelmakentän yhteistodennäköisyysjakaumaa täydellisen tarkasti. Siten opetusjoukkoa vastaavan yhteistodennäköisyysjakauman pikkutarkka estimointi johtaa malliin, joka edustaa huonosti ongelmakentän todellista todennäköisyysjakaumaa. Kuvassa 1.3 on esitetty tyypillinen esimerkki ylioppimisesta: opetusaineistosta malliparametrien sovittamisen tuloksena opitun mallin ennustustarkkuus opetusjoukossa (ennustustarkkuus testattuna käyttäen vain opetusjoukossa annettuja esimerkkitapauksia) on sitä parempi mitä monimutkaisempi käytetty mallistruktuuri on (mitä enemmän mallissa on sovitettavia parametreja), kun taas opitun mallin yleistyskyky eli ennustustarkkuus opetusjoukon ulkopuolisissa tapauksissa alkaa huonontua jossain vaiheessa mallin monimutkaisuuden lisääntyessä. Koska mallien oppimisessa on tavoitteena nimenomaan hyvän yleistyskyvyn saavuttaminen, on ylioppimisen välttäminen koneoppimisen keskeisimpiä ongelmia.



Kuva 1.3: Esimerkki ylioppimisesta.

Ylioppimista voidaan yrittää välttää noudattamalla *Occamin partaveitseksi* kutsuttua periaatetta, jonka mukaan paras mahdollinen malli on sellainen joka sopii ongelmakentästä saatuihin havaintoihin mahdollisimman tarkasti, mutta jonka struktuuri on toisaalta mahdollisimman yksinkertainen. Mallistruktuurin valinnassa on siis löydettävä sopiva tasapaino mallin rakenteen kompleksisuuden ja sen esitysvoimakkuuden välillä: monimutkaiset mallit saadaan sovitettua havaintoihin hyvin tarkasti, mutta niiden struktuurit ovat kompleksisisia, yksinkertaisia malleja ei puolestaan voida useinkaan sovittaa tehtyihin havaintoihin kovin tarkasti. Tilastollisessa oppimisessa tätä tasapainotusongelmaa kutsutaan nimellä *vinouma-varianssi-ongelma (bias-variance dilemma)* (katso esim. [15, 36]).

Vinouma-varianssi-ongelman ratkaisemiseksi on esitetty useita menetelmiä, joista useimmat perustuvat empiirisin argumentein perusteltuihin heuristisiin algoritmeihin (katso esim. [44, 45]). Ongelman ratkaisemiksi on myös esitetty monimutkaisia teoreettisia kehikoita mm. ristiintestauksen (cross-validation) [4] ja VC-ulottuvuuden [137] käsitteisiin perustuen. Esimerkiksi monet neuroverkoissa käytetyt regularisointitekniikat (regularization) [132, 107] pyrkivät ratkaisemaan ylioppisongelman lisäämällä mallinvalintakriteеriin "rankaisutermin", joka kasvaa neuroverkon rakenteen monimutkaistuessa. Seuraavassa luvussa näemme kuinka bayesiläinen lähestymistapa sisältää "sisäänrakennetun" *automaattisen Occamin partaveitsi-periaatteen*, minkä ansiosta ylioppimisongelmaa ei tarvitse käsitellä bayesiläisessä lähestymistavassa erikseen, vaan se ratkeaa luonnollisena osana mallien konstruointiprosessia!

1.2.2 Mallistruktuurin valinta

Edellä esitetyssä kaksivaiheisessa oppimisprosessissa tarvitsemme oppimiskriteerin sekä mallistruktuurien että mallien parametrien arvojen evaluoimiseksi. Bayesiläisessä oppimisessa käytettävä kriteeri perustuu todennäköisyyteen: mallistruktuuri M_1 on "parempi" kuin mallistruktuuri M_2 jos se on näistä vaihtoehdoista *todennäköisempi*. Tämä periaate pätee sekä mallistruktuureille että mallien parametreille: mallistruktuurit ja malliparametrit evaluoidaan niiden *posterioritodennäköisyyden* mukaan. Mallistruktuurin tapauksessa sana 'posteriori' viittaa siihen että struktuurin M todennäköisyys $P(M \mid \mathcal{D})$ lasketaan sen jälkeen kun opetusaineisto on nähty, siis *ehdollisena todennäköisyytenä* annettuna opetusjoukko $\mathcal{D}$. Malliparametrien tapauksessa taas käytetään vastaavasti ehdollista jakaumaa $P(\theta \mid \mathcal{D}, M)$.

Todennäköisyyslaskennan perusaksioomia käyttäen on helppo osoittaa että

$$P(M \mid \mathcal{D}) = \frac{P(\mathcal{D} \mid M)P(M)}{P(\mathcal{D})}. \tag{1.1}$$

Tämä kaava tunnetaan *Bayesin teoreemana* jonka esittäjän, Thomas Bayesin (1701–1761), mukaan koko tutkimusalue on saanut nimensä.

Koska todennäköisyyttä $P(\mathcal{D})$ voidaan pitää tässä yhteydessä vakiona, voidaan mallistruktuurien bayesiläisenä oppimiskriteerinä käyttää siis tuloa, jonka tekijöinä ovat oppimisjoukon *kokonaisuskottavuus* eli *evidenssi (marginal likelihood, evidence)* $P(\mathcal{D} \mid M)$, ja mallistruktuurin *prioritodennäköisyys* $P(M)$. Tässä yhteydessä on huomattava että kokonaisuskottavuus eroaa tilastotieteestä tutusta uskottavuustermistä $P_{\mathcal{D}}$,

$$P_{\mathcal{D}} = P(\mathcal{D} \mid M, \theta),$$

joka antaa opetusjoukon todennäköisyyden annettuna *täydellinen malli*, siis mallistruktuurin lisäksi myös sitä vastaavien parametrien arvot. Kokonais- eli *marginaaliuskottavuus* saadaan "tavallisesta" uskottavuudesta nimensä mukaisesti *marginalisoimalla* eli *integroimalla* uskottavuustermi yli kaikkien mallistruktuuria M vastaavien mallien, painotettuna parametriasetusten θ prioritodennäköisyydellä:

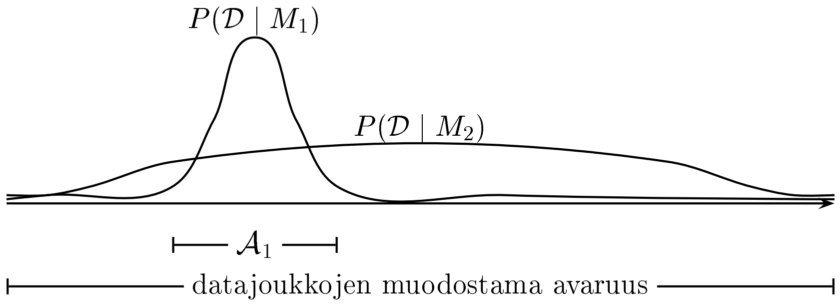
$$P(\mathcal{D} \mid M) = \int P(\mathcal{D} \mid M, \theta) P(\theta \mid M) d\theta. \tag{1.2}$$

Näemme että kokonaisuskottavuutta voidaan pitää normaalin uskottavuustermin odotusarvona niille mallien joukossa joiden struktuuri on M.

Mikäli yllä esiintyvä integraali voidaan laskea, antavat kaavat (1.1) ja (1.2) bayesiläisen kriteerin eri mallistruktuurien vertailemiseksi. Luvussa 3.3 näemme kuinka tämä kriteeri voidaan laskea hyvin tehokkaasti Bayes-verkkojen muodostaman probabilistisen malliperheen tapauksessa. Bayesiläistä lähestymistapaa voidaan soveltaa myös tiettyjen neuroverkkomallien tapauksessa [88, 96, 12, 14, 113], joskaan ei niin suoraviivaisesti kuin probabilististen malliperheiden kanssa.

Yksi tapa soveltaa edellisessä luvussa kuvattua Occamin partaveitsi-periaatetta bayesiläisessä lähestymistavassa saadaan määrittelemällä priorijakauma $P(M)$ siten, että mallistruktuurien prioritodennäköisyys pienenee struktuurin kompleksisuuden kasvaessa. Mikäli mitään muuta syytä — esimerkiksi ongelmakentän asiantuntijan esittämää arvioita mallinnettavan maailman luonteesta — tällaisen priorijakauman käyttämiseen ei kuitenkaan ole, voidaan ei-tasaisen priorijakauman käytöstä luopua, koska *kokonaisuskottavuuskriteeri sisältää jo itsessään automaattisen Occamin partaveitsi-periaatteen!* Tätä aluksi hieman yllättävältä tuntuvaa seikkaa on käsitelty laajemmin mm. teoksissa [110, 88, 96] — asian ymmärtämiseksi intuitiivisella tasolla tarkastelkaamme seuraavaa esimerkkiä.

Olkoon M_1 ja M_2 kaksi mallistruktuuria siten, että M_1 on hyvin yksinkertainen, ja M_2 hyvin monimutkainen mallistruktuuri. Koska siis mallistruktuurin M_2 tapauksessa löytyy aina suuri määrä parametriasetuksia θ, joiden avulla mallistruktuuri voidaan sovittaa tehtyihin havaintoihin $\mathcal{D}$, voimme olettaa että kokonaisuskottavuus $P(\mathcal{D} \mid M_2)$ on kohtalaisen suuri hyvin monelle datajoukolle $\mathcal{D}$. Vastaavasti mallistruktuurin M_1 tapauksessa kokonaisuskottavuus on suuri hyvin rajoitetulle määrälle datajoukkoja; olkoon tämä alue $\mathcal{A}_1$. Koska kokonaisuskottavuus määrää jakauman kaikille mahdollisille datajoukoille $\mathcal{D}$, on selvää että $P(\mathcal{D} \mid M_2)$ ei voi olla suurempi kuin $P(\mathcal{D} \mid M_1)$ kaikilla $\mathcal{D}$. Kuva 1.4 havainnollistaa tätä seikkaa tarkemmin: monimutkaisen mallistruktuurin M_2 tapauksessa on kokonaisuskottavuus levittynyt tasaisesti laajalle, monien datajoukkojen $\mathcal{D}$ muodostamalle alueelle, kun taas mallistruktuurin M_1 tapauksessa kokonaisuskottavuuden merkitsevät arvot saadaan alueella $\mathcal{A}_1$, ja sen ulkopuolella kokonaisuskottavuus on lähellä nollaa. Yksinkertaisempaa mallistruktuuria M_1 vastaava kokonaisuskottavuus on siis suurempi, mikäli käytettävä datajoukko on alueelta $\mathcal{A}_1$!



Kuva 1.4: Intuitiivinen perustelu sille miksi kokonaisuskottavuus noudattaa automaattisesti Occamin partaveitsi-periaatetta: molempien käyrien rajaaman alueen pinta-alan on oltava yhtä suuri (yksi), jolloin yksinkertainen mallistruktuuri M_1 saa jollakin alueella (tässä $\mathcal{A}_1$) suuremman kokonaistodennäköisyyden arvon kuin monimutkaisempi mallistruktuuri M_2.

Occamin partaveitsi-periaatteen toteutumisen näemme myös soveltamalla kokonaisuskottavuuden laskemisessa ns. BIC-approksimaatiota [120, 109, 65], jonka mukaan

$$P(\mathcal{D} \mid M) \approx \frac{P(\mathcal{D} \mid \tilde{\theta}(\mathcal{D}))}{N^{\frac{d(M)}{2}}},$$

missä merkintä $\tilde{\theta}(\mathcal{D})$ tarkoittaa uskottavuuden $P(\mathcal{D}|\theta(\mathcal{D}))$ maksimoivia *suurimman uskottavuuden parametreja (maximum likelihood parameters)*, $\mathrm{d}(M)$ mallistruktuuria M vastaavien malliparametrien lukumäärää, ja N datajoukon $\mathcal{D}$ kokoa. Näemme siis että kokonaisuskottavuus tasapainoilee Occamin partaveitsi-periaatteen mukaisesti mallin esityskyvyn ja kompleksisuuden välillä: mallin struktuurin kompleksisuuden kasvaessa osoittajassa esiintyvä uskottavuustermi kasvaa, mutta samanaikaisesti kasvaa myös nimittäjässä esiintyvä mallin kompleksisuudesta rankaiseva termi.

Jos esitämme BIC-approksimaation hieman toisessa muodossa (ottamalla logaritmit kyseisistä termeistä), saamme

$$-\log P(\mathcal{D} \mid M) \approx -\log P(\mathcal{D} \mid \tilde{\theta}(\mathcal{D})) + \frac{d(M)}{2} \log N,$$

mistä näemme että approksimaatio on sama kuin Rissasen teoksessa [109] esittämä *Minimum Description Length (MDL)*-periaatteeseen perustuva kaksiosainen kriteeri mallistruktuurin valitsemiseksi. Bayesiläisen ja informaatioteoreettisten lähestymistapojen yhteyksiä käsitellään myöhemmin tarkemmin luvussa 2.4.

1.2.3 Malliparametrien valinta

Kun kriteerin (1.1) mielessä optimaalinen mallistruktuuri M on löydetty, on seuraava tehtävä oppimisprosessissa määrätä mallistruktuuriin liittyvät parametrit θ. Monissa ei-probabilistisissa malliperheissä, kuten esimerkiksi neuroverkkomalleissa, käytetty mallinvalintakriteeri on tässä tapauksessa yleensä estimointivirhe opetusjoukossa. Kuten edellä nähtiin, tämä johtaa helposti ylioppimiseen mikäli mallistruktuuria ei ole valittu oikein. Käytetyt etsintäalgoritmit (esimerkiksi backpropagation) ovat näissä tapauksissa yleensä yksinkertaisia iteratiivisia gradienttimenetelmän variaatioita joiden konvergenssi saattaa olla hyvin hidasta. Lisäksi gradienttimenetelmät ovat lokaaleja menetelmiä jotka parhaassakin tapauksessa konvergoivat vain lokaaliin optimiin, eivätkä välttämättä löydä niitä parametriarvoja jotka maksimoivat käytetyn parametrien evaluointikriteerin.

Bayesiläisessä mallintamisessa sitä vastoin parametrien arvojen valinnassa käytettävä oppimiskriteeri on sama kuin mallistruktuurien valinnassa: parametriarvot θ evaluoidaan niiden posterioritodennäköisyyden $P(\theta \mid M, \mathcal{D})$ mukaan. Todennäköisyyslaskennan perusaksioomista saamme että

$$P(\theta \mid M, \mathcal{D}) = \frac{P(\mathcal{D} \mid \theta, M) P(\theta \mid M)}{P(\mathcal{D} \mid M)}, \tag{1.3}$$

Yksittäisen mallin θ posterioritodennäköisyys saadaan siis kertomalla opetusjoukon uskottavuus $P(\mathcal{D} \mid \theta, M)$ mallin prioritodennäköisyydellä $P(\theta \mid M)$, ja normalisoimalla syntyvä tulo kokonaisuskottavuudella (1.2), jonka arvo on jo määrätty mallistruktuurin valinnassa. Tietyissä probabilistissa malliperheissä posteriorijakauman maksimikohta voidaan laskea suljetussa muodossa yksinkertaisella matemaattisella kaavalla, jolloin *mallin parametrien säätämiseen ei tarvita lainkaan iteratiivista aikaavievää prosessia*! Esimerkin tällaisesta malliperheestä muodostavat tässä raportissa käsiteltävät Bayes-verkot, joita tarkastellaan tarkemmin luvussa 3. Luvussa 3.3.2 esitetään yksinkertainen laskukaava, jonka avulla annetun Bayes-verkon parametrit voidaan määrätä suoraan ilman iteratiivista oppimisprosessia.

