

Introducción

Representar gráficamente distribuciones de probabilidad. Ventajas

- Forma simple de visualizar la estructura de modelos probabilísticos.
- Diseño y motivación de nuevos modelos.
- Facilita comprender propiedades de los modelos, como la independencia condicional.
- Cálculos complejos pueden ser expresados en términos de manipulaciones gráficas sencillas.

Redes Bayesianas

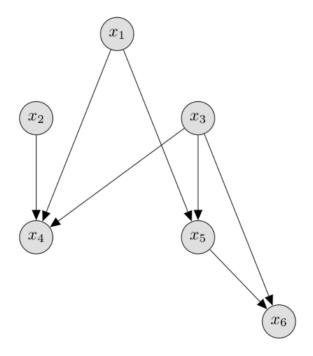
Introducción

- Podemos representar cualquier distribución de probabilidad utilizando un **grafo acíclico dirigido** (DAG).
- Cada nodo es una variable aleatoria de la distribución.
- Arcos entre nodos representan dependencias condicionales.
- Dado un DAG, la distribución de probabilidad conjunta es

$$p(x) = \prod_{k=1}^K p(x_k| ext{pa}_k)$$

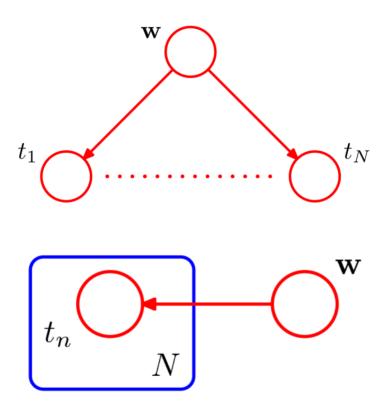
Introducción

- **Ejercicio**: Factoriza y representa gráficamente la distribución p(a,b,c).
- **Ejercicio**: ¿A qué distribución corresponde este DAG?



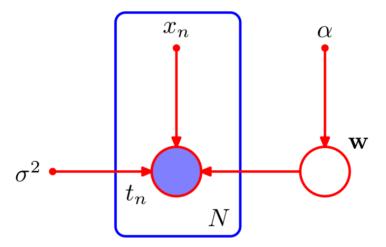
Notación

• Para expresar multiplicidad de variables aleatorias se utiliza la siguiente notación



Notación

- Los parámetros deterministas se representan usando círculos sólidos.
- Las variables observadas se colorean.



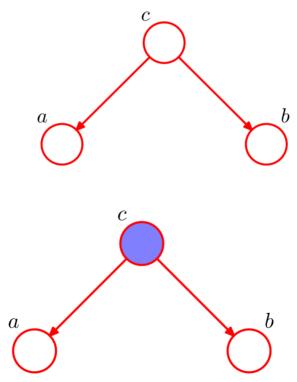
• **Ejercicio**: ¿Qué modelo representa esta Red Bayesiana?

Independencia Condicional

- Decimos que a y b son condicionalmente independientes dado c si p(a|b,c) = p(a|c) o p(a,b|c) = p(a|c)p(b|c).
- Los PGMs permiten identificar las propiedades de independencia condicional de la distribución conjunto de forma automática.

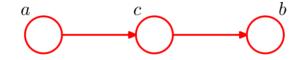
Ejemplo 1

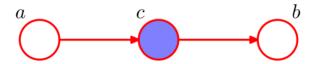
- Nodo *tail-to-tail*
- Si se condiciona en c este nodo bloquea el camino entre a y b, y se cumple independencia condicional.



Ejemplo 2

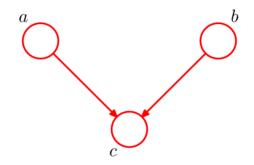
- Nodo *head-to-tail*
- Si se condiciona en c este nodo bloquea el camino entre a y b, y se cumple independencia condicional.

