SIR, ИДЕЯ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

6 апреля 2024 г.

Random facts:

- 6 апреля в ООН — Международный день спорта на благо развития и мира, а в России — День работника следственных органов
- 6 апреля 1712 г. началось Нью-Йоркское восстание рабов: 23 афроамериканца убили девять белых и ранили ещё шестерых
- 6 апреля 1814 г. Наполеон отрёкся от престола, и Бурбоны вернулись на трон
- 6 апреля 1830 г., всего через 11 дней после появления в продаже Книги, в бревенчатом доме Питера Уитмера-старшего в Фейете, штат Нью-Йорк, собрались 60 человек; там Джозеф Смит официально организовал Церковь Иисуса Христа святых последних дней
- 6 апреля 1896 г. первым олимпийским чемпионом современности стал Джеймс Конноли, победивший в тройном прыжке с результатом 13,71 метра
- 6 апреля 1984 г. население Кокосовых островов проголосовало за полное присоединение к Австралии
- 6 апреля 2010 г. начались беспорядки в Таласе, которые быстро переросли в революцию в Киргизии

SIR-модели в эпидемиологии

SIR-модели

- И напоследок — конкретный (и весьма актуальный) пример
- Давайте попробуем применить то, о чём мы говорили, к эпидемиологии
- В модели SIR есть:
  - объекты (люди) $X = \{x_1, \dots, x_N\}$,
  - каждый эволюционирует между тремя состояниями $\mathcal{S} = \{S, I, R\}^N$;
  - S, I, R — ещё общее число объектов в соответствующих состояниях;
  - входные данные — число зарегистрированных случаев заболевания, изменяющееся во времени: $\mathbf{y} = \left(y^{(t)}\right)_{t=1}^{T}$.

SIR-модели

- Введём для каждого объекта *траекторию* (subject-path) $\mathbf{x}_j = \left(x_j^{(t)}\right)_{t=1}^{T}, j = 1, \dots, N$.
- Тогда и статистики изменяются во времени: $S^{(t)}$, $I^{(t)}$, $R^{(t)}$.
- Неизвестные параметры модели — это $\theta = \{\beta, \mu, \rho, \pi\}$:
  - π — начальное распределение заболевших, $x_j^{(1)} \sim \pi$;
  - ρ — вероятность обнаружить инфицированного в общей популяции, то есть вероятность того, что человек x_j в момент t, когда $x_j^{(t)} = I$, будет обнаружен тестированием и зачислен в данные $y^{(t)}$; тогда $y_t \mid I^{(t)}, \rho \sim \mathrm{Binom}(I^{(t)}, \rho)$;
  - μ — вероятность для заболевшего выздороветь, то есть вероятность перехода из состояния I в состояние R;
  - β — самый интересный параметр, вероятность заразиться за один отсчёт времени *от одного инфицированного человека*; будем предполагать самую простую модель, в которой вероятность заразиться от одного инфицированного равна β и все эти события независимы, а значит, вероятность остаться здоровым равна $(1-\beta)^{I^{(t)}}$.

- Обозначим вектор состояний всех людей, кроме x_j, через $\mathbf{x}_{-j}$ (и остальные величины так же).
- Вероятности перехода из $x_j^{(t-1)}$ в $x_j^{(t)}$:

$$
\begin{aligned}
p\left(x_j^{(t)} = S \middle| x_j^{(t-1)} = S, \mathbf{x}_{-j}^{(t-1)}\right) &= (1-\beta)^{I_{-j}^{(t-1)}}, \\
p\left(x_j^{(t)} = I \middle| x_j^{(t-1)} = S, \mathbf{x}_{-j}^{(t-1)}\right) &= 1-(1-\beta)^{I_{-j}^{(t-1)}}, \\
p\left(x_j^{(t)} = R \middle| x_j^{(t-1)} = I, \mathbf{x}_{-j}^{(t-1)}\right) &= \mu, \\
p\left(x_j^{(t)} = I \middle| x_j^{(t-1)} = I, \mathbf{x}_{-j}^{(t-1)}\right) &= 1-\mu, \\
p\left(x_j^{(t)} \middle| x_j^{(t-1)}, \mathbf{x}_{-j}^{(t-1)}\right) &= 0 \quad \text{во всех остальных случаях.}
\end{aligned}
$$

- Скрытые переменные — те же самые траектории $\mathbf{x}$ (не зря же мы их вводили).