1.2.4 Oppimisen ja asiantuntijatietämyksen yhdistäminen

Edellä oletettiin mallistruktuurin valinnassa käytettävän pelkästään tilastollista havaintoaineistoa $\mathcal{D}$. Usein saatavilla on kuitenkin esimerkkitapauksien lisäksi myös runsaasti "ihmistietämystä": ongelmakentän asiantuntijoiden kokemusperäistä tietoa, tai "maalaisjärkeen" (common sense) perustuvaa tietoa ongelmakentän luonteesta. Monien malliperheiden, kuten esimerkiksi neuroverkkojen, tapauksessa merkittäväksi ongelmaksi on muodostunut se, kuinka nämä kaksi tietolähdettä saadaan yhdistettyä. Bayesiläisessä mallintamisessa yhdistäminen on suoraviivaista: kaavoissa (1.1) ja (1.2) esiintyy kaksi prioritodennäköisyysjakaumaa, $P(M)$ ja $P(\theta \mid M)$. Sana 'priori' viittaa tässä yhteydessä siihen että nämä jakaumat on määrättävä "ennen" opetusjoukon $\mathcal{D}$ tarkastelua siinä mielessä että ne eivät saa riippua opetusjoukon muodostavasta tilastollisesta aineistosta. Bayesiläinen formalismi antaa nyt mahdollisuuden koodata ongelmakentästä saatavilla olevaa yleistä tietämystä prioritodennäköisyyksien avulla.

Luvussa 3.3 näemme että Bayes-verkkojen tapauksessa mallistruktuurien prioritodennäköisyyksien arvioiminen on erityisen luontevaa, koska kukin Bayes-verkkostruktuuri edustaa joukkoa muuttujien välisiä riippuvuuksia, ja tällaisten riippuvuuksien arviointi on ongelmakentän asiantuntijoille monessa tapauksessa sangen helppoa. Lisäksi priorijakauma $P(\theta \mid M)$ voidaan formalisoida Bayes-verkkojen tapauksessa tavalla, joka antaa asiantuntijoille mahdollisuuden paitsi koodata prioritietämyksensä, myös arvioida prioritiedon merkityksellisyyttä suhteessa saatavilla olevaan tilastolliseen aineistoon. Toisaalta on myös korostettava, että koska Bayes-verkkojen tapauksessa on sekä mallistruktuurilla että siihen liittyvillä parametreilla selvä semanttinen merkitys, voidaan Bayes-verkkoja konstruoida aivan hyvin myös ilman tilastollista aineistoa, käyttäen puhtaasti asiantuntijoilta saatua tietämystä.

1.3 Mallien soveltaminen

Kuten edellä näimme, bayesiläisessä oppimisessa muodostetaan ongelmakentästä malli (M, θ) käyttäen apuna opetusesimerkkejä $\mathcal{D}$, ja/tai ongelmakentän asiantuntijoiden prioritietämystä. Oletetaan jatkossa että ongelmakentän kuvauksessa käytetään n attribuuttia (satunnaismuuttujaa) $X_1, \ldots, X_n$. Merkinnällä $X_i = x_i$ tarkoitetaan sitä että attribuutin X_i arvo on x_i, missä x_i voi olla joko reaalilukuku, jolloin kyseessä on *jatkuva-arvoinen* muuttuja, tai sitten x_i kuuluu johonkin äärelliseen joukkoon mahdollisia arvoja, missä tapauksessa attribuuttia X_i kutsutaan *diskreetiksi*. Jatkossa keskitymme yksinkertaisuuden vuoksi hyvin paljon diskreetteihin muuttujiin — jatkuvien muuttujien käsittelystä puhutaan enemmän luvussa 3.4.

Seuraavassa oletamme että käytetty malliperhe on probabilistinen, missä tapauksessa käytettävä malli (M, θ) määrittelee yhteistodennäköisyysjakauman $P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid M, \theta)$ muuttujien $X_1, \ldots, X_n$ eri arvokombinaatioille. Tätä yhteistodennäköisyysjakaumaa käyttäen on mahdollista rat-

Muuttujajoukko $\mathbf{S}_1$:
Ne muuttujat joiden arvo ei ole tiedossa, mutta joiden arvojen tuntemisen katsotaan olevan edellytyksenä käsillä olevan ongelmanratkaisutilanteen ratkaisemiksi.

Muuttujajoukko $\mathbf{S}_2$:
Muuttujat joiden arvo on tunnettu.

Muuttujajoukko $\mathbf{S}_3$:
Muuttujat joiden arvo ei ole tiedossa, eikä arvojen tuntemisen katsota olevan välttämätön käsillä olevan ongelmanratkaisutilanteen kannalta.

Probabilistinen päättely:
Todennäköisyysjakauman $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ estimointi.

kaista erilaisia mallien soveltamisessa esiintyviä estimointitehtäviä. Tätä havainnollistaaksemme olettakaamme että attribuutit on jaettu kolmeen erilliseen osajoukkoon siten että ensimmäisen osajoukon $\mathbf{S}_1$ muodostavat ne attribuutit joiden arvoa halutaan estimoida, toisen osajoukon $\mathbf{S}_2$ ne attribuutit joiden arvo on annettu, ja kolmannen osajoukon $\mathbf{S}_3$ muut attribuutit. *Probabilistisessa päättelyssä* tavoitteena on laskea ehdollinen todennäköisyysjakauma kiinnostuksen kohteena oleville attribuuteille, annettuna tunnettujen attribuuttien arvot. Tuloksena on siis jakauma $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$, missä merkintä $\mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2$ tarkoittaa että kukin attribuutti joukossa $\mathbf{S}_2$ on asetettu tunnettuun arvoonsa.

Tässä yhteydessä on korostettava että attribuuttien jako yllämainittuihin kolmeen osajoukkoon ei ole millään tavalla kiinteä, vaan voi vaihdella tilanteen mukaan. Niinpä probabilistisessa päättelyssä ei tarvitse etukäteen päättää mitä halutaan estimoida tai mitä tietoa estimointitehtävässä on saatavilla. Tämä poikkeaa monista vaihtoehtoisista lähestymistavoista, kuten esimerkiksi päätöspuista ja monissa neuroverkkomalleista, joissa estimointitehtävä (esimerkiksi luokittelutehtävä) on päätettävä etukäteen jo ennen mallin rakentamista. Probabilistisessa päättelyssä sitä vastoin riittää, jos yhteistodennäköisyydet $P(X_1, \ldots, X_n \mid M, \theta)$ on annettu: todennäköisyyslaskennan perusaksioomista seuraa että ehdolliset todennäköisyydet voidaan esittää muodossa

$$P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta) = \frac{P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2 \mid M, \theta)}{P(\mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2 \mid M, \theta)} = \frac{\sum_{\mathbf{S}_3} P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3 \mid M, \theta)}{\sum_{\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_3} P(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3 \mid M, \theta)}, \quad (1.4)$$

missä merkintä $\sum_{\mathbf{S}_i}$ tarkoittaa että summassa käydään läpi kaikki joukossa $\mathbf{S}_i$ esiintyvien muuttujien arvokombinaatiot. Mikä tahansa ehdollinen todennäköisyys saadaan siis laskettua summaamalla eli *marginalisoimalla* yli tietyn yhteistodennäköisyyksien joukon. Jotta tätä lähestymistapaa olisi mahdollista soveltaa käytännössä, on ratkastava seuraavat kaksi ongelmaa:

1. Kuinka tallettaa yhteistodennäköisyydet $P(X_1, \ldots, X_n \mid M, \theta)$ niin että niiden talletus ei vaadi eksponentiaalista muistitilaa, ja että ne ovat tehokkaasti käytettävissä?

2. Kuinka laskea kaavassa (1.4) esiintyviä marginaalisummia tehokkaasti?

Luvussa 3 osoitamme kuinka yllä esitetyt ongelmat voidaan ratkaista kun yhteistodennäköisyysjakaumat määritellään käyttäen Bayes-verkkojen malliperhettä: luvussa 3.1 käsitellään yhteistodennäköisyyksien tallettamisen ongelmaa, ja luvussa 3.2 marginalisointiongelmaa Bayes-verkkojen tapauksessa.

Probabilistisessa päättelyssä estimoidaan siis ehdollista jakaumaa $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$. Seuraavassa luvussa käsitellään sitä miten tätä jakaumaa voidaan käyttää hyväksi päätöksenteossa arvioimalla eri toimenpiteistä seuraavien hyötyjen ja haittojen odotusarvoja. Ennen sitä kuitenkin esittelemme joitakin tyypillisiä probabilistisen päättelyn muotoja.

Yksinkertaisimmassa tapauksessa joukko $\mathbf{S}_1$ käsittää vain yhden muuttujan X, ja tehtävänä on määrätä muuttujan X arvojen jakauma lähtötietojen $\mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2$ pohjalta. Tyypillisen esimerkin tällaisesta ongelmasta muodostavat *luokitteluongelmat*, joissa tehtävänä on määrittää diskreetin luokkamuuttujan X arvojen todennäköisyydet (katso esimerkki 1).

Esimerkissä 1 käytettyjen diskreettien muuttujien jakauma voidaan määrätä laskemalla todennäköisyys kullekin muuttujan mahdolliselle arvolle. Mikäli X on jatkuva-arvoinen, jakauma voidaan tietyin jakaumaoletuksin kuvata antamalla jakauman tunnusluvut, esimerkiksi odotusarvo ja varianssi (katso esimerkki 2).

Esimerkissä 1 esitetyissä diskreeteissä luokitteluongelmissa probabilistista päättelyä käytettiin diagnostiseen päättelyyn, eli syiden (esim. sairaus) todennäköisyyksien arviointiin, annettuna havaitut seuraukset (oireet). Toisaalta, kuten edellä mainittiin, muuttujien jakoa joukkohin $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$ ja $\mathbf{S}_3$ voi-

Esimerkki 1 Yhden diskreetin muuttujan jakauman estimointi (luokitteluongelma).

Ongelma1:	Sairastaako potilas tautia X havaittujen oireiden ja tehtyjen kokeiden ($\mathbf{s}_2$) perusteella?
Ongelma2:	Mikä on asiakkaan luottokelpoisuusluokka (X) havaitun osittaisen asiakasprofiilin ($\mathbf{s}_2$) perusteella?
Ratkaisu1:	Laske $P(X = 1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$.
Ratkaisu2:	Laske $P(X = x \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ kaikille luottokelpoisuusluokille x.

Esimerkki 2 Jatkuvan muuttujan jakauman estimointi.

Ongelma1:	Mikä on tuotteen valmistuskustannusten (X) oletettava arvo, jos täytämme asiakkaan tuotteelle asettamat vaatimukset ($\mathbf{s}_2$)?
Ongelma2:	Mikä on ulostuloventtiilin X virtauksen oletettava voimakkuus jos säätimet $\mathbf{S}_2$ asetetaan arvoihin $\mathbf{s}_2$?
Ratkaisu:	Laske jakauman $P(X \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ odotusarvo.

daan muuttaa dynaamisesti mielivaltaisella tavalla. Niinpä siirtämällä muuttujia joukosta toiseen voimme soveltaa probabilistista päättelyä myös päinvastaiseen suuntaan, seurausten ennustamiseen syiden pohjalta. Tämänkaltaista päättelyä voidaan käyttää esimerkiksi ongelmakentän luonteen analysointiin (data mining) esimerkeissä 3 esitetyillä tavoilla.

Esimerkki 3 Ongelmakentän analysointi.

Ongelma1:	Kuinka suuri osa tautia X sairastavista potilaista kärsii äkillisistä tajuttomuuskohtauksista ($Y = 1$)?
Ongelma2:	Mikä on parhaaseen luottokelpoisuusluokkaan (AAA) kuuluvien asiakkaiden yleisin tilimuoto (Y)?
Ratkaisu1:	Laske $P(Y = 1 \mid X = 1, M, \theta)$.
Ratkaisu2:	Laske $P(Y = y \mid X = AAA, M, \theta)$ kaikille tilimuodoille y.

Esitettyjä kahta päättelyn muotoa (seurauksien arviointi syistä, tai syiden päättely seurauksista) voidaan tietenkin edelleen sekoittaa mielivaltaisella tavalla ratkaisemaan mm. esimerkissä 4 esitettyjen tapausten kaltaisia ongelmia.

Mikäli joukko $\mathbf{S}_1$ sisältää useita muuttujia, tulee jakauman $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ täydellisestä määräämisestä vaikeaa, koska se vaatii diskreetissäkin tapauksessa kaikkien joukossa $\mathbf{S}_1$ olevien muuttujien arvokombinaatioiden lä-

Esimerkki 4 Eri päättelytapojen yhdistäminen.

Ongelma1:	Onko oletettavaa että potilas voi kärsiä tajuttomuuskohtauksista ($Y = 1$), jos hänellä on tauti X, ja hänen ruumiinlämpötilansa on z?
Ongelma2:	Onko tehtyjen havaintojen ($\mathbf{s}_2$) perusteella oletettavaa että potilas sairastaa tautia X, ja että hän voi saada vakavia tajuttomuuskohtauksia?
Ratkaisu1:	Laske $P(Y = 1 \mid X = 1, Z = z, M, \theta)$.
Ratkaisu2:	Laske $P(X = 1, Y = 1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$.

pikäynnin, ja näitä arvokombinaatioita on tietenkin eksponentiaalinen määrä. Niinpä tällaisessa tilanteessa tyydytäänkin usein etsimään se muuttujien $\mathbf{S}_1$ arvokombinaatio $\mathbf{s}_1$ (tai n tässä mielessä parasta arvokombinaatiota) jolla on korkein todennäköisyys, ts. arvokombinaation joka maksimoi todennäköisyyden $P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$. Koska

$$\max_{\mathbf{s}_1} P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta) = \max_{\mathbf{s}_1} P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2 \mid M, \theta), \qquad (1.5)$$

näemme että tässä mielessä optimaalinen arvokombinaatio täydentää vapaille muuttujille $\mathbf{S}_1$ arvot siten että syntyvän kokonaisarvokombinaation todennäköisyys on maksimaalinen. Tyypillisiä esimerkkejä tämänkaltaisen probabilistisen päättelyn sovellusalueista ovat konfiguraatio-ongelmat, joissa täydennetään osakonfiguraatio siten että täydennetyn konfiguraation todennäköisyys on mahdollisimman suuri annetun mallin muodostamassa todennäköisyysjakaumassa. Jos malli (M, θ) muodostetaan esimerkiksi jotakin tuotetta valmistavan yrityksen valmistettujen tuotteiden tietokannasta, voidaan tällä tavalla täydentää asiakkaan tuotteelle esittämät toivomukset siten että uusi tuote on mahdollisimman samankaltainen jo valmistettujen tuotteiden kanssa, ja siten otaksuttavasti edullinen valmistaa (katso esimerkki 5).