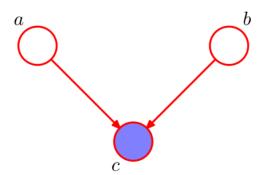




Ejemplo 3

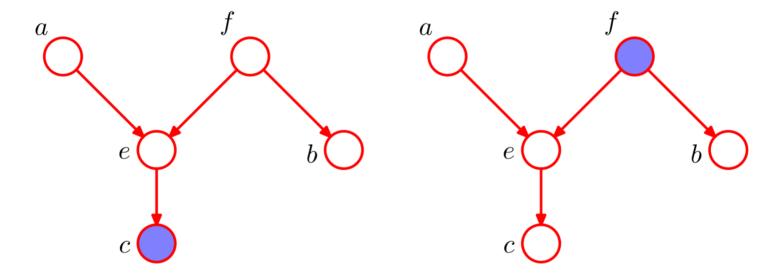
- Nodo *head-to-head*
- Si se c no se observa bloquea el camino entre a y b y estas son independientes.
- Si se c se observa el camino se desbloquea: a y b y son dependientes.



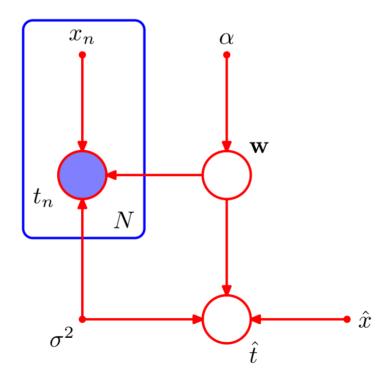


- Consideremos un DAG general y sean A, B y C conjuntos de nodos diferentes.
- Queremos determinar si A y B son condicionalmente independientes dado C.
- Consideremos todas las trayectorias entre A y B. Diremos que alguna de estas está bloqueada si:
 - Las flechas del camino encuentran un nodo *head-to-tail* o *tail-to-tail* y este está en *C*.
 - Las flechas del camino encuentran un nodo *head-to-head* y ni el nodo ni sus descendientes están en *C*.
- Si todos los caminos entre A y B están bloqueados, entonces A y B están d-separados por C y son condicionalmente independientes dado C.

• Determinar si *a* y *b* son condicionalmente independientes dados los nodos observados en cada caso.



- Dibuja la red bayesiana de un modelo de Naive-Bayes
- Estudia la independencia condicional entre t_n y \hat{t} .

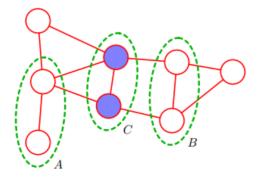


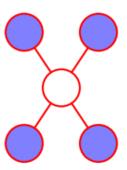
- A efectos de *D*-separación, los parámetros se comportan como variables aleatorias observadas.
- Como nunca tienen padres son siempre nodos *tail-to-tail* y bloquean todas las trayectorias en las que intervienen.
- El conjunto de distribuciones que pueden ser expresadas en términos de la factorización implicada por un DAG, se denomina \mathcal{DF} .
- \mathcal{DF} coincide con todas las distribuciones que cumplen las propiedades de independencia condicional del DAG.
- Se denomina *Markov Blanket* de una variable x_i al conjunto de padres, hijos y copadres de x_i .
- Demostrar que para una distribución arbitraria $p(x_1, \ldots, x_D)$, $p(x_i|x_{\{j\neq i\}})$ depende únicamente de las variables del *Markov Blanket* de x_i .

Markov Random Fields

Modelos gráficos no dirigidos

- También conocidos como redes de Markov.
- Los enlaces ahora no son dirigidos.
- Ventaja: la propiedad de independencia se puede verificar mucho más fácilmente:
 - **d-separación**: $A \perp B|C$ sii todos los caminos entre A y B están bloqueados por nodos de C.
 - o Corolario: no hay fenómeno de explaining away.
- Markov blanket: todos los nodos adyacentes.