- Тогда полное правдоподобие $L(X, Y \mid \theta)$ получается как

$$\begin{aligned} L(X, Y \mid \theta) =& p(Y \mid X, \rho) p\left(X^{(1)} \middle| \pi\right) p\left(X \middle| X^{(1)}, \beta, \mu\right) \\ =& \left[\prod_{t=1}^{T} \binom{I^{(t)}}{y^{(t)}} \rho^{y^{(t)}} (1-\rho)^{I^{(t)} - y^{(t)}}\right] \times \\ & \times \left[\pi_S^{S^{(1)}} \pi_I^{I^{(1)}} \pi_R^{R^{(1)}}\right] \cdot \left[\prod_{t=2}^{T} \prod_{j=1}^{N} p\left(x_j^t \middle| \mathbf{x}_{-j}^{t-1}, \theta\right)\right], \end{aligned}$$

  где $p\left(x_j^t \middle| \mathbf{x}_{-j}^{t-1}, \theta\right)$ определено матрицей вероятностей переходов.
- Апостериорное распределение, которое нам нужно:

$$p(\theta | Y) \propto p(\theta) p(Y | \theta) = \int L(Y \mid X, \theta) p(X | \theta) p(\theta) dX,$$

  и этот интеграл, конечно, никак не подсчитать. Что же делать?

- На помощь приходит алгоритм Метрополиса-Гастингса, точнее, сэмплирование по Гиббсу.
- Будем сэмплировать траектории $\mathbf{x}_j$ последовательно, зафиксировав все остальные $\mathbf{x}_{-j}$, данные $\mathbf{y}$ и параметры модели θ:

$$\mathbf{x}_j \sim p\left(\mathbf{x}_j | \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right).$$

- Для этого нужно сначала понять, как выглядит распределение на траектории $\mathbf{x}_j$.
- Очевидно, её элементы $x_j^{(t)}$ нельзя считать независимыми, ведь человек проходит цепочку состояний $S \to I \to R$ только один раз и слева направо (если проходит вовсе). Всё это на первый взгляд опять выглядит сложно...

SIR-модели

- …но здесь получается модель, которая нам уже хорошо знакома: последовательность случайных переменных $x_j^{(t)}$ образует марковскую цепь, а если добавить ещё известные нам данные, то получится скрытая марковская модель.
- Выбросим $\mathbf{x}_j$ из множества траекторий, получив статистики по всей остальной популяции $S_{-j}^{(t)}$, $I_{-j}^{(t)}$ и $R_{-j}^{(t)}$. Тогда параметры скрытой марковской модели таковы:
  - скрытые состояния $x_j^{(t)}$ с множеством возможных значений $\{S, I, R\}$;
  - матрица вероятностей перехода $p\left(x_j^t \middle| \mathbf{x}_{-j}^{t-1}, \theta\right)$, определённая выше;
  - наблюдаемые $\mathbf{y}$, вероятности получить которые зависят от того, заражён ли человек x_j в момент времени t:

$$p\left(y^{(t)} \middle| x_j^{(t)}\right) = \mathrm{Binom}\left(I_{-j}^{(t)} + \left[x_j^{(t)} = I\right], \rho\right).$$

- Чтобы сэмплировать одну траекторию $\mathbf{x}_j$ при условии фиксированных остальных траекторий $\mathbf{x}_{-j}$, нужно сэмплировать траекторию вдоль скрытых состояний марковской модели.
- Здесь $\mathbf{x}_j$ будет эволюционировать от состояния S к состоянию R последовательно, с вероятностями перехода $\mathbf{x}_j$ на каждом шаге от S к R

$$p\left(x_j^{(t)} = I \middle| x_j^{(t-1)} = S, \mathbf{x}_{-j}\right) = 1 - (1-\beta)^{I_{-j}^{(t-1)}},$$

а вероятность перехода от I к R фиксирована и равна μ.