Esimerkki 5 Optimaalisen konfiguraation etsiminen.

Ongelma1:	Täydennä valmistettavan tuotteen kuvaus ($\mathbf{S}_1$) siten että tuote täyttää asiakkaan sille esittämät vaatimukset ($\mathbf{s}_2$), ja sopii yrityksen tuoteprofiiliin (eli siitä tehtyyn malliin) mahdollisimman hyvin.
Ongelma2:	Konstruoi asiakkaan täydellinen asiakasprofiili ($\mathbf{S}_1$) annettujen tietojen $\mathbf{s}_2$ pohjalta.
Ratkaisu:	Etsi $\mathbf{s}_1$ siten että todennäköisyyden $P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2 \mid M, \theta)$ arvo on maksimaalinen.

Ehdollisia todennäköisyyksiä voidaan käyttää myös etäisyysmittana, jonka avulla voidaan etsiä esimerkiksi valmistettujen tuotteiden joukosta se tapaus joka muistuttaa eniten asiakkaan antamaa osittaista tuotteen kuvausta. Tällaista probabilistista etäisyysmetriikkaa käsitellään lähteessä [70].

Konfiguraatio-ongelmia läheisesti muistuttavan sovellusalueen muodostavat asiakasprofilointitehtävät (katso esimerkki 5). Tavoitteena on täydentää asiakkaan profiili asiakkaasta kerättyjen tietojen ja kaikkien asiakkaiden muodostamasta tietokannasta muodostetun mallin perusteella. Syntyvää täydennettyä asiakasprofiilia voidaan käyttää hyväksi mm. suoramarkkinoinnin suuntaamisessa: probabilistista päättelyä voidaan käyttää esimerkiksi ennustamaan olisiko asiakas kiinnostunut tietyntyyppisestä luottokortista annettuna hänestä kerätyt tiedot.

Koska probabilistista päättelyä käyttäen voidaan muodostaa täydellinen mallimaailman tilanteen kuvaus, voidaan yhteistodennäköisyyden maksimoivia konfiguraatioita käyttää myös probabilistisen päättelyn selitysmekanismina: muodostetusta täydennetystä konfiguraatiosta voidaan esimerkiksi päätellä mitä muita tauteja tai oireita jo diagnosoidulla potilaalla mahdollisesti on (katso esimerkki 6). Ennustettujen lisäoireiden havaitseminen lisää luonnollisesti jo tehdyn diagnoosin luotettavuutta.

Esimerkki 6 Päättelyä tukevat selitykset.

Ongelma:	Oletetaan että potilas sairastaa tautia X ja että hänellä on oireet $\mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2$. Mitä muita oireita potilaalla luultavasti on? Sairastaako potilas mahdollisesti myös jotain muuta tautia?
Ratkaisu:	Etsi $\mathbf{s}_3$ siten että todennäköisyyden $P(X = 1, \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3 = \mathbf{s}_3 \mid M, \theta)$ arvo on maksimaalinen.

Kuten edellä esitetyistä esimerkeistä huomaamme, puuttuva tieto käsitellään probabilistisessa päättelyssä erityisen elegantilla tavalla: jos esimerkiksi alkuperäinen suunnitelmamme oli estimoida jakaumaa $P(X_1 \mid X_2 = x_2, \ldots, X_5 = x_5)$, mutta muuttujan X_3 arvoa ei olekaan saatavilla, käytämme päättelyssä yksinkertaisesti jakaumaa $P(X_1 \mid X_2 = x_2, X_4 = x_4, X_5 = x_5)$ — kullakin hetkellä käytetään siis jakaumaa joka saadaan ottamalla huomioon kaikki annettu tieto. Monien muiden malliperheiden tapauksessa on puuttuvan tiedon käsittely huomattavan hankalaa: esimerkiksi päätöspuiden toimivuuden perusedellytyksenä on se, että kussakin päätössolmussa käytettävän muuttujan arvo on aina mahdollista saada selville.

Probabilistista päättelyä voidaan käyttää myös puuttuvan tiedon estimointiin: sen sijaan että estimoisimme jakaumaa $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$, asetamme estimoitavat muuttujat johonkin arvokombinaatioon $\mathbf{s}_1$, ja kysymme kuinka muuttujat $\mathbf{S}_3$ on asetettava kun halutaan maksimoida halutun arvokombinaation todennäköisyys $P(\mathbf{S}_1 = \mathbf{s}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3, M, \theta)$. Esimerkissä 7 esitetyt tapaukset kuvaavat tämäntyyppisiä sovellusalueita.

Esimerkki 7 Puuttuvan tiedon estimointi.

Ongelma1:	Mitä lääkettä ($\mathbf{S}_3$) potilaalle on annettava jotta toipumisen todennäköisyys olisi maksimaalinen?
Ongelma2:	Kuinka asettaa säätimet $\mathbf{S}_3$ siten että läpivirtaus putkessa X olisi optimaalinen tilanteessa jossa säätimet $\mathbf{S}_2$ halutaan pitää nykyisissä asetuksissa $\mathbf{s}_2$?
Ongelma3:	Muodosta valmistettavan tuotteen kuvaus ($\mathbf{S}_3$) siten että se on konsistentti asiakkaan vaatimusten ($\mathbf{s}_2$) kanssa, ja voitto on maksimaalinen.
Ratkaisut1&2:	Etsi $\mathbf{s}_3$ siten että todennäköisyyden $P(X = 1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3 = \mathbf{s}_3, M, \theta)$ arvo on maksimaalinen.
Ratkaisu3:	Etsi $\mathbf{s}_3$ siten että jakauman $P(X \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \mathbf{S}_3 = \mathbf{s}_3 \mid M, \theta)$ odotusarvo on maksimaalinen.

Tässä yhteydessä on huomautettava että esimerkissä 7 esiintyvä päättelyn muoto, puuttuvan tiedon estimointi, on monissa tilanteissa laskennallisesti raskaampi tehtävä kuin jakauman $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ estimointi, eli päättely puuttuvan tiedon vallitessa.

Paitsi probabilistisessa päättelyssä esiintyvissä syötearvoissa, puuttuvaa tietoa voi esiintyä myös opetusaineistossa $\mathcal{D}$. Lähteessä [72] tarkastellaan bayesiläisen lähestymistavan käyttämistä tämän ongelman ratkaisemisessa.

1.4 Riskianalyysi

Edellisessä luvussa kuvattiin kuinka probabilistisessa päättelyssä on tavoitteena muodostaa ehdollinen todennäköisyysjakauma estimoitaville muuttujille, annettuna tunnettujen muuttujien arvot. Oletetaan seuraavassa yksinkertaisuuden vuoksi että estimoimme jakaumaa $P(X \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \theta, M)$, missä X on diskreetti muuttuja jonka arvo meidän on kiinnitettävä annettujen lähtötietojen $\mathbf{s}_2$ pohjalta. Intuitiivisesti luonnollisimmalta tuntuvin vaihtoehto on tietenkin valita se muuttujan X arvo x joka maksimoi todennäköisyyden $P(X = x \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \theta, M)$. Käytännön sovelluksissa saatetaan kuitenkin tehdä muuttujan arvon valinnan perusteella päätöksiä, joiden seuraukset voivat olla hyvin kauaskantoisia, ja siksi päätöksenteon huolellinen analyysi on paikallaan. Todennäköisyyslaskenta tarjoaa *päätösteoriana (decision theory)* tunnetun teoreettisen kehikon eri päätöstilanteissa esiintyvien ongelmien ratkaisemiseksi. Päätösteorian mukaan meidän on valittava se vaihtoehto, joka minimoi odotettavissa olevan haitan (maksimoi odotettavissa olevan hyödyn). Esimerkki 8 havainnollistaa tätä periaatetta.

Esimerkki 8 Päätösteoreettinen riskianalyysi.

Työpaikkalääkäri saa eteensä työntekijän, jolle tehdyt alustavat testit osoittavat henkilön potevan erästä tautia 60% todennäköisyydellä. Tauti on sinänsä vaaraton, mutta jos se pääse hoitamattomana taudin myöhempään vaiheeseen, joutuu henkilö kymmenen päivän sairaslomalle. Tauti voidaan diagnosoida 100% luotettavuudella erään nopean, mutta melko kalliin lisätestin avulla. Testin hinta vastaa työntekijän yhden päivän työpanosta. Jos henkilöllä tämän testin avulla havaitaan kyseinen tauti ennen kuin se kehittyy myöhempään vaiheeseensa, voidaan tarvittavien sairaspäivien määrä vähentää puoleen.

Lääkäri pohtii tulisiko hänen määrätä työntekijälle kallis lisätesti, vai luokitella henkilö terveeksi ja lähettää hänet takaisin töihin. Eri vaihtoehdoissa kustannukset muodostuvat siis seuraavasti, kun yksikkönä käytetään menetettyjä työpäiviä:

Aiheutuvat kustannukset:	Potilas on sairas	Potilas on terve
Tehdään lisätesti	6	1
Ei tehdä lisätestiä	10	0

Jos potilaalle tehdään lisätesti, on aiheutuvien kustannusten odotusarvo $0.6 \cdot 6 + 0.4 \cdot 1 = 4$, kun taas toisessa tapauksessa aiheutuvien kustannusten odotusarvo on $0.6 \cdot 10 + 0.4 \cdot 0 = 6$. Päätösteorian mukaan eri toimintavaihtoehdoista on valittava se, josta seuraava odotettavissa oleva kustannus on minimaalinen (tai vastaavasti odotettavissa oleva hyöty maksimaalinen), joten lääkärin tulisi määrätä potilas lisätesteihin. Jos lääkärille tulee 1000 samanlaista tapausta vuodessa, toimimalla päätösteorian mukaisesti hän säästää yhtiölleen vuosittain (keskimäärin) 2000 työpäivää vastaavan määrän rahaa.

Jos ehdolliset todennäköisyydet $P(X = x \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, \theta, M)$ on arvioitu oikein, bayesiläisen päätösteorian mukaan toimivan agentin toiminta on optimaalista, tulkittuna siten, että tietyllä ajanjaksolla saavutettavan hyödyn odotusarvo on tätä politiikkaa käyttäen maksimaalinen. Vaikka päätöksissä käytettävä todennäköisyysjakauma oliskin arvioitu väärin, bayesiläiseen päätösteoriaan perustuvan toiminnan voidaan osoittaa silti olevan ristiriidattomasti rationaalista siinä mielessä, että ei ole mahdollista konstruoida sellaista päätöksentekotilanteiden jonoa, jonka tuloksena bayesiläinen päätöksentekijä häviäisi varmasti (ns. “Dutch book”-argumentti, katso esim. [10, 9, 32]). Lisäksi voidaan osoittaa että bayesiläinen päätösteoria on *ainoa* tässä mielessä rationaalinen päätöksentekopolitiikka [102].

Päätösteoriaa on kritisoitu siitä että eri tilanteista seuraavien haittojen arviointi on usein kohtuuttoman vaikeaa tai jopa mahdotonta. Tämä on usein totta: esimerkissä 8 haittojen arvottaminen oli yksinkertaista, koska niitä arvioitiin pelkästään yhtiölle muodostuvien kustannusten kautta, mutta jos mukaan olisi otettu työntekijälle koituvien kärsimysten arviointi, tilanne olisi ollut paljon monimutkaisempi. Päätösteoriassa toteutuu kuitenkin bayesiläisen mallintamisen pääperiaate, jonka mukaan meidän on kirjattava täsmällisesti kaikki ongelmanratkaisussa käyttämämme oletukset. Jos käyttämämme järjestelmä ei toimi toivotulla tavalla, tiedämme että syy on joko siinä, että olemme arvioineet haittavaikutukset väärin, tai siinä että emme ole pystyneet estimoimaan käytettyjä ehdollisia todennäköisyyksiä riittävän tarkasti. Päätösteoria antaa meille kuitenkin teoreettisesti optimaalisen päämäärän, jota voimme approksimoida parhaan kykymme mukaan, ja jos järjestelmämme ei toimi halutulla tavalla, voimme yrittää analysoida mikä tekemistämme approksimaatioista ei pidä paikkaansa.

Tässä yhteydessä on korostettava että ihmisen rooli bayesiläisessä mallintamisessa on ensiarvoisen tärkeä: valittavissa olevista vaihtoehdoista seuraavien haittojen (tai hyötyjen) arviointi on tehtävä joka jää viime kädessä ihmisen tehtäväksi. Päätösteoria voi antaa toimintasuosituksen annettujen haittavaikutusten kannalta, mutta ihmisen tehtäväksi jää arvioida tehtyjen oletusten paikkansapitävyys ja siten toimintasuositusten järkevyys.Tästä syystä epätäsmällistä päättelyä suorittavia järjestelmiä onkin ryhdytty kutsumaan yhä useammin *päätöksentukijärjestelmiksi (decision support systems)* entisen termin *asiantuntijajärjestelmä (expert system)* sijaan.

Luku 2

Bayesiläisen lähestymistavan arviointia

Bayesiläisen mallintamisen edut: ristiriidaton päättely, ylioppimisen välttäminen, tilastollisen aineiston ja asiantuntijatietämyksen yhdistäminen, puuttuvan tiedon luonteva käsittely, teoreettinen kehikko hybridimalleille. Vastauksia bayesiläisen lähestymistavan kritiikkiin. Vertailua esimerkkeihin perustuvaan päättelyyn ja ei-parametrisiin malleihin. Yhteys informaatioteoreettisiin lähestymistapoihin: MDL, MML ja stokastinen kompleksisuus.

Luvussa 1 esitettyä bayesiläistä mallinnuskehikkoa kohtaan voidaan esittää kritiikkiä kohdistamalla se joko parametriseen mallintamislähestymistapaan sinänsä, tai nimenomaan bayesiläiseen mallintamiseen. Luvussa 2.3 käsittelemme lyhyesti esimerkkeihin perustuvaa päättelyä ja ei-parametrisia malliperheitä, jotka eivät kuitenkaan osoittaudu kovin erilaisiksi lähestymistavoiksi parametriseen mallintamiseen verrattuna. Sitä ennen kertaamme luvussa 2.1 tärkeimmät bayesiläisen lähestymistavan tarjoamat edut, ja arvioimme baysiläisyyttä kohtaan esitettyä kritiikkiä luvussa 2.2. Luvussa 2.4 käsitellään informaatioteoreettista lähestymistapaa mallintamiseen, ja osoitetaan sen läheinen yhteys bayesiläisyyteen.