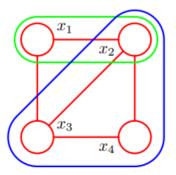


Propiedades de factorización

- Consideremos dos nodos x_i y x_j que no estén conectados por arco.
- Como no hay camino directo, dado el resto de nodos, todos los caminos están bloqueados.
- Por tanto, $p(x_i, x_j | x_{\setminus \{i,j\}}) = p(x_i | x_{\setminus \{i,j\}}) p(x_j | x_{\setminus \{i,j\}})$.

Es conveniente introducir el concepto de **clique**:

- Clique: subgrafo donde cada par de nodos está conectado por un enlace.
- Clique maximal: clique al cual no es posible añadir más nodos sin que pierda la propiedad de ser clique.



Distribución conjunta

• Para un clique C y conjunto de variables contenidas en él, x_C , tenemos que

$$p(x) = rac{1}{Z} \prod_C \Psi_C(x_C), \qquad Z = \sum_x \prod_C \Psi_C(x_C)$$

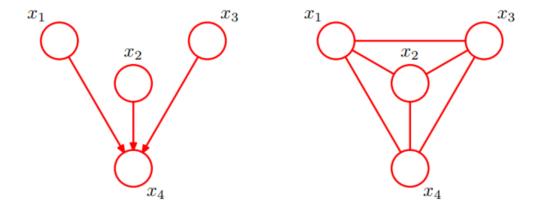
• Hay que tomar

$$\Psi_C(x_C) = \exp\{-E(x_C)\}$$

- donde E(x) es la llamada función de energía.
- Con M variables que tomen K valores, la complejidad puede ser $\mathcal{O}(K^M)$.

De dirigido a no dirigido

- Para pasar de un grafo dirigido a uno no dirigido, basta añadir nuevos enlaces entre todos los pares de parientes de cualquier nodo.
- Este proceso se conoce como moralización, y el grafo resultante, grafo moral.



• Ir de una representación en grafo dirigido a uno no dirigido descarta algunas propiedades de independencia condicional del grafo.

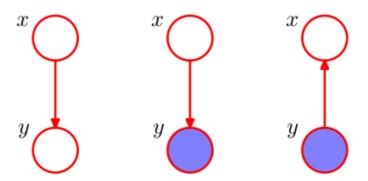
Inferencia Exacta en Modelos Gráficos

Resumen

- **Inferencia**: algunos de los nodos del modelo estarán fijados a ciertos valores conocidos (observados), y deseamos calcular la distribución posterior sobre (subconjuntos de) el resto de nodos (no observados).
- Aprovecharemos la estructura gráfica del modelo para desarrollar algoritmos que eviten la explosión exponencial del número de configuraciones posibles del modelo.
- Caso más sencillo: supongamos que p(x,y)=p(y|x)p(x), con el Teorema de Bayes

$$p(x|y) = rac{p(y|x)p(x)}{p(y)}$$

• Ahora el modelo se interpreta como p(y)p(x|y). Ejemplo: MoG.



Inferencia en una cadena

Consideremos una cadena de nodos

$$p(x) = rac{1}{Z} \psi_{1,2}(x_1,x_2) \psi_{2,3}(x_2,x_3) \cdots \psi_{N-1,N}(x_{N-1},x_N)$$

- Echemos cuentas: supongamos que cada nodo es una VA discreta (\$K\$ clases), y cada potencial viene especificado como una tabla de tamaño $K \times K$: la conjunta tiene $(N-1)K^2$ parámetros.
- Queremos obtener la **distribución marginal sobre** x_n (sumando todos los demás nodos):

$$p(x_n) = \sum_{x_1} \sum_{x_2} \cdots \sum_{x_{n-1}} \sum_{x_{n+1}} \cdots \sum_{x_N} p(x)$$

• La complejidad es $\mathcal{O}(K^N)$!! Es **intratable** para N moderados.