- Стохастический алгоритм Витерби: два прохода по HMM слева направо и справа налево.
- На прямом проходе подсчитываем матрицы совместных вероятностей пар последовательных состояний

$$Q_j^{(t)} = \left(q_{j,s',s}^t\right)_{s',s\in\{S,I,R\}}, \quad \text{где}$$

$$q_{j,s',s}^t = p\left(x_j^{(t)} = s, x_j^{(t-1)} = s' \middle| Y, \mathbf{x}_{-j}, \theta\right).$$

- Фактически в нашей модели возможных пар таких состояний всего шесть (остальные переходы запрещены), и все матрицы Q выглядят как

$$Q_j^{(t)} = \begin{pmatrix} q_{j,S,S}^{(t)} & q_{j,S,I}^{(t)} & 0 \\ 0 & q_{j,I,I}^{(t)} & q_{j,I,R}^{(t)} \\ 0 & 0 & q_{j,R,R}^{(t)} \end{pmatrix}.$$

- Чтобы вычислить $q^{(t)}_{j,s',s}$, нужно подсчитать

$$
\begin{aligned}
q^{(t)}_{j,s',s} = p\left(x_j^{(t)} = s, x_j^{(t-1)} = s' \middle| \mathbf{y}, \mathbf{x}_{-j}, \theta\right) \propto \\
\propto p\left(x_j^{(t-1)} = s' \middle| \mathbf{y}, \mathbf{x}_{-j}, \theta\right) p\left(x_j^{(t)} = s \middle| x_j^{(t-1)} = s', \mathbf{y}, \mathbf{x}_{-j}, \theta\right) \times \\
\times p\left(y_t \middle| x_j^{(t)} = s, \mathbf{y}, \mathbf{x}_{-j}, \theta\right) = \\
= \left[\sum_{s''} q^{(t-1)}_{j,s'',s'}\right] \cdot p\left(x_j^{(t)} = s \middle| x_j^{(t-1)} = s', \mathbf{x}_{-j}, \theta\right) \times \\
\times p_{\mathrm{Binom}}\left(y^{(t)} \mid I^{(t)}_{-j} + \left[x_j^{(t)} = I\right], \rho\right),
\end{aligned}
$$

  где $p\left(x_j^{(t)} = s \middle| x_j^{(t-1)} = s', \mathbf{x}_{-j}, \theta\right)$ — это те самые вероятности перехода в нашей модели, подсчитанные по статистикам $S^{(t-1)}_{-j}$, $I^{(t-1)}_{-j}$ и $R^{(t-1)}_{-j}$, а p_{Binom} — вероятность по биномиальному распределению.
- Потом нужно нормировать, учитывая, что $\sum_{s,s'} q^{(t)}_{j,s',s} = 1$.

- Когда все матрицы $Q_j^{(t)}$ подсчитаны, их можно использовать для того, чтобы сэмплировать целые последовательности скрытых состояний. Для этого нужно разложить $p(\mathbf{x}_j \mid \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta)$ не с начала времён, а с конца:

$$
\begin{aligned}
p\left(\mathbf{x}_j \middle| \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) = p\left(x_j^{(T)} \middle| \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) p\left(x_j^{(T-1)} \middle| x_j^{(T)}, \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) \times \ldots \\
\ldots \times p\left(x_j^{(2)} \middle| x_j^{(3)}, \ldots, x_j^{(T)}, \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) \times \\
\times p\left(x_j^{(1)} \middle| x_j^{(2)}, \ldots x_j^{(T)}, \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right).
\end{aligned}
$$

- И можно сэмплировать справа налево по матрицам Q.

- Последнее состояние сэмплируется из сумм по строкам последней матрицы $Q_j^{(T)}$:

$$x_j^{(T)} \sim p\left(x_j^{(T)} = s \middle| \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) = \\ = \sum_{s'} p\left(x_j^{(T)} = s, x_j^{(T-1)} = s' \middle| \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) = \\ = \sum_{s'} q_{j,s',s}^{(T)}.$$

- А дальше достаточно, по марковскому свойству последовательности $\mathbf{x}_j$, сэмплировать при условии следующего состояния, то есть использовать распределение

$$x_j^{(t)} \sim p\left(x_j^{(t)} = s \middle| x_j^{(t+1)}, \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) \propto \\ \propto p\left(x_j^{(t)} = s, x_j^{(t+1)} = s' \middle| \mathbf{x}_{-j}, \mathbf{y}, \theta\right) = q_{j,s,s'}^{(t+1)}.$$