2.1 Bayesiläinen mallintamisen etuja

Bayesiläinen mallinnus tarjoaa teoreettisesti elegantin, yhtenäisen lähestymistavan kaikkiin oppivien ja älykkäiden järjestelmien rakentamisessa esiintyviin ongelmiin. Mikäli käytettävä malliperhe on lisäksi probabilistinen, saavutetaan lähestymistavalla monia käytännön sovellusten kannalta merkittäviä etuja:

Ristiriidaton kalkyyli pätäsmällisen tiedon käsittelemiseksi.
Todennäköisyyslaskenta tarjoaa epätäsmällisen tiedon käsittelemiseksi matemaattisen kalkyylin, missä uskomusastetta tiettyyn väitteeseen kuvataan reaaliluvulla väliltä [0,1]. Syntyvä kalkyyli on *ristiriidaton l. konsistentti*, mikä tarkoittaa sitä että arvioidessamme jonkin suureen todenperäisyyden astetta, on todennäköisyyslaskennan tarjoama vastaus aina yksikäsitteinen. Mielivaltaisen lukuja väliltä [0,1] manipuloivan numeerisen järjestelmän ristiriidattomuus ei suinkaan ole itsestäänselvyys. Itse asiassa voidaan osoittaa että tiettyjen oletusten vallitessa todennäköisyyslaskenta on ainoa olemassaoleva konsistentti epätäsmällistä tietoa käsittelevä kalkyyli. Vaikka todistuksen perustana olevia oletuksia ei hyväksyttäisikään, osoittaa tämä teoreettinen tulos että konsistentin kalkyylin luominen on erittäin vaikeaa (enemmän aiheesta löytyy lähteestä [133]).

Todennäköisyyslaskennan käyttäminen poistaa siten yhden epätäsmällistä päättelyä suorittavien järjestelmien ongelmista: jos esimerkiksi rakennamme sumean sääntökannan ja käytämme jotakin mielivaltaisesti valittua kalkyyliä (esimerkiksi jotakin min-max-yhdistelysääntöjen variaatiota), ja järjestelmä ei toimi toivotulla tavalla, emme voi tietää onko meidän syytä vaihtaa käytettyä kalkyylia, vai järjestelmän parametreja (jäsenyysasteita). Bayesiläisessä lähestymistavassa kalkyyli on yksikäsitteinen, joten järjestelmän puutteiden korjaamiseksi riittää tarkastella käytetyn mallin parametreja.

Ylioppimista välttävä mallinvalintakriteeri.
Kuten luvussa 1.2.1 todettiin, bayesiläinen mallinvalintakriteeri sisältää "automaattisen Occamin partaveitsen" minkä ansiosta mallin struktuurin kompleksisuus voidaan valita siten että mallin tarkkuus myös opetusjoukon ulkopuolella (mallin yleistyskyky) on mahdollisimman hyvä. Bayesiläinen oppiminen pyrkii siis automaattisesti tasapainoon mallien kompleksisuuden ja niiden kuvausvoiman välillä. Vaikka bayesiläistä mallinvalintakriteeriä on luonnollisinta käyttää aidosti probabilististen malliperheiden, kuten esimerkiksi Bayes-verkkojen tapauksessa (katso luku 3.3), voidaan kriteeriä soveltaa myös muiden malliperheiden, esimerkiksi neuroverkkojen [88, 96, 12, 14, 112] ja päätöspuiden [110, 100] oppimisessa.

Tilastollisen aineiston ja asiantuntijatietämyksen yhdistäminen luonnollisella, teoreettisesti tyydyttävällä tavalla.
Luvussa 1.2.4 hahmoteltiin kuinka asiantuntijatietämys voidaan yhdistää tilastolliseen aineistoon priorijakaumia käyttäen. Toisaalta monissa probabilistisissa malliperheissä (kuten esimerkiksi luvussa 3 esitettyjen Bayes-verkkojen tapauksessa) voidaan sekä mallistruktuureille että malliparametreille antaa

selkeä semanttinen tulkinta, jolloin malleja voidaan konstruoida myös suoraan asiantuntijatietämystä käyttäen, ilman tilastollista oppimista (toisin kuin neuroverkkojen ja muiden ns. "black box"-mallien tapauksessa). Luvussa 3.3 sovellamme näitä periaatteita käytännössä, ja esitämme kuinka Bayes-verkkomalleja voidaan konstruoida käyttäen pelkästään tilastollista aineistoa, pelkästään asiantuntijatietämystä, tai yhdistämällä nämä kaksi tietolähdettä.

Parametrien oppimisen nopeus.
Kuten luvussa 1.3 todettiin, bayesiläisessä mallintamisessa voidaan optimaaliset malliparametrit löytää monessa tapauksessa suoraan ilman aikaavievää iteratiivista oppimisprosessia (vrt. neuroverkkojen parametrien oppiminen backpropagation-algoritmilla). Luvussa 3.3.2 annamme yksinkertaisen laskukaavan, jonka avulla Bayes-verkkomallin parametrit voidaan laskea suoraan annetusta opetusjoukosta $\mathcal{D}$.

Tarvittavan tilastollisen aineiston vähyys.
Bayesiläinen mallintaminen mahdollistaa asiantuntijatietämyksen hyväksikäytön mallien oppimisprosessissa. Jos asiantuntijatietämystä on saatavilla, on tarvittavan tilastollisen aineiston määrä hyvin pieni — itse asiassa mallit voidaan konstruoida suoraan asiantuntijatietämyksen perusteella, ilman tilastollista oppimista! Toisaalta, vaikka asiantuntijatietämystä ei olisikaan saatavilla, todellisilla aineistoilla suoritetut empiiriset kokeet [74] ovat osoittaneet että bayesiläisessä oppimisessa jo hyvin pieni esimerkkiotos (parhaissa tapauksissa vain muutamista esimerkeistä muodostuva joukko) riittää hyvän tuloksen saavuttamiseksi parametrien oppimisessa.

Monipuoliset sovellusmahdollisuudet yhteisjakauman mallintamisen ansiosta.
Kuten luvussa 1.3 näimme, bayesiläinen mallintaminen mahdollistaa hyvin monenlaisten ongelmien kuvaamisen yhdessä ristiriidattomassa teoreettisessa kehikossa. Koska probabilistiset mallit kuvaavat mallinnetussa maailmassa esiintyvien tilanteiden yhteisjakaumaa, voidaan samaa probabilistista mallia käyttää joustavasti hyvin erityyppisissä sovelluksissa.

Mahdollisuus sekoittaa jatkuvia ja diskreettejä muuttujia.
Probabilistisissa malleissa voidaan käyttää joko moniarvoisia diskreettejä muuttujia, jatkuva-arvoisia muuttujia, tai molempia yhtäaikaa. Tähän kysymykseen palataan luvussa 3.4.

Puuttuvan tiedon käsittelymekanismit.
Kuten luvussa 1.3 näimme, probabilistinen lähestymistapa tarjoaa selkeän teoreettisen kehikon puuttuvan tiedon käsittelemiseksi: jos puuttuva tieto ei sinänsä ole kiinnostuksen kohteena, probabilistinen päättely voidaan suorittaa olemassaolevan tiedon perusteella marginalisoimalla (integroimalla) puuttuvan tiedon vaikutus pois. Puuttuva tieto voidaan toisaalta myös täydentää optimaalisella tavalla vertailemalla eri täydennysten todennäköisyyksiä.

Toimintavaihtoehtojen päätösteoreettinen analyysi.
Vaihtoehtoisista lähestymistavoista poiketen bayesiläinen päätösteoria tarjoaa mahdollisuuden arvioida eri toimintavaihtoehtoihin liittyviä odotettavia riskejä ja hyötyjä. Päätösteoriaa voidaan käyttää odotusarvoisesti pienimmän riskin (tai suurimman hyödyn) tuottavan vaihtoehdon etsimiseksi luvussa 1.4 esitetyllä tavalla, tai jo tehdyn päätöksen seurauksien analysoimiseksi. Päätösteoriaa voidaan luonnollisesti soveltaa myös ei-probabilististen mallien antamien tulosten käsittelyssä, jos mallien tulokset esitetään todennäköisyysjakaumana. On kuitenkin huomattava että pelkkä numeroiden suora normeeraus siten että niiden summa on yksi ei välttämättä tuota todennäköisyysjakaumaa joka vastaisi ongelmakentän todellista jakaumaa hyvin, eikä päätösteorian soveltaminen tällaiselle jakaumalle tuota hyviä tuloksia.

Teoreettinen kehikko hybridimallien konstruoimiseksi.
Luvussa 1.2 esitetyssä lähestymistavassa valittiin annetun opetusdatan $\mathcal{D}$ perusteella yksi mallistruktuuri M, ja yksi parametriarvoilmentymä $\hat{\theta}$, joiden avulla konstruoitiin ongelmakenttää mallintava yhteistodennäköisyysjakauma $P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid M, \hat{\theta}, \mathcal{D})$. On kuitenkin huomattava, että vaikka esitetty bayesiläinen kriteeri valitsee kaikkein todennäköisimmän parametrivektorin $\hat{\theta}$, saattaa olla mahdolllista että on muita parametriarvovektoreita, jotka ovat lähes yhtä todennäköisiä kuin $\hat{\theta}$. Jos päämääränä on tehdä tarkkoja ennustuksia saatavilla olevan aineiston $\mathcal{D}$ perustella, on helppo nähdä että ennustusten tarkkuutta voidaan parantaa käyttämällä yhden mallin sijasta joukkoa todennäköisiä parametrivektoreita, painottaen niiden antamia tuloksia parametrivektorien todennäköisyydellä. Itse asiassa bayesiläinen lähestymistapa ei pysähdy edes vielä tähän, vaan tarkasti ottaen bayesiläisessä mallintamisessa edellytetään, että optimaalisen ennustustarkkuuden saavuttamiseksi on käytettävä jakaumaa ,joka saadaan laskemalla integraali

("painotettu summa") yli *kaikkien* (äärettömän monen) parametrivektorin θ:

$$P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid M, \mathcal{D}) \\ = \int P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid M, \theta) P(\theta \mid M, \mathcal{D}) d\theta.$$

Tämä lähestymistapa johtaa odotusarvoparametrien käyttöön, joista puhutaan luvussa 3.3.2. Toisaalta vastaavaa ajatuskulkua voidaan soveltaa myös mallistruktuurin valinnassa, jolloin päädytään käyttämään jakaumaa

$$P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid \mathcal{D}) \\ = \sum_M (X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n \mid M, \mathcal{D}) P(M \mid \mathcal{D}).$$

Bayesiläisen filosofian mukaan opetusdatan perusteella saadaan tarkin ongelmakentän jakauman esitys muodostamalla painotettu summa saatavilla olevista mallistruktuureista, kun painokertoimina käytetään mallistruktuurien posterioritodennäköisyyksiä $P(M \mid \mathcal{D})$. Näin voidaan yhdistää esimerkiksi monen eri Bayes-verkon antamat tulokset, tai muodostaa vaikkapa Bayes-verkon, neuroverkon, ja päätöspuun muodostama hybridimalli. Jälkimmäisessä tapauksessa ongelmaksi saattaa kuitenkin muodostua se, kuinka konstruoida jakaumamalli, joka antaa eri malliperheistä tuleville mallistrktuureille yhteismitalliset todennäköisyydet. Lisäksi on huomattava että hybridimallien tulkittavuus ei ole kovin hyvä, joten lähestymistapaa ei voida käyttää ongelmakentän analysointiin tähtäävissä sovelluksissa (data mining).

2.2 Bayesiläinen lähestymistavan kritiikkiä

Edellisessä luvussa esitetyistä bayesiläisen mallintamisen eduista huolimatta on bayesiläinen mallinnus toistaiseksi jäänyt ehkä vähemmälle huomiolle kuin vaihtoehtoiset lähestysmistavat. Yksi syy on se, että bayesiläiseen mallinnukseen liittyy sen formaalin luonteen vuoksi joitakin teknisiä ongelmia, mutta erityisesti luvussa 3 kuvatun Bayes-verkkomalliperheen syntyminen on poistanut monet näistä ongelmista. Saavutetut tulokset ovat kuitenkin verrattain uusia (Bayes-verkkoteoriaa on tutkittu laajemmin vasta noin 10 vuoden ajan), eivätkä siksi vielä kovin laajalti tunnettuja. Maailmalla liikkuukin bayesiläisestä mallintamisesta monia harhakäsityksiä, jotka eivät pidä paikkaansa.

Seuraavassa kokoelma yleisimpiä bayesiläiseen lähestymistapaan kohdistuvia kriittisiä kommentteja.

Bayesiläinen mallinnus edellyttää epärealistisen suuren parametrijoukon arvojen määräämistä.
Bayesiläinen mallinnuksen myönnetään usein olevan *teoriassa* hieno lähestymistapa, mutta probabilististen mallien uskotaan edellyttävän niin suuren parametrijoukon arvojen tarkkaa määrittämistä, että lähestymistapa ei ole käytännössä mahdollinen. Luvussa 3 esitetyt Bayes-verkkomallit ovat vasta muutamia vuosia sitten kehitetty elegantti ratkaisu tähän ongelmaan: Bayes-verkkoja käyttäen tarvittavien parametrien määrä saadaan vähennettyä käytännön sovellukset mahdollistavalle tasolle. Toisaalta, kuten edellä jo todettiin, bayesiläinen mallintaminen tarjoaa mahdollisuuden oppia malleja suoraan tilastollisesta aineistosta, suoraan asiantuntijatietämystä soveltaen, tai yhdistämällä molemmat tietolähteet. Tämä mahdollisuus siirtää parametrien määräämistehtävän ihmiseltä koneelle suoritettavaksi. Lisäksi on vielä todettava että bayesiläisten mallien on empiirisesti havaittu kestävän hyvin parametrien arvojen epätarkkuutta, jolloin parametrien tarkka määrittäminen ei ole tärkeää—käytännön sovelluksia ajatellen on usein riittävää kunhan ne ovat oikeaa suuruusluokkaa [57].

Priorijakaumien määrääminen on vaikeaa.
Kuten edellä näimme, bayesiläinen mallintaminen edellyttää että järjestelmälle annetaan kaksi priorijakaumaa: mallistruktuurien priorijakauma $P(M)$ ja malliluokan parametrien priorijakauma $P(\theta \mid M)$. Tämä seikka mainitaan usein bayesiläisen mallintamisen heikkoutena, vaikka tosiasiassa se on yksi lähestymistavan suurimpia etuja — mahdollistaahan priorijakaumien käyttö nimenomaan tilastollisen tiedon ja asiantuntijatietämyksen yhdistämisen luonnollisella tavalla. Mikäli prioritietämystä ei ole saatavilla, hyvä vaihtoehto käytännössä on käyttää ns. ei-informatiivista, tasaista priorijakaumaa. Toinen käyttökelpoinen vaihtoehto on käyttää informaatioteoreettisia lähestymistapoja joita tarkastellaan luvussa 2.4.

Bayesiläinen päättely on epäintuitiivista.
Bayesiläistä lähestymistapaa on kritisoitu siitä, että sen tarjoama epätäsmällisen päättely olisi jollakin tavoin “epäintuitiivista”, erilaista kuin ihmisten suorittama epätäsmällinen päättely. Suurin syy tähän uskomukseen on vanha objektivistinen todennäköisyyskäsitteen tulkinta, jonka mukaan todennäköisyydet määritellään toistokokeissa esiintyvinä frekvensseinä. Uudemman, *subjektivistisen* todennäköisyystulkinnan mukaan todennäköisyydet määritellään uskomusastetta kuvaavina lukuina väliltä $[0, 1]$. Tämän ansiosta voidaan subjektivistisessa lähestymistavassa puhua esimerkiksi todennäköisyydestä sille että maailmanloppu tulee vuonna 2000, kun taas vanhassa fre-

kventistisessä mallissa kyseisen todennäköisyyden käyttäminen oli ongelmallista. Luvussa 3.2 annamme probabilistisesta päättelystä esimerkkejä, jotka tukevat intuitiivisesti hyvin luonnolliselta tuntuvia päättelyn muotoja (esimerkiksi ns. syiden poisselittämisilmiötä).