Inferencia en una cadena (2)

• ¿Podemos hacerlo mejor? La clave consiste en utilizar la propiedad distributiva

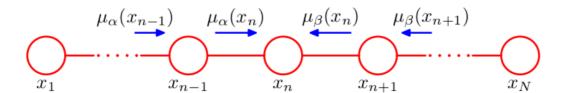
$$ab + ac = a(b+c)$$

• Podemos obtener ecuaciones recursivas para transmitir mensajes

$$p(x_n) = rac{1}{Z} \left[\sum_{x_{n-1}} \psi_{n-1,n}(x_{n-1},x_n) \cdots \left[\sum_{x_1} \psi_{x_1,x_2}(x_1,x_2)
ight] \cdots
ight] \ \left[\sum_{x_{n+1}} \psi_{n,n+1}(x_n,x_{n+1}) \cdots \left[\sum_{x_N} \psi_{N-1,N}(x_{N-1},x_N)
ight] \cdots
ight]$$

Esto es,

$$p(x_n) = rac{1}{Z} \mu_lpha(x_n) \mu_eta(x_n)$$

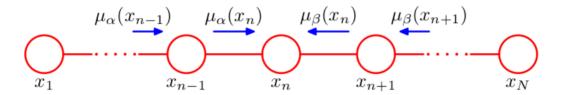


Inferencia en una cadena (3)

$$p(x) = \left[rac{1}{Z}\sum_{x_{n-1}}\psi_{n-1,n}(x_{n-1},x_n)\cdots\left[\sum_{x_1}\psi_{x_1,x_2}(x_1,x_2)
ight]\cdots
ight] \ \left[\sum_{x_{n+1}}\psi_{n,n+1}(x_n,x_{n+1})\cdots\left[\sum_{x_N}\psi_{N-1,N}(x_{N-1},x_N)
ight]\cdots
ight]$$

- Ahora, el coste computacional es el de N-1 sumas, sobre variables con K categorías.
- Cada suma local es la de una tabla de tamaño $K \times K$.
- Por tanto, la nueva complejidad es $\mathcal{O}(NK^2)$, esto es, lineal en N !!
- Si el grafo fuera completo (todos los nodos tienen arcos a todos los restantes) no hubiéramos podido hacer lo anterior: volvemos al coste exponencial.

Paso de mensajes (1)



- Intepretación más común: paso de mensajes entre los nodos del grafo.
- La marginal se descompone en un producto de dos factores y la constante de normalización:

$$p(x_n) = rac{1}{Z} \mu_lpha(x_n) \mu_eta(x_n) \qquad Z = \sum_{x_n} \mu_lpha(x_n) \mu_eta(x_n)$$

- $\mu_{\alpha}(x_n)$ es un mensaje propagado hacia adelante en la cadena desde x_{n-1} hasta x_n .
- $\mu_{eta}(x_n)$ es un mensaje propagado hacia atrás en la cadena desde x_{n+1} hasta x_n .
- Cada mensaje contiene un conjunto de K valores (uno para cada elección de x_n), por lo que el producto de dos mensajes representa una multiplicación componente a componente de los correspondientes elementos.

Paso de mensajes (2)

• El mensaje hacia adelante puede ser evaluado recursivamente

$$\mu_lpha(x_n) = \sum_{x_{n-1}} \psi_{x_{n-1},x_n}(x_{n-1},x_n) \left[\sum_{x_{n-2}} \ldots
ight] = \sum_{x_{n-1}} \psi_{x_{n-1},x_n}(x_{n-1},x_n) \mu_lpha(x_{n-1})$$

• Por tanto, primero evaluamos

$$\mu_lpha(x_2) = \sum_{x_1} \psi_{1,2}(x_1,x_2)$$

- El mensaje saliente se obtiene multiplicando el mensaje entrante por el potencial local y sumando en la variable del nodo.
- Los mensajes hacia atrás también tienen la misma estructura recursiva.
- Este tipo de grafos se denominan **cadenas de Markov** y las ecuaciones de paso de mensajes correspondientes son un ejemplo de las **ecuaciones de Chapman-Kolmogorov** para procesos de Markov.