- Так мы получим новую траекторию $\mathbf{x}_j$, и её можно подставить в X на место старой траектории и продолжать процесс сэмплирования: выбрать новый индекс j и повторить всё заново.
- В какой-то момент надо будет остановиться и обновить значения параметров.
- Теоретически можно даже сделать полноценный байесовский вывод, пересчитав параметры сопряжённых априорных распределений.
- Три основных параметра β, ρ и μ — это три монетки, а оставшийся параметр π — кубик с тремя гранями. Поэтому сопряжёнными априорными распределениями будут

$$\begin{aligned} p(\beta) &= \mathrm{Beta}\left(a_\beta, b_\beta\right), & p(\mu) &= \mathrm{Beta}\left(a_\mu, b_\mu\right), \\ p(\rho) &= \mathrm{Beta}\left(a_\rho, b_\rho\right), & p(\pi) &= \mathrm{Dir}\left(\mathbf{a}_\pi\right). \end{aligned}$$

- Чтобы пересчитать их апостериорные значения, нужно аналогично обычным HMM подсчитать «статистику» того, сколько раз соответствующие монетки и кубики «бросали» и чем они «выпадали» в текущем наборе скрытых переменных (траекторий) X:
  - к параметрам $\mathbf{a}_\pi$ добавляются статистики того, в каких состояниях начинаются траектории:

$$a_{\pi,s} := a_{\pi,s} + \sum_{j=1}^{N} \left[x_j^{(1)} = s\right];$$

- Чтобы пересчитать их апостериорные значения, нужно аналогично обычным HMM подсчитать «статистику» того, сколько раз соответствующие монетки и кубики «бросали» и чем они «выпадали» в текущем наборе скрытых переменных (траекторий) X:
  - параметры a_μ и b_μ обновляются в зависимости от того, каково было ожидаемое число переходов из состояния I в состояние R (выздоровлений) и сколько всего времени люди провели в состоянии I (проболели):

$$a_\mu := a_\mu + \sum_{t=1}^{T-1}\sum_{j=1}^{N}\left[x_j^{(t)} = I, x_j^{(t+1)} = R\right],$$

$$b_\mu := b_\mu + \sum_{t=1}^{T} I^{(t)} - \sum_{t=1}^{T-1}\sum_{j=1}^{N}\left[x_j^{(t)} = I, x_j^{(t+1)} = R\right].$$

- Чтобы пересчитать их апостериорные значения, нужно аналогично обычным HMM подсчитать «статистику» того, сколько раз соответствующие монетки и кубики «бросали» и чем они «выпадали» в текущем наборе скрытых переменных (траекторий) X:
    - аналогично, параметры a_ρ и b_ρ получаются из статистики выявленных случаев, попавших в $\mathbf{y}$, по сравнению со случаями, которые оказались только в $I^{(t)}$:

$$a_\rho := a_\rho + \sum_{t=1}^{T} y^{(t)}, \quad b_\rho := b_\rho + \sum_{t=1}^{T} \left(I^{(t)} - y^{(t)} \right);$$

- Параметры a_β и b_β самые интересные: нужно подсчитать ожидаемое число «возможностей заразиться», которые реализовались и не реализовались для всех людей в популяции:

$$p\left(x_j \text{ заразился при одном контакте} \middle| x_j \text{ заразился}\right) = \frac{\beta}{1-(1-\beta)^{I^{(t)}}},$$