Myös lukuisat päätösteoriaan liittyvät paradoksit aiheuttavat sekaannusta. tyypillisessä esimerkissä koehenkilölle annetaan kaksi vaihtoehtoa: vaihtoehdossa A hän saa kymmenen miljoona markkaa todennäköisyydellä 1 (siis varmasti), kun taas vaihtoehdossa B hän saa kymmenen miljoona markkaa todennäköisyydellä 0.25, neljäkymmentä miljoonaa markkaa todennäköisyydellä 0.25, ja ei mitään todennäköisyydellä 0.5. Vaihtoehto A on varmaankin itse kunkin mielestä paljon houkuttelevampi, vaikka päätösteoria suosittelee vaihtoehdon B valitsemista, koska voiton odotusarvo on yli kymmenen miljoona markkaa! Esimerkki paljastaa kuinka tärkeää päätösteoriassa on odotettavissa olevan hyödyn mittaaminen oikein: siinä oletettavassa lähtötilanteessa, jossa koehenkilö ei ole miljonääri, ei neljänkymmenen miljoonan markan voittaminen ole hänelle neljä kertaa arvokkaampaa kuin kymmenen miljoonan voittaminen: jo kymmenen miljoonaa riittää siihen että henkilö voi elää loppuelämänsä mukavissa olosuhteissa ilman tarvetta palkkatyöhön, joten voittosumman kasvattaminen nelinkertaiseksi ei tuo merkittävää lisäystä voiton aikaansaamaan elämänmuutokseen. Jos eri markkamääriä vastaavat todelliset arvostukset otetaan huomioon, päätösteoria toimii inhimillisesti katsoen “järkevällä“ tavalla.

Toisaalta on vielä todettava, että vaikka bayesiläinen päättely olisikin jossakin mielessä epäintuitiivista, ehkäpä se olisi vain hyvä asia: ihmiset ovat monesti osoittautuneet huonoiksi päätöksentekijöiksi monimutkaisia suureita käsittelevissä tilanteissa. Kuten edellä kuvattu “paradoksi” osoittaa, ihmiselle jää oppivien ja älykkäiden järjestelmien käyttämisessä tärkeä rooli: on vaikeaa kuvitella tietokoneohjelmaa joka pystyisi tyydyttävästi määräämään ongelmakentästä tärkeimmät olemassaolevat toimintavaihtoehdot, ja arvioimaan niihin liihin liittyviä hyötyjä ja haittoja.

Bayesiläinen mallintaminen käsittelee vain tiedon epävarmuutta, ei tiedon epätäsmällisyyttä.
Todennäköisyyslaskentaa on kritisoitu siitä, että se käsittelee perinteisiä, täsmällisiä objekteja, eikä epätäsmällisyyttä kuvaavia ns. sumeita käsitteitä (katso esim. [58]). Koska todennäköisyysjakaumia voidaan määritellä mielivaltaisen moniarvoisille tai jatkuva-arvoisille muuttujille, voidaan bayesiläisessä mallintamisessa kuitenkin käsitellä samoja kysymyksiä kuin sumeassa logiikassakin [21, 20].

Bayesiläisen mallintamisen soveltaminen on vaikeaa.
Bayesiläisen mallintamisen edellyttämä kaikkien oletusten eksplisiittisen formalisoinnin täydellinen ymmärtäminen edellyttää tiettyjä matemaattisia valmiuksia. Tällaisen mallintamisen soveltaminen käytännössä ei kuitenkaan edellytä näiden teknisten yksityiskohtien syvempää ymmärrystä, vaan bayesiläisen mallintamisen teoriaa voidaan käyttää tuottamaan yksinkertaisia laskenta-algoritmeja, kuten lukuisat saatavilla olevat ohjelmistot todistavat (ks. luku 4.2). Toisaalta monet heuristisesti kehitetyt "ad hoc"-menetelmät voidaan tulkita todennäköisyyslaskennan tarjoamassa kehikossa. Tämän avulla on pystytty esimerkiksi selittämään ne epärealistiset riippumattomuusoletukset, jotka joudutaan (implisiittisesti) tekemään käytettäessä ns. varmuuskertoimiin perustuvia sääntökantoja [46].

2.3 Esimerkkeihin perustuva päättely ja ei-parametriset mallit

Ei-parametrisissa (non-parametric) lähestymistavoissa luovutaan mallien eksplisiittisestä, mallistruktuurin kiinnittämästä parametroidusta esitysmuodosta, ja yritetään ratkaista ongelmakentässä esiintyvät tehtävät suoraan esimerkkitapauksia soveltaen. *Esimerkkeihin perustuvassa päättelyssä (case-based reasoning, CBR)*[1] päättelyongelmat ratkaistaan kaksivaiheisella prosessilla. Ensimmäisessä, *esimerkkien vertailuvaiheessa (case matching)*, käsillä olevaa tilannetta verrataan muistissa oleviin aikaisempiin esimerkkitapauksiin (cases), ja tapauksille annetaan yhteensopivuusaste (matching score), joka on sitä suurempi mitä enemmän muistissa oleva tapaus muistuttaa nykyistä tilannetta. Päättelyn toisessa, *esimerkkien sovellusvaiheessa (case adaptation)* muodostetaan ratkaisuehdotus muokkaamalla suurimman yhteensopivuusasteen saaneiden vanhojen tapausten ratkaisemisessa käytetyistä menetelmistä ehdotus nykyisen tilanteen ratkaisemiseksi.

Yksinkertaisin esimerkki CBR-tyyppisestä lähestymistavasta on ns. *lähimmän naapurin menetelmä (nearest neighbor method)*, jossa esimerkkien yhteensopivuusasteena käytetään niiden (euklidista) etäisyyttä, ja tarvittavat tiedot kopioidaan suoraan korkeimman yhteensopivuusasteen saaneesta esimerkkitapauksesta. Monimutkaisemmissa malleissa tarvittavat tiedot muodostetaan käyttämällä opetusjoukon tapauksien painotettua summaa, käyttäen painokertoimina tapausten yhteensopivuusasteita. Esimerkkeihin

[1] Lisätietoa esimerkkeihin perustuvasta päättelystä löytyy esimerkiksi lähteistä [68, 139]. Lähestymistavasta käytetään myös termejä *memory-based reasoning* [131],*instance-based learning* [2], *lazy learning* [1] ja *transductive inference* [137].

perustuvan päättelyn toimintaperiaate on hyvin samanlainen kuin tilastotieteessa *ydinestimaattoreiksi (kernel estimators)* kutsutuilla menetelmillä (katso esim. [121]). Ydinestimaattoreissa muodostetaan annetun opetusjoukon kunkin tapauksen ("ytimen") ympärille jakauma jonka keskikohta on ytimessä, ja kokonaisjakauma saadaan tällaisten ydinjakaumien summana. Neuroverkkotutkimuksen alueella vastaavia menetelmiä kutsutaan *ydinkantafunktioiksi (radial basis functions)* [92, 107] tai *probabilistisiksi neuroverkoiksi (probabilistic neural networks)* [128].

On tärkeää huomata että nimestään huolimatta ei-parametriset mallit eivät suinkaan ole parametrittomia: esimerkiksi vaikka ydinestimaattoreissa on ydinjakaumien määrä, ja niiden keskikohta kiinnitetty, on jakaumien tarkka muoto määrättävä joukolla parametreja (esim. ydinjakaumakohtaiset varianssit), jotka on arvioitava esimerkkiaineistosta. Esimerkkeihin perustuvassa päättelyssä puolestaan on tapausten yhteensopivuusasteen laskemisessa käytettävä metriikka käyttäjän vapaasti määrättävissä, ja eri metriikat voidaan ajatella jonkin (mahdollisesti hyvin monimutkaisen) malliperheen parametrisoituina malleina. Se, halutaanko puhua eri metriikoista ja mallien soveltamisessa käytettävissä laskentamenetelmistä, vai parametrisista malleista, näyttää olevan pitkälti makuasia.

Bayesiläisiin parametrisiin malleihin perustuvilla lähestymistavoilla on se etu, että menetelmä pakottaa määrittelemään täsmällisesti kaikki oletukset, joiden varassa rakennettavan järjestelmän toiminta on. Ilman tällaista lähestymistapaa päädytään ad hoc-tyyppisiin menetelmiin, joiden toimivuudesta ei ole teoreettisia takeita. Voidaan esimerkiksi kysyä mihin perustuu useimmissa CBR-menetelmissä implisiittisesti tehtävä oletus, jonka mukaan euklidisen etäisyysmitan mielessä toisiaan muistuttavien tapausten ratkaisemisessa voidaan soveltaa samoja menetelmiä? Tämä oletus saattaa tietenkin pitää paikkansa ongelmasta, ja sen tapausten koodaamisessa käytetystä menetelmästä riippuen, mutta menetelmien käyttäminen ilman tehtyjen implisiittisten oletusten tiedostamista saattaa johtaa vakaviin virhepäätelmiin.

Ei-parametristen lähestymistapojen ero parametriseen mallintamiseen näyttää olevan siis lähinnä siinä, että ei-parametrisissa malleissa parametrien lukumäärä ei ole kiinteä, vaan se riippuu käytettävissä olevan opetusjoukon koosta. Kuten edellä kuitenkin näimme, baysiläisessä mallintamisessa on mallistruktuurin valinta kiinteä osa oppimisprosessia, ja valittava mallistruktuuri (ja sitä kautta malliparametrien lukumäärä) riippuu käytettävästä opetusjoukosta[2]! Parametristen ja erilaisten ei-parametristen lähestymistapojen ero ei siis näytä olevan periaattellinen, vaan lähinnä terminologinen. Itse asiassa

[2]Tästä syystä tähän periaatteeseen perustuvia malleja kutsutaan joskus *semiparametrisiksi (semi-parametric)* malleiksi.

sekä esimerkkeihin perustuva päättely että ydinestimaatorit (ja muut vastaavat mallit) voidaan ajatella erikoistapauksena *äärellisistä sekajakaumista (finite mixture models)* [35, 136], joita käsitellään enemmän luvussa 3.4. Äärellisten sekajakaumamallien ja esimerkkeihin perustuvan päättelyn samankaltaisuus osoitetaan lähteissä [135, 134, 95]. Yleisempää todennäköisyyslaskentaan perustuvaa formalismia esimerkkeihin perustuvalle päättelylle on ehdotettu lähteessä [69]. On huomattava, että ehdotetut bayesiläiset formalismit eivät välttämättä noudata esimerkkeihin perustuvan päättelyn normaalia kaksivaiheista päättelyprosessia, vaan päättely voi tapahtua suoraan ilman esimerkkien yhteensopivuusasteen laskemista. Bayesiläinen menetelmä tapausten yhteensopivuusasteen laskemiseksi esitetään lähteessä [70].

2.4 Informaatioteoreettiset lähestymistavat: MDL ja MML

2.4.1 MDL-periaate ja stokastinen kompleksisuus

Mallistruktuurin valinnassa voidaan käyttää myös informaatioteoreettista lähestymistapaa, joka on hyvin läheisessä suhteessa bayesiläiseen mallintamiseen. Rissasen *Minimum Description Length (MDL)*-periaatteen [110] mukaan mallistruktuureista valitaan se, jonka avulla opetusjoukko $\mathcal{D}$ voidaan koodata siten että syntyvä koodi on mahdollisimman lyhyt. Rissanen kutsuu lyhintä tällaista koodinpituutta opetusjoukon $\mathcal{D}$ *stokastiseksi kompleksisuudeksi (stochastic complexity)*, annettuna mallistruktuuri M. Tällä koodausteoreettiselle lähestymistavalle voidaan antaa intuitiivisesti selkeä tulkinta: lyhimmän koodin tuottava mallistruktuuri on ongelmakentän paras kuvaus siksi että lyhyen koodin aikaansaamiseksi on mallistruktuuriin koodattava kaikki mahdolliset aineistossa $\mathcal{D}$ esiintyvät säännönmukaisuudet.

Kuinka stokastinen kompleksisuus sitten määritellään? Ensiksikin on korostettava, että on mahdotonta konstruoida määritelmää joka tuottaisi lyhimmän koodin kaikille mahdollisille opetusjoukoille $\mathcal{D}$: koodausteorista tiedämme että jos $L(\mathcal{D} \mid M)$ kuvaa opetusjoukkoa $\mathcal{D}$ vastaavan koodin pituutta mallistruktuurin M tapauksessa, määrittelee

$$P(\mathcal{D} \mid M) = 2^{-\log L(\mathcal{D} \mid M)}$$

todennäköisyysjakauman yli kaikkien mahdollisten joukkojen $\mathcal{D}$. Koska

$$\sum_{\mathcal{D}} P(\mathcal{D}|M) = 1,$$

ei ole mahdollista että olisi todennäköisyysjakauma P^* jolle pätisi: $P^*(\mathcal{D}|M) > P(\mathcal{D}|M)\ \forall P, \mathcal{D}$. Siispä ei myöskään voi olla sellaista koodia L, joka tuottaisi lyhimmän mahdollisen kuvauksen kaikille joukoille $\mathcal{D}$. Stokastinen kompleksisuus täytyykin määritellä siten että se tuottaa lyhyimmän kuvauksen 'tyypillisimmille' joukoille $\mathcal{D}$. Se kuinka 'tyypillisyys' määritellään, ratkaisee viime kädessä eri stokastisten määritelmien hyvyyden.

Varhaisessa tuotannossaan [109] Rissanen määritteli stokastisen kompleksisuuden seuraavasti:

$$L(\mathcal{D} \mid M) = -\log P(\mathcal{D} \mid M, \tilde{\theta}) + \frac{d(M)}{2} \log N, \tag{2.1}$$

missä $(M, \tilde{\theta})$ on malliluokan M *suurimman uskottavuuden (maximum likelihood)*-malli, ts. malli, joka maksimoi uskottavuustermin $P(\mathcal{D} \mid M, \theta)$, $d(M)$ on mallin parametrien lukumäärä, ja N opetusjoukon $\mathcal{D}$ koko. Näemme että tämä informaatioteoreettinen stokastisen kompleksisuuden määritelmä antaa saman tuloksen kuin luvussa 1.2.2 esitetty kokonaisuskottavuuden BIC-approksimaatio.