а значит,

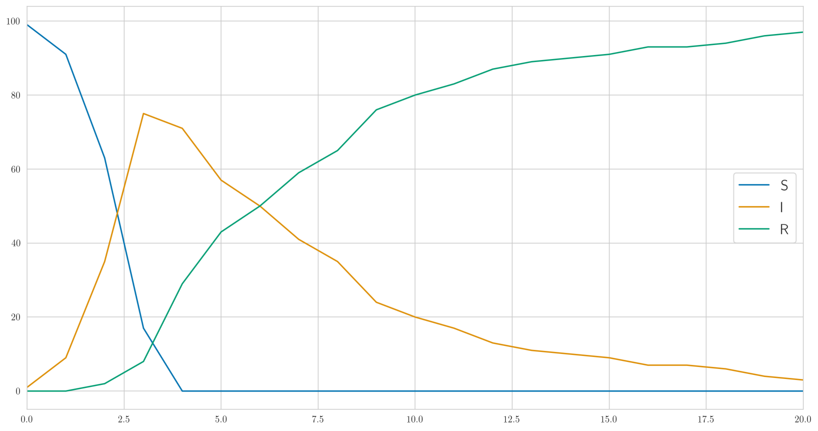
$$a_\beta := a_\beta + \sum_{t,j:\ x_j^{(t)}=S, x_j^{(t+1)}=I} \frac{\beta I^{(t)}}{1-(1-\beta)^{I^{(t)}}},$$

$$b_\beta := b_\beta + \sum_{t,j:\ x_j^{(t)}=S, x_j^{(t+1)}=S} I^{(t)} + \sum_{t,j:\ x_j^{(t)}=S, x_j^{(t+1)}=I} \left(I^{(t)} - \frac{\beta I^{(t)}}{1-(1-\beta)^{I^{(t)}}}\right)$$

- Итого получили все компоненты нашей (сильно упрощённой!) SIR-модели: скрытые переменные в виде траекторий элементов популяции, алгоритм для сэмплирования по Гиббсу, который сэмплирует одну траекторию при условии всех остальных, и правила обновления параметров, которыми можно воспользоваться после того, как марковская цепь сэмплирования достаточно долго поработала.
- Давайте теперь посмотрим на практику...

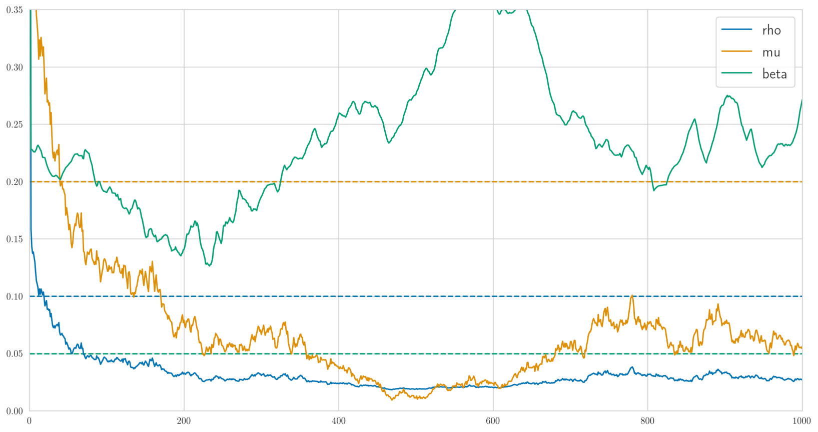
SIR-модели

- Пример визуализации статистик заражения при параметрах $N = 100$, $T = 20$, $\rho = 0.1$, $\beta = 0.05$, $\mu = 0.1$:

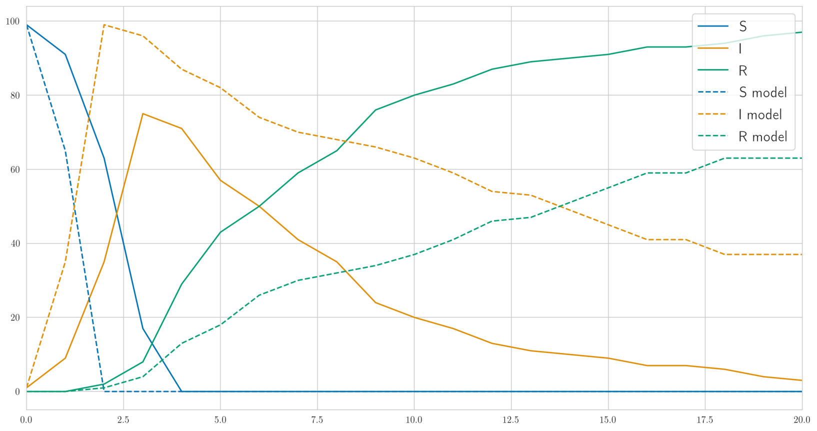


SIR-модели

- Пример обучения параметров модели SIR:



- И если посэмплировать популяции из полученных параметров и из настоящих, получится совсем одно и то же:



- Какие выводы? Как это использовать на практике?