Myöhemmin(katso esim. [110]) Rissanen osoitti, että määritelmä

$$L(\mathcal{D} \mid M) = -\log P(\mathcal{D} \mid M) = -\log \int P(\mathcal{D} \mid M, \theta) P(\theta \mid M) d\theta \tag{2.2}$$

tuottaa koodeja, joiden voidaan osoittaa olevan monessa suhteessa parempia kuin määritelmän (2.1) tuottamat koodit. Määritelmästä (1.1) näemme että tämä kriteeri vastaa bayesiläistä lähestymistapaa, jossa mallistruktuurien prioriksi on oletettu tasainen jakauma, ts. $P(M_1) = P(M_2) = \ldots = P(M_K)$, ja mallistruktuurin valintakriteerinä käytetään siis yksinomaan kokonaisuskottavuutta $P(\mathcal{D} \mid M)$. Äskettäin [111] Rissanen esitteli uuden, tietyssä mielessä vielä tehokkaamman koodin, jossa stokastinen kompleksisuus määritellään seuraavasti:

$$L(\mathcal{D} \mid M) = -\log \frac{P(\mathcal{D} \mid \tilde{\theta}(\mathcal{D}), M)}{\sum_{\mathcal{D}'} P(\mathcal{D}' \mid \tilde{\theta}(\mathcal{D}'), M)}, \tag{2.3}$$

missä $\tilde{\theta}(\mathcal{D})$ on opetusjoukkoa $\mathcal{D}$ vastaava suurimman uskottavuuden malli, ja summa nimittäjässä käy yli kaikkien mahdollisten opetusjoukkojen. Voidaan osoittaa että tämä uusi stokastisen kompleksisuuden määritelmä antaa asymptoottisesti saman tuloksen kuin määritelmä (2.2), jos käytämme integraalissa (2.2) parametrien priorijakaumana ns. Jeffreyn prioria. Tätä kysymystä käsitellään tarkemmin lähteissä [75, 76].

2.4.2 MML-periaate

Wallacen kehittämä *MML (minimum message length)*-periaate on läheistä sukua Rissasen MDL-periaatteelle, mutta MML-lähestymistavassa keskitytään malliparametrien valitsemisen ongelmaan, kun taas MDL-periaatetta sovelletaan yleensä mallistruktuurin valintaongelmaan. MML-lähestymistavassa hylätään edellä esitetty mallien kaksivaiheinen oppiminen, ja sulautetaan kaikki malliluokat M yhdeksi suureksi kaikkien mallien muodostamaksi malliperheeksi. Koska malliluokan käsitettä ei tässä lähestymistavassa käytetä, malliperhe muodostuu erikokoisista malleista eli eripituisista parametrivektoreista θ.

MML-periaatteen mukaan *paras malli $\bar{\theta}$ on se joka tuottaa lyhimmän koodin kun koodataan käytetty malli $\bar{\theta}$, ja opetusaineisto $\mathcal{D}$ käyttäen mallia $\bar{\theta}$*:

$$\bar{\theta} = \arg\min_{\theta} L(\theta) + L(\mathcal{D} \mid \theta).$$

Jos mallien parametrit oletetaan reaaliluvuiksi, ei koodia kuitenkaan voida konstruoida, koska puhtaiden reaalilukujen esittäminen edellyttää kykyä esittää lukuja äärettömän tarkasti, mikä taas vaatii äärettömän pitkiä koodeja. Siksi MML-lähestymistavassa oletetaan että mallien parametrit pystytään esittämään vain äärellisellä tarkkuudella (mikä tietysti on realistinen oletus käytännön sovelluksia ajatellen), ja mallit θ diskretisoidaan äärellisen koodin saamiseksi. Diskretisointi on tehtävä niin, että syntyvän koodin pituus on mahdollisimman lyhyt.

Baysiläisessä oppimisessa toisaalta yksittäisen mallin θ soveltuvuus mitattiin sen posterioritodennäköisyydellä

$$P(\theta \mid \mathcal{D}) = \frac{P(\mathcal{D} \mid \theta)P(\theta)}{P(\mathcal{D})}. \tag{2.4}$$

Jos unohdamme nimittäjässä olevan vakion $P(\mathcal{D})$, saamme

$$-\log P(\theta \mid \mathcal{D}) \propto -\log P(\mathcal{D} \mid \theta) - \log P(\theta).$$

Kun merkitsemme $L(\theta) = -\log P(\theta)$ ja $L(\mathcal{D} \mid \theta) = -\log P(\mathcal{D} \mid \theta)$, näemme että MML-periaate on bayesiläinen siinä mielessä että se valitsee mallin joka maksimoi posterioritodennäköisyyden (2.4), kun mallit on diskretisoitu optimaalisella tavalla. MML-periaatteesta löytyy lisämateriaalia lähteistä [99, 98, 6], ja Monash-yliopiston tutkimusryhmän ylläpitämältä WWW-sivulta[3].

[3]URL: http://www.cs.monash.edu.au/~lloyd/tildeMML/'

Luku 3

Bayes-verkot

Mitä ovat Bayes-verkot? Kausaalinen mallintaminen Bayes-verkoilla. Päättely epätäydellisillä tiedoilla Bayes-verkkoja käyttäen. Bayes-verkkojen muodostaminen automaattisesti: verkon rakenteen oppiminen ja parametrien oppiminen. Bayes-verkkojen muunnelmia: päätösverkot, jatkuva-arvoiset Bayes-verkot, Naiivi Bayes-malli, kvalitatiiviset Bayes-verkot.

Kuten kuvasta 1.1 näemme, ensimmäinen askel bayesiläisessä mallinnusprosessissa on malliperheen valinta. Vaikka bayesiläistä mallinnusta voi periaatteessa soveltaa myös ei-probabilistisiin malliperheisiin, kuten esimerkiksi neuroverkkoihin (ks. [88, 96, 12, 14, 113]), saavutetaan bayesiläisen lähestymistavan edut helpoimmin käyttäen probabilistisia malleja. *Bayes-verkot* (Bayesian networks, Bayesian belief networks) muodostavat tällaisen malliperheen, joka on saavuttanut viime aikoina suurta huomiota. Pääsyy Bayes-verkkoihin kohdistuvassa kiinnostuksessa johtuu 80-luvulla kehitetystä teoreettisesta kehikosta, jonka avulla probabilististen mallien luomiseen tarvittavien parametrien määrää voidaan huomattavasti pienentää. Luvussa 3.1 selvitetään lyhyesti Bayes-verkkojen pääperiatteet, puuttumatta tässä yhteydessä tarkemmin teknisiin yksityiskohtiin, jotka selviävät esimerkiksi lähteistä [105, 97, 60, 18]. Luvussa 3.2 näemme kuinka luvussa 1.3 esitettyjä probabilistisen päättelyn eri muotoja on mahdollista toteuttaa Bayes-verkkomallien avulla. Bayes-verkkojen konstruoimista käsitellään luvussa 3.3.

3.1 Bayes-verkkomalliperhe

Esitämme seuraavassa Bayes-verkkomalliperheen perusominaisuudet yksinkertaistettujen esimerkkien avulla. Tässä yhteydessä on korostettava, että vaikka käytetyissä esimerkeissä esiintyy yleensä vain binäärisiä diskreettejä muuttujia, voidaan lähestymistavassa käyttää myös sekä moniarvoisia diskreettejä muuttujia että jatkuvia muuttujia. Tähän kysymykseen palaamme luvussa 3.4.

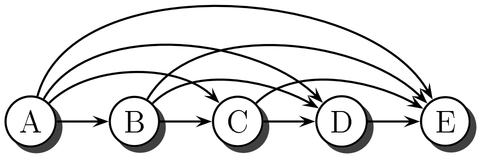
Oletetaan seuraavassa esimerkissä että ongelmakentän kuvauksessa käytetään viittä binääristä attribuuttia (satunnaismuuttujaa) A, B, C, D, E, ja käytetään binäärimuuttujien mahdollisista arvoista merkintöjä 0 ja 1. Tässä matemaattisessa mallissa maailman kaikki mahdolliset tilat koostuvat muuttujien A, B, C, D, E arvojen muodostamista binäärivektoreista, joita on tässä yksinkertaisessa viiden binäärimuuttujan tapauksessa kaikkiaan $2^5 = 32$ kappaletta. Bayesiläisessä mallinnuksessa on päämääränä muodostaa matemaattinen malli, jonka avulla voidaan määrätä todennäköisyys mille tahansa mahdolliselle maailman tilalle (5-komponenttiselle binäärivektorille). Tällaista *yhteistodennäköisyysjakaumaa* hyväksikäyttäen voidaan suorittaa luvussa 1.3 esitettyjä probabilistisen päättelyn eri muotoja, kuten luvussa 3.2 tulemme näkemään.

Bayesiläisen mallintamisen päämääränä oleva yhteistodennäköisyysjakauma voidaan luonnollisesti määrätä luettelemalla kaikki mahdolliset tilat ja niitä vastaavat todennäköisyydet, mutta koska tilojen lukumäärä on eksponentiaalinen suhteessa muuttujien lukumäärään, ei tämä lähestymistapa ole käytännössä esiintyvissä tilanteissa mahdollinen. Toisaalta todennäköisyyslaskennan perusaksioomia käyttäen on helppo osoittaa että

$$P(A, B, C, D, E) = \\ P(A)P(B|A)P(C|A, B)P(D|A, B, C)P(E|A, B, C, D). \quad (3.1)$$

Muuttujien A, B, C, D, E yhteistodennäköisyysjakauman määräämiseksi siis riittää, että tunnemme yhtälössä (3.1) oikealla puolella esiintyvät ehdolliset todennäköisyydet. Tässä yhteydessä on huomattava, että se mitä ehdollisia todennäköisyyksiä tarvitaan riippuu käytetystä muuttujien järjestyksestä. Jos yhtälöä (3.1) sovelletaan esimerkiksi muuttujien järjestykseen (E, D, C, B, A), saadaan yhtälön oikealle puolelle ehdolliset todennäköisyydet $P(E)$, $P(D \mid E)$, $P(C \mid E, D)$, $P(B \mid E, D, C)$, ja $P(A \mid E, D, C, B)$. Käytettyä permutaatiota (ja siis sitä vastaavaa ehdollisten todennäköisyyksien joukkoa) voidaan havainnollistaa graafisesti: kuvassa 3.1 on esitetty syklitön suunnattu verkko, jossa muuttujasta Y on muuttujaan X kaari ainoastaan silloin kun jokin hajotelmassa (3.1) käytettävistä ehdollisista todennäköisyyksistä on muotoa $P(X \mid *, Y, *)$.

Kuvassa 3.1 esitetty suunnattu verkko määrää siis minkä tyyppisiä ehdollisia todennäköisyyksiä on käytettävä, jos halutaan määrätä muuttujien yhteisjakauma $P(A, B, C, D, E)$ käyttäen ketjusääntöä (3.1). Kiinnittämäl-



Kuva 3.1: Hajotelman (3.1) esitys suunnattuna verkkona.

lä verkkoesitystä vastaavien ehdollisten todennäköisyyksien arvot on yhteisjakauma yksikäsitteisesti määrätty. Toisaalta, kuten luvussa 1.2 esitettiin, bayesiläisessä mallintamisessa malli määritellään parina (M, θ), missä M eli mallin struktuuri määrää mitä parametreja mallin identifioimiseksi on määrättävä, ja θ on joukko parametriarvoja jotka kiinnittävät yhden mallin. Kuvassa 3.1 esitettyä graafista verkkoesitystä voidaan siis ajatella mallin struktuurina, ja graafia vastaavia ehdollisia todennäköisyyksiä voidaan pitää mallin parametreina.

Ottaen huomioon että $P(X = 1 \mid *) = 1 - P(X = 0 \mid *)$ voimma laskea että käyttäen kuvassa 3.1 esitettyä mallistruktuuria tarvitsemme $1 + 2 + 4 + 8 + 16 = 31$ parametria (ehdollisen todennäköisyyden arvoa) yhteistodennäköisyysjakauman määräämiseksi. Koko avaruuden tilojen lukumäärään (32) nähden emme ole siis säästäneet paljoa. Keskeinen tekijä Bayes-verkkoteoriassa onkin ehdollisen riippumattomuuden käsite, jota käyttäen tarvittaen parametrien määrää voidaan radikaalisti pienentää:

Määritelmä 1 (Ehdollinen riippumattomuus)
Olkoot $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$, *ja* $\mathbf{Z}$ *erillisiä muuttujajoukkoja. Joukon* $\mathbf{X}$ *sanotaan olevan* ehdollisesti riippumaton *muuttujajoukosta* $\mathbf{Y}$, *annettuna joukko* $\mathbf{Z}$, *jos*

$$P(\mathbf{X} \mid \mathbf{Y}, \mathbf{Z}) = P(\mathbf{X} \mid \mathbf{Z}).$$

Selventääksemme ehdollisen riippumattomuuden käsitettä olettakaamme esimerksi että ongelmakentäämme liittyy lääketieteelliseen diagnosointiin, ja esimerkkimuuttujillamme A, B, C, D, E on taulukossa 3.1 esitetyt semanttiset tulkinnat[1].

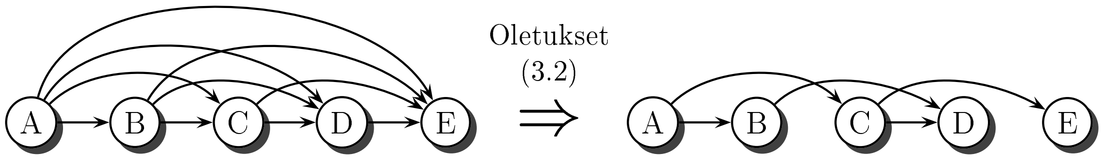
Ongelmakentän hyvin tunteva asiantuntija saattaisi kertoa muuttujien suhteesta esimerkiksi seuraavaa:

> Vakavien päänsärkykohtausten todennäköisyys $(P(E = 1))$ riippuu ainoastaan siitä, onko henkilöllä aivokasvain vain ei (C). Toisaalta jos tiedetään henkilön veren kalsiumpitoisuus (B) ja se, onko henkilöllä kasvain vai ei (C), voidaan määrätä tajuttomuuskohtauksien todennäköisyys $(P(D = 1))$, joka ei tällöin riipu

[1] Esimerkki on teoksesta [105, sivu 196].

Merkintä	*Tulkinta*
$A = 1$:	Tutkittavalla henkilöllä on aivosyöpä.
$B = 1$:	Tutkittavan henkilön veren kalsiumpitoisuus on noussut epänormaalille tasolle.
$C = 1$:	Tutkittavalla henkilöllä on aivokasvain.
$D = 1$:	Tutkittava henkilö saa tajuttomuuskohtauksia.
$E = 1$:	Tutkittava henkilö kärsii vakavista pääkivuista.

Taulukko 3.1: Lääketieteellisessä esimerkissä käytetyt merkinnät.



Kuva 3.2: Ehdollisen riippumattomuuden vaikutus verkkoesitykseen.

> päänsäryn esiintymisestä (E), tai (suoraan) siitä, onko henkilöllä aivosyöpä (A) vai ei. Aivokasvaimen (C) esiintymisen todennäköisyys riippuu vastaavasti suoraan ainoastaan siitä, onko henkilöllä aivosyöpä (A), ei muista tekijöistä.

Yllä mainitut tiedot voidaan toisaalta myös päätellä tilastollisesta aineistosta ilman asiantuntijan apua, mikäli saatavilla on riittävä määrä esimerkkitapauksia. Ehdollisen riippumattomuuden käsitettä soveltaen saatu tieto voidaan nyt koodata seuraavasti:

$$\begin{aligned} P(E \mid A, B, C, D) &= P(E \mid C) \\ P(D \mid A, B, C) &= P(D \mid B, C) \\ P(C \mid A, B) &= P(C \mid A) \end{aligned} \tag{3.2}$$

Kun otamme nämä ehdolliset riippumattomuudet huomioon, kuvassa 3.1 esitetty verkko muuttuu kuvassa 3.2 esitettyyn muotoon. Kun edelleen piirrämme verkon hieman eri tavalla, ja merkitsemme kuvaan selvyyden vuoksi kutakin solmua vastaavan muuttujan semanttisen tulkinnan, saamme kuvassa 3.3 esitetyn Bayes-verkkostruktuurin.

Bayes-verkot määritellään formaalisti seuraavasti:

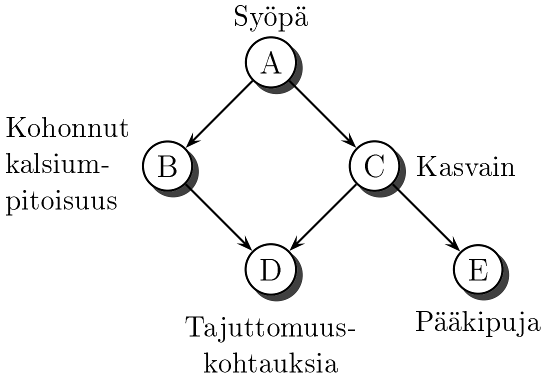
Määritelmä 2 (Bayes-verkkomalli)
Bayes-verkkomalli on pari (M, θ), missä M on syklitön suunnattu verkko, jonka solmut vastaavat ongelmakentän muuttujia, ja jonka topologia täyttää

seuraavan ehdon: kukin muuttuja on ehdollisesti riippumaton kaikista muuttujista, jotka eivät ole muuttujan jälkeläisiä verkossa, annettuna muuttujan edeltäjät, ja muuttujan edeltäjien muodostama joukko on suppein muuttujajoukko joka täyttää tämän ehdon. Parametrijoukon θ muodostavat ehdolliset todennäköisyydet muotoa $P(X \mid F(X))$, missä $F(X)$ on muuttujan X edeltäjien joukko verkossa M.

Tässä yhteydessä on korostettava, että vaikka sekä neuroverkko että Bayes-verkko ovat molemmat verkkoesityksiä, esitysten abstraktiotasossa on huomattava ero. Neuroverkothan ovat lähinnä *funktionaalisen* tason kuvauksia siinä mielessä että neuroverkkoalgoritmien voidaan ajatella toimivan neuroverkkostruktuurin kaltaisessa arkkitehtuurissa, jossa verkon solmut ovat yksinkertaisia laskentayksiköitä jotka lähettävät toisilleen yksittäisistä reaaliluvuista muodostuvia sanomia. Bayes-verkko puolestaan on *käsitteellisen (symbolisen)* tason esitys: Bayes-verkon solmut vastaavat ongelmakentän kuvaamiseen käytettyjä attribuutteja, ja kaaret kuvaavat attribuuttien välisiä riippuvuuksia. Bayes-verkon rakenne ei siis välttämättä suoraan kuvaa Bayes-verkkoalgoritmien toimintaa samalla tavoin kuin neuroverkon rakenne kuvaa neuroverkkoalgoritmien toimintaa (tähän kysymykseen palaamme luvussa 3.2). Erityisesti on huomattava että toisin kuin neuroverkoissa, joissa kuhunkin kaareen liittyy yksi parametri (kaaren paino), Bayes-verkoissa parametrit eivät liity suoranaisesti verkon kaariin, vaan kutakin verkon *solmua* kohden tarvitaan joukko parametreja, joiden lukumäärä on eksponentiaalinen solmun edeltäjien lukumäärän suhteen. Tarvittavien parametrien lukumäärän pienentämiseksi voidaan tätä parametrijoukkoa yrittää approksimoida lineaarisella määrällä parittaisia, muotoa $P(X = x \mid Y = y)$ parametreja, joiden voidaan ajatella liittyvän verkon kaariin: yhtä tällaista approksimaatioita (ns. Noisy-Or-mallia) käsitellään tarkemmin luvussa 3.4.

Kuvassa 3.3 on annettu esimerkki Bayes-verkkomallista kiinnittämällä verkon parametrit lähteessä [105, sivu 197] annettuihin arvoihin (on muistettava että kyseessä on yksinkertaistettu, rajoitettu esimerkki, joten annettuihin parametriarvoihin ei pidä suhtautua lääketieteelliseltä kannalta liian vakavasti). Kaikkien mahdollisten Bayes-verkkomallien (kaikki mahdolliset Bayes-verkkostruktuurit + kaikki mahdolliset struktuuria vastaavien parametrien asetukset) muodostamaa joukkoa kutsutaan seuraavassa *Bayes-verkkomalliperheeksi*. Bayes-verkkojen oppimisella tarkoitetaan yhden Bayes-verkkomallin etsimistä tästä joukosta. Luvussa 3.3 paneudumme tähän kysymykseen tarkemmin.

Bayes-verkkojen määritelmästä ja ehdollisen riippumattomuuden käsitteestä seuraa tärkeä Bayes-verkkomallien avulla koodattujen todennäköisyysjakaumien ominaisuus: jos ongelmakentän kuvauksessa käytetyt muuttujat



$P(A=1)$	$=$	0.20
$P(B=1 \mid A=1)$	$=$	0.80
$P(B=1 \mid A=0)$	$=$	0.20
$P(C=1 \mid A=1)$	$=$	0.20
$P(C=1 \mid A=0)$	$=$	0.05
$P(D=1 \mid B=1, C=1)$	$=$	0.80
$P(D=1 \mid B=0, C=1)$	$=$	0.80
$P(D=1 \mid B=1, C=0)$	$=$	0.80
$P(D=1 \mid B=0, C=0)$	$=$	0.05
$P(E=1 \mid C=1)$	$=$	0.80
$P(E=1 \mid C=0)$	$=$	0.60

Kuva 3.3: Esimerkki Bayes-verkkomallista.

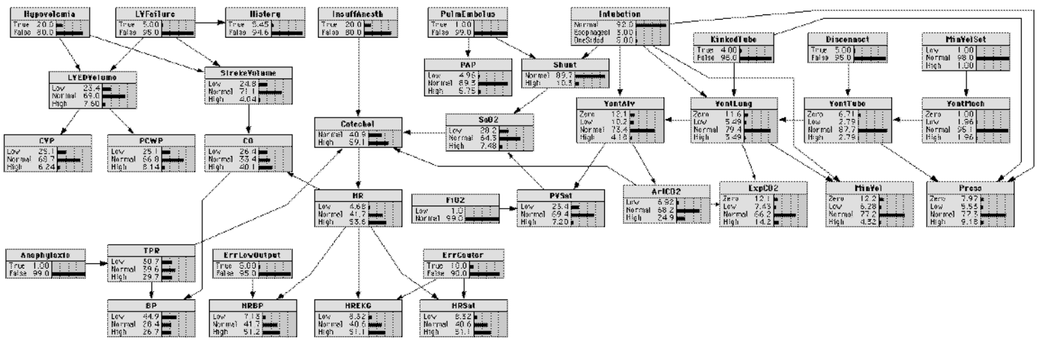
ovat $X_1, \ldots, X_n$, niin minkä tahansa muuttujien arvokombinaation yhteistodennäköisyys saadaan laskettua kaavalla

$$P(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n) = \prod_{i=1}^{n} P(X_i = x_i \mid F(X_i) = f(X_i)), \qquad (3.3)$$

missä kuten edellä, $F(X_i)$ on muuttujan X_i edeltäjät käytetyssä Bayes-verkossa, ja $f(X_i)$ joukkoa $F(X_i)$ vastaava arvovektori. Näemme, että Bayes-verkkomalli (M, θ) on probabilistinen sillä annetun verkkostruktuurin parametrit kiinnittävät yhteistodennäköisyysjakauman muuttujille $X_1, \ldots, X_n$. Luvussa 3.2 esitamme kuinka hajotelmaa (3.3) voidaan käyttää hyväksi toteutettaessa luvussa 1.3 esitettyjä probabilistisen päättelyn muotoja.

Kuvassa 3.3 esitetyssä Bayes-verkkomallissa on tarvittavien parametrien lukumäärä 11, mikä on edelleen yli 30% koko avaruuden koosta. On kuitenkin huomattava, että tarvittavat parametrit, kuten esimerkiksi $P(B|A)$, ovat muodoltaan sangen yksinkertaisia, ja siten myös helposti asiantuntijoiden määrättävissä, toisin kuin käsitteellisesti hankalat yhteistodennäköisyydet $P(A, B, C, D, E)$. Lisäksi on korostettava että tarvittavien parametrien suhde avaruuden kokoon pienenee dramaattisesti muuttujien lukumäärän kasvaessa: kuvassa 3.4 on sairaalapotilaiden monitoroinnissa käytetty 37-solmuinen ALARM-verkkona tunnettu Bayes-verkkostruktuuri (katso [8]), jossa tarvittavien parametrien (ei näytetty kuvassa) lukumäärä on 509, ainoastaan $2,94 \times 10^{-12}\%$ koko avaruuden koosta ($2^{13} \times 3^{17} \times 4^7 = 1,73 \times 10^{16}$). Kuvassa esitetyt todennäköisyydet ovat eri muuttujien arvojen prioritodennäköisyyksiä, jotka saadaan laskettua ALARM-verkon parametreista. Kuva on tuotettu Norsys-yhtiön Netica-ohjelmistolla, joka on Bayes-verkkojen konstruoimiseen ja niiden käyttämiseen tarkoitettu sovelluskehitin (katso luku 4.2).

Käytännön sovellusten kannalta on kuvassa 3.4 esitetty Bayes-verkkokin



Kuva 3.4: Sairaalapotilaiden valvonnassa käytettävä ALARM-verkko.

edelleen melko pieni — Bayes-verkko-ohjelmistoja valmistava HUGIN-yhtiö ilmoittaa teollisessa käytössä olevan yli tuhat solmua sisältäviä Bayes-verkkoja. Tässä yhteydessä on muistettava, että toisin kuin neuroverkoissa, ei Bayes-verkoissa solmujen lukumäärä ole vapaa parametri, vaan se määräytyy ongelmakentän kuvaamisessa käytettävien attribuuttien lukumäärästä: jo sadallakin solmulla (attribuutilla) voidaan kuvata sangen monimutkaisia ongelmakenttiä. Toisaalta on korostettava, että vaikka solmujen lukumäärä on kiinnitetty, ei Bayes-verkkojen konstruoiminen ole kuitenkaan välttämättä yksinkertaista, koska mahdollisten verkkotopologioiden lukumäärä kasvaa erittäin nopeasti solmujen lukumäärän suhteen (katso luku 3.3).

3.1.1 Bayes-verkot ja kausaalisuus

Kuvassa 3.3 esitetyssä esimerkissä voidaan Bayes-verkkostruktuurin kaarille antaa selkeä kausaalinen tulkinta: esimerkiksi muuttujan A, joka on muuttujien B ja C edeltäjä verkossa, voidaan ajatella olevan muuttujien B ja C kausaalinen *syy*. Mielenkiintoinen kysymys onkin kuinka Bayes-verkkostruktuurin kaaret suhtautuvat kausaalisen syy-seuraussuhteen käsitteeseen — onko kaikkien Bayes-verkkojen kaarilla sama kausaalinen tulkinta?

Yleisesti ottaen vastaus tähän kysymykseen on kielteinen: Bayes-verkon kaarien ei välttämättä tarvitse kuvastaa kausaalisia syy-seuraussuhteita. Tätä seikkaa havainnollistaa seuraava yksinkertainen esimerkki: olkoon ongelmakentän kuvauksessa käytettävät muuttujat A ja B, joilla on seuraavat semanttiset tulkinnat:

A: Tutkittavalla henkilöllä on flunssa (A=1) tai ei (A=0).

B: Tutkittavan henkilön nenä vuotaa (B=1) tai ei (B=0).

Vaihtoehtoisia Bayes-verkkostruktuureja on kaksi: $A \to B$ ja $A \leftarrow B$. Tarkastellaan ensiksi ensimmäistä vaihtoehtoa, ja oletetaan että verkkostruktuuria vastaavat parametrit ovat

$$\begin{aligned} P(B=1 \mid A=1) &= 0.8, \\ P(B=1 \mid A=0) &= 0.01, \text{ ja} \\ P(A=1) &= 0.001. \end{aligned}$$

Nämä määrittelevät seuraavan yhteisjakauman:

$$\begin{aligned} &P(A=0,B=0) = P(A=0)P(B=0|A=0) = 999/1000 * 99/100 = 0.98901, \\ &P(A=0,B=1) = P(A=0)P(B=1|A=0) = 999/1000 * 1/100 = 0.00999, \\ &P(A=1,B=0) = P(A=1)P(B=0|A=1) = 1/1000 * 2/10 = 0.0002, \text{ja} \\ &P(A=1,B=1) = P(A=1)P(B=1|A=1) = 1/1000 * 8/10 = 0.0008. \end{aligned}$$

Toisaalta, jos otamme verkkostruktuurivaihtoehdon $A \leftarrow B$, ja asetamme struktuuria vastaavat parametrit seuraavasti:

$$\begin{aligned} P(B=1) &= 0.98921, \\ P(A=1 \mid B=1) &= 0.074143, \\ P(A=1 \mid B=0) &= 0.000202, \end{aligned}$$

voidaan yksinkertaisella laskutoimituksella osoittaa että syntyvä yhteistodennäköisyysjakauma on täsmälleen sama kuin ensimmäisessä tapauksessa. Esitettyjen verkkostruktuurien sanotaan olevan *ekvivalentteja*, mikä tarkoittaa sitä että niillä voidaan esittää täsmälleen sama joukko todennäköisyysjakaumia.

Kumpi kahdesta ekvivalentista verkkostruktuurista on sitten “oikea”, kumpaa tulisi käyttää käytännön sovelluksissa? Puhtaasti pragmaattiselta kannalta katsottuna tällä kysymyksella ei ole merkitystä: koska syntyvät mallit esittävät täsmälleen samoja todennäköisyysjakaumia, ne käyttäytyvät täsmälleen samalla tavalla. Bayes-verkkojen soveltamisen kannalta on siis tässä mielessä yhdentekevää, käytetäänkö esimerkissämme verkkostruktuuria $A \to B$, joka vastannee useimpien käsitystä muuttujien kausaalisesta syy-seuraus-riippuvuussuhteesta, vai verkkostruktuuria $A \leftarrow B$. Bayes-verkkojen kaaret eivät siis välttämättä vastaa kausaalisia syy-seuraussuhteita.