Вариационные приближения

Вариационный вывод

- Вариационный вывод: функционалы, производные по функциям... в общем, можно оптимизировать функционалы.
- Для нас это значит, что можно оптимизировать приближение q из какого-то класса к заданному p.
- Пусть есть $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ и $\mathbf{Z} = \{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_N\}$.
- Мы знаем $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ из модели, хотим найти приближение для $p(\mathbf{Z} \mid \mathbf{X})$ и $p(\mathbf{X})$.

Вариационный вывод

- Как и в EM:

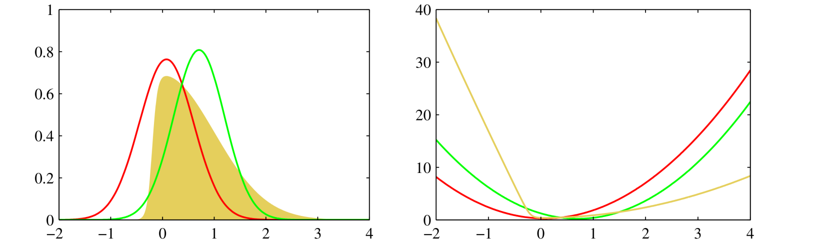
$$\ln p(\mathbf{X}) = \mathcal{L}(q) + \mathrm{KL}(q\|p), \text{ где}$$

$$\mathcal{L}(q) = \int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})}{q(\mathbf{Z})} \mathrm{d}\mathbf{Z},$$

$$\mathrm{KL}(q\|p) = -\int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{Z} \mid \mathbf{X})}{q(\mathbf{Z})} \mathrm{d}\mathbf{Z}.$$

- $\mathcal{L}(q)$ — это вариационная нижняя оценка, её можно теперь максимизировать, и KL будет автоматически минимизироваться.

- Пример – сравним с лапласовским:



- Если $q(Z)$ произвольное, то мы просто получим $q(Z) = p(\mathbf{Z} \mid \mathbf{X})$; но это вряд ли получится.
- Будем ограничивать.

Факторизуемые распределения

- Главный частный случай — пусть $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}_1 \sqcup \ldots \sqcup \mathbf{Z}_M$, и

$$q(\mathbf{Z}) = \prod_{i=1}^{M} q_i(\mathbf{Z}_i).$$

- Но больше никаких предположений! В этом прелесть — оптимизируем сразу функции!
- Это соответствует теории среднего поля в физике (mean field theory).

- Тогда:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(q) &= \int \prod_i q_i \left(\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) - \sum_i \ln q_i \right) \mathrm{d}\mathbf{Z} \\ &= \int q_j \left[\int \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) \prod_{i \neq j} q_i \mathrm{d}\mathbf{Z}_i \right] \mathrm{d}\mathbf{Z}_j - \int q_j \ln q_j \mathrm{d}\mathbf{Z}_j + \mathrm{const} \\ &= \int q_j \ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) \mathrm{d}\mathbf{Z}_j - \int q_j \ln q_j \mathrm{d}\mathbf{Z}_j + \mathrm{const},\end{aligned}$$

где $\ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) = \mathrm{E}_{i \neq j} \left[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) \right] + \mathrm{const}.$

- Как максимизировать теперь $\mathcal{L}(q)$ по q_j?

Факторизуемые распределения

- Надо заметить, что мы получили там KL-дивергенцию между $q_j(\mathbf{Z}_j)$ и $\tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)$.
- Т.е. оптимальное решение получится при

$$\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \mathrm{E}\left[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})\right] + \mathrm{const}.$$

- Константа здесь просто для нормализации.
- Оказывается, достаточно взять ожидание от логарифма совместного распределения.
- Но явных формул не получается, потому что ожидание считается по остальным q_i^*, $i \neq j$.
- И всё-таки обычно что-то можно сделать; давайте рассмотрим примеры.

Спасибо за внимание!