Toisaalta on kuitenkin todettava, että vaikka kaarien kausaalisella tulkinnalla ei ole merkitystä Bayes-verkkojen soveltamisen kannalta, saattaa kausaalisuuden käsitteellä olla suuri käytännön merkitys Bayes-verkkojen rakentamisprosessissa: on helppo nähdä että muotoa $P(\text{seuraus} \mid \text{syy})$ olevien todennäköisyyksien arviointi on huomattavasti helpompaa kuin muotoa $P(\text{syy} \mid \text{seuraus})$ olevien todennäköisyyksien. Esimerkkitapauksessamme on varmaankin huomattavasti helpompi arvioida mikä on nenän valumisen todennäköisyys, annettuna että henkilöllä on flunssa, kuin arvioida todennäköisyyttä sille että henkilöllä on flunssa, annettuna että hänen nenänsä valuu. Samoin flunssan esiintymisen prioritodennäköisyyden arvioiminen on helpompaa kuin nenän valumisen prioritodennäköisyyden valuminen, koska jälkimmäisessä tapauksessa on arvioitava kaikki mahdolliset tilanteet joissa nenän valumista voi esiintyä. Jos malli siis konstruoidaan asiantuntijatietämystä käyttäen, on käytännössä järkevää pyrkiä rakentamaan verkko siten että solmujen väliset kaaret vastaavat muuttujien kausaalisia riippuvuussuhteita.

Vaikka kysymyksellä Bayes-verkkojen kaarien kausaalisesta tulkinnasta ei ole käytännön merkitystä jos malleja sovelletaan probabilistiseen päättelyyn, on kysymys sitäkin tärkeämpi ongelmakentän ominaisuuksien tilastollisen analyysin (data mining) kannalta. Bayes-verkkoja, joissa kaikki verkon kaaret kuvaavat kausaalisia riippuvuussuhteita, kutsutaan *kausaaliverkoiksi (causal networks)*. Bayes-verkkotutkimus onkin avannut täysin uusia lähtökohtia kausaalisuuden tutkimukselle sinänsä (katso esim. [106, 130, 47, 52]).

3.2 Päättely Bayes-verkoissa

Kuten luvussa 1.3 näimme, on probabilistisessa päättelyssä tavoitteena estimoida muotoa $P(\mathbf{S}_1 \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ olevia todennäköisyyksiä joko niin, että tuloksena on yhteisjakauma joukon $\mathbf{S}_1$ muodostaville muuttujille, tai niin että tuloksena saadaan n todennäköisintä arvokombinaatiota $\mathbf{s}_1$. Esittelemme seuraavassa kuinka tämä toteutetaan Bayes-verkkojen tapauksessa. Yksinkertaisuuden vuoksi rajoitumme aluksi esimerkissä 9 kuvattuun tapaukseen, jossa joukon $\mathbf{S}_1$ koko on yksi, eli tarkastelemme muotoa $P(X = x \mid \mathbf{S}_2 = \mathbf{s}_2, M, \theta)$ olevia todennäköisyyksiä. Yleistys monimutkaisempiin tapauksiin on suoraviivainen.

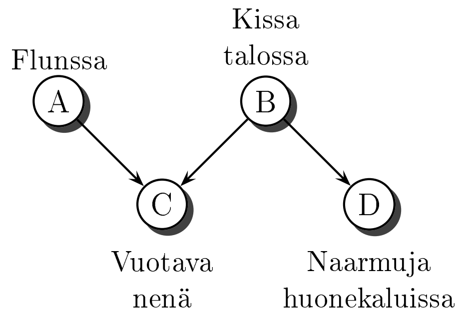
Esimerkissä 9 kuvattua ongelmakenttää voidaan mallintaa kuvassa 3.5 esitetyllä Bayes-verkolla, kun formalisoimme esimerkin kuvauksessa annetut oletukset seuraavasti: nenän vuotamiseen (muuttuja C) vaikuttavat muuttujat ovat A (onko flunssa vai ei) ja B (onko talossa kissa vai ei). Huonekaluista löytyvien raapimisjälkiin (muuttuja D) vaikuttaa se, onko talossa kissa, eivät muut mallissa käytetyt attribuutit.

Mallimaailmassa on kaikkiaan 16 mahdollista tilaa, joita vastaavat yhteistodennäköisyydet saadaan laskettua esitetyn Bayes-verkkomallin avulla soveltamalla kaavaa (3.3), josta näemme että

$$P(A, B, C, D) = P(A)P(B)P(C \mid A, B)P(D \mid B).$$

Esimerkki 9 Kuvassa 3.5 esitettyyn Bayes-verkkoon liittyvän ongelmakentän kuvaus.

> Olet matkalle vierailulle kun muistat äkkiä että et muistanut ottaa nenäliinoja mukaan vaikka kaupungissa on paha influenssaepidemia (arvioit tartunnan todennäköisyyden suuruudeksi 0.05). Olet myös allerginen kissoille, etkä muista varmasti onko isäntäperheellä kissa vai ei. Arvioit todennäköisyydeksi sille että talossa on kissa 0.05. Olet huolestunut koska sekä flunssa että kissa-allergia saa nenäsi yleensä vuotamaan, jolloin nenäliinoille olisi ollut tarvetta. Kokemuksesta tiedät että jos sinulla on joko flunssa, tai olet kosketuksissa kissojen kanssa, nenäsi alkaa vuotaa todennäköisyydellä 0.95, ja arvelet että jos molemmat pitäisivät yhtäaikaa paikkansa, nenän vuotamisen todennäköisyys nousisi arvoon 0.99. Toisaalta, ilman edellä mainittuja syitä on äärimmäisen epätodennäköistä (todennäköisyysarviosi on 0.001) että nenäsi vuotaisi.
>
> Päätät perille tultuasi ensitöikseksi tarkkailla näkyykö huonekaluissa kissan tekemiä naarmuja, joita kokemuksesi syntyy todennäköisyydellä 0.99, mikäli talossa asuu kissa. On tietysti myös mahdollista että huonekaluista löytyy kissan tekemiä naarmuja, vaikka talossa ei kissaa olisikaan (huonekaluthan voivat olla vaikkapa ostettu käytettyinä), mutta arvioit tämän mahdollisuuden todennäköisyydeksi ainoastaan 0.1.



$P(A = 1) = 0.05$
$P(B = 1) = 0.05$
$P(C = 1 \mid A = 0, B = 0) = 0.001$
$P(C = 1 \mid A = 1, B = 0) = 0.95$
$P(C = 1 \mid A = 0, B = 1) = 0.95$
$P(C = 1 \mid A = 1, B = 1) = 0.99$
$P(D = 1 \mid B = 1) = 0.99$
$P(D = 1 \mid B = 0) = 0.1$

Kuva 3.5: Esimerkin 9 Bayes-verkkokuvaus.

Vastaavat 16 yhteistodennäköisyyttä on esitetty taulukossa 3.2.

Taulukossa 3.2 esitettyjä yhteistodennäköisyyksiä hyväksikäyttäen voidaan laskea (priori)todennäköisyys sille että nenä alkaa vuotaa esimerkissä 9

A	B	C	D	P(A)	P(B)	P(C|A,B)	P(D|B)	P(A,B,C,D)
1	1	1	1	0.05	0.05	0.99	0.99	2.450E-03
1	1	1	0	0.05	0.05	0.99	0.01	2.475E-05
1	1	0	1	0.05	0.05	0.01	0.99	2.475E-05
1	1	0	0	0.05	0.05	0.01	0.01	2.500E-07
1	0	1	1	0.05	0.95	0.95	0.1	4.513E-03
1	0	1	0	0.05	0.95	0.95	0.9	4.061E-02
1	0	0	1	0.05	0.95	0.05	0.1	2.375E-04
1	0	0	0	0.05	0.95	0.05	0.9	2.138E-03
0	1	1	1	0.95	0.05	0.95	0.99	4.467E-02
0	1	1	0	0.95	0.05	0.95	0.01	4.513E-04
0	1	0	1	0.95	0.05	0.05	0.99	2.351E-03
0	1	0	0	0.95	0.05	0.05	0.01	2.375E-05
0	0	1	1	0.95	0.95	0.001	0.1	9.025E-05
0	0	1	0	0.95	0.95	0.001	0.9	8.123E-04
0	0	0	1	0.95	0.95	0.999	0.1	9.016E-02
0	0	0	0	0.95	0.95	0.999	0.9	8.114E-01
								1.000E+00

Taulukko 3.2: Kuvassa 3.5 esitetyn Bayes-verkon määrittelemä yhteistodennäköisyysjakauma.

esitetyssä mallissa:

$$\begin{aligned}
P(C=1) &= \sum_{a\in\{0,1\}} \sum_{b\in\{0,1\}} \sum_{d\in\{0,1\}} P(C=1, A=a, B=b, D=d) \\
&= 2.450\text{E-}03 + 2.475\text{E-}05 + 4.513\text{E-}03 + 4.061\text{E-}02 \\
&\quad +4.467\text{E-}02 + 4.513\text{E-}04 + 9.025\text{E-}05 + 8.123\text{E-}04 = 9.36\%.
\end{aligned}$$

Vastaavasti saamme naarmujen esiintymisen (priori)todennäköisyyden $P(D=1)$ arvoksi 14.45%. Flunssan (priori)todennäköisyys $P(A=1)$, samoin kuin kissan esiintymisen (priori)todennäköisyys $P(B=1)$ on 5%, mitkä nähdään suoraan käytetystä Bayes-verkkomallista.

Sana “priori” viittaa edellä todennäköisyyteen, joka saadaan Bayes-verkkomallista joko suoraan tai yksinkertaisen laskutoimituksen kautta, ilman että tehdyt havainnot vaikuttavat tilanteeseen. Probabilististen mallien käyttökelpoisuus perustuu suoraviivaiseen kalkyyliin, jonka avulla eri satunnaismuuttujien todennäköisyydet muuttuvat dynaamisesti sitä mukaa kun saamme ongelmakentästä uusia havaintoja. Kun havaitset esimerkiksi että nenäsi alkaa vuotaa ($C=1$), voit *päivittää* uskomuksesi siihen että sinulla on flunssa laskemalla flunssan ehdollisen todennäköisyyden *annettuna tehdyt havainnot*:

$$\begin{aligned} P(A=1 \mid C=1) &= \frac{P(A=1, C=1)}{P(C=1)} \\ &= \frac{\sum_{b\in\{0,1\}}\sum_{d\in\{0,1\}} P(A=1, B=b, C=1, D=d)}{P(C=1)} \\ &= \frac{2.450\text{E-}03 + 2.475\text{E-}05 + 4.513\text{E-}03 + 4.061\text{E-}02}{9.36\text{E-}02} \\ &= 50.84\%. \end{aligned}$$

Flunssan todennäköisyys siis yli kymmenkertaistui tehdyn havainnon seurauksena. Vastaavasti saamme todennäköisyydeksi sille että talossa on kissa, annettuna se havainto että nenäsi vuotaa,

$$P(B=1 \mid C=1) = 50.84\%,$$

ja todennäköisyydeksi sille että huonekaluissa on naarmuja

$$P(D=1 \mid C=1) = 55.25\%.$$

Edellä näimme että annettuna havainto, “nenä vuotaa”, saamme sekä flunssan että kissan esiintymisen todennäköisyydeksi 0.5084 ja naarmujen esiintymisen todennäköisyydeksi 0.5525. Jos kysymme nyt mikä on todennäköisin mallimaailman tila, annettuna havainto $C = 1$, intuitiivisesti houkuttelevalta vaihtoehdolta tuntuisi asettaa kukin binäärimuuttuja itsenäisesti siihen arvoon jonka todennäköisyys on suurempi, jolloin vastaus olisi

$$P(A=1, B=1, C=1, D=1) = 2.450\text{E-}03.$$

Taulukosta 3.2 on kuitenkin helppo nähdä että muuttujien konfiguraatioavaruudesta löytyy kolme seikan $C = 1$ kanssa konsistenttia tilaa, joiden todennäköisyys on suurempi:

$$\begin{aligned} P(A=0, B=1, C=1, D=1) &= 4.467\text{E-}02, \\ P(A=1, B=0, C=1, D=0) &= 4.061\text{E-}02, \text{ ja} \\ P(A=1, B=0, C=1, D=1) &= 4.513\text{E-}03. \end{aligned}$$

Kokonaistodennäköisuuden maksimoivan tilan etsiminen on siis aivan eri ongelma kuin kunkin yksittäisen satunnaismuuttujan ehdollisen todennäköisyysjakauman laskeminen.

Kuten edellä esitetystä esimerkistä näimme, mikä tahansa Bayes-verkkoesitystä vastaavan yhteistodennäköisyysjakauman arvo saadaan laskettua

Selitysten poissulkeminen (explaining away)
Annettuna nenän vuotamisesta tehty havainto saamme sekä flunssan että kissan esiintymisen todennäköisyydeksi 50.84%, siis vain hieman yli 0.5. Ensi näkemältä voi tuntua siltä, että tehty havainto ei ole merkittävästi lisännyt tietoamme ongelmakentästä, mutta täytyy muistaa että sekä flunssan että kissan esiintymisen prioritodennäköisyys oli mallissamme hyvin pieni, vain 5%, joten näiden muuttujien todennäköisyys on yli kymmenkertaistunut. Toisaalta näemme että tehty havainto ei tässä vaiheessa auta meitä päättämään, kumpi seikka on nenän valumisen syy, flunssa vai kissa-allergia. Jos havaitsemme edelleen että talon huonekaluissa on kissan tekemiä naarmuja, satunnaismuuttujien posterioritodennäköisyydet päivittyvät jälleen:

$$\begin{aligned} P(B = 1 \mid C = 1, D = 1) &\approx 91\% \\ P(A = 1 \mid C = 1, D = 1) &\approx 13\% \end{aligned}$$

Tässä uudessa tilanteessa voimme olettaa että nenän vuotamisen aiheuttaja on melko varmasti kissa-allergia. Tämä esimerkki havainnollistaa todennäköisyysmalleissa esiintyvää havaintojen selityksiin liittyvää *"poisselittämis" (explaining away)*-ilmiötä: yhden vaihtoehtoisen selityksen todennäköisyyden kasvaminen vähentää automaattisesti vaihtoehtoisten selitysten uskottavuutta, vaikka selitykset eivät sinänsä olisikaan poissulkevia. Tämän intuitiivisesti luontevalta tuntuvan periaatteen on havaittu esiintyvän myös inhimillisessä päättelyssä [55, 104, 87].

kertomalla asiaankuuluvat Bayes-verkon parametrit keskenään. Näin ollen probabilistisen päättelyn suorittamiseksi ei tarvitse tallettaa taulukon 3.2 kaltaista todennäköisyystaulukkoa, vaan riittää tallettaa Bayes-verkon parametrit, joita on yleensä pieni määrä koko malliavaruuden kokoon verrattuna, kuten edellisessä luvussa näimme. Toisalta probabilistisessa päättelyssä käytettävien ehdollisten todennäköisyyksien laskeminen edellyttää yllä esitetyssä muodossaan monia tekijöitä sisältävien marginalisointisummien laskemista, mikä saattaa suurten Bayes-verkkojen tapauksessa olla käytännössä mahdotonta. Bayes-verkkojen määritelmään liittyvät ehdolliset riippumattomuusoletukset tarjoavat kuitenkin ratkaisun myös tähän ongelmaan, kuten seuraava esimerkki osoittaa.

Olettakaamme että tehtävänä on laskea kuvassa 3.5 esitettyyn Bayes-verkkomalliin liittyen ehdollinen todennäköisyys $P(B = 1 \mid C = 1, D = 1)$.