Inferencia en una cadena

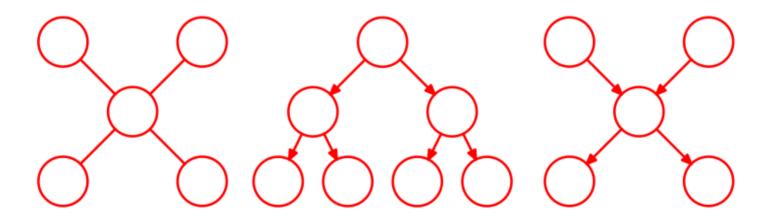
- Para calcular distribuciones marginales:
 - Calcular y guardar todos los mensajes hacia adelante $\mu_{\alpha}(x_n)$.
 - Calcular y guardar todos los mensajes hacia atrás $\mu_{\beta}(x_n)$.
 - Calcular la constante de normalización Z.
 - \circ Calcular $p(x_n) = \frac{1}{Z} \mu_{\alpha}(x_n) \mu_{\beta}(x_n)$.
- Ejercicio: la marginal para pares de nodos adyacentes es

$$p(x_{n-1},x_n) = rac{1}{Z} \mu_lpha(x_{n-1}) \psi_{n-1,n}(x_{n-1},x_n) \mu_eta(x_n)$$

• Componentes básicas para hacer inferencia en sistemas dinámicos lineales y modelos ocultos de Markov (HMM).

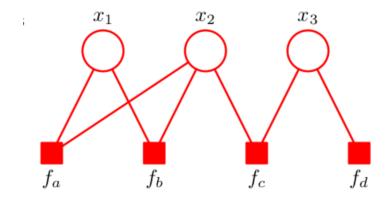
Inferencia en árboles

- El esquema propuesto de paso de mensajes generaliza fácilmente a cualquier grafo **individualmente conectado** (singly connected): a lo sumo un único camino entre cualquier par de nodos.
- Cada nodo envía por cada enlace el producto de los mensajes que ha recibido desde los otros enlaces.
- Ejemplo: árbol no dirigido, árbol dirigido y poliárbol.



Grafos de factores

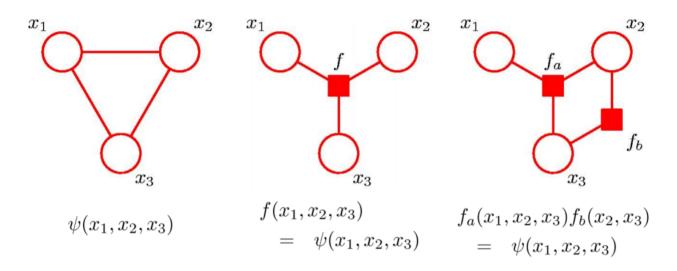
- También representamos los factores como nodos especiales.
- Ejemplo: $p(x) = f_a(x_1, x_2) f_b(x_1, x_2) f_c(x_2, x_3) f_d(x_3)$



- En general, $p(x) = \prod_s f_s(X_s)$.
- Cada potencial tiene su propio nodo de factor, conectado a todos los términos del potencial.
- Los grafos de factores son **bipartitos**: podemos dividir entre nodos de variables y nodos de factores → estructura para implementar paso de mensajes genérico.

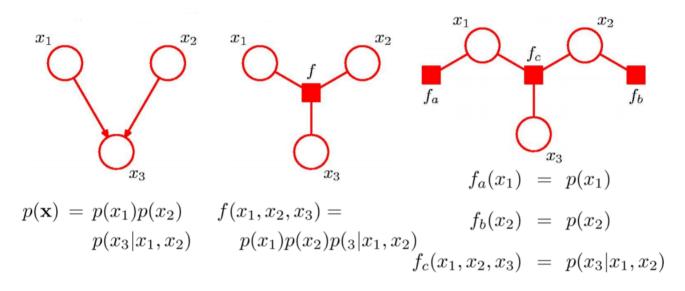
Grafos de factores para modelos no dirigidos

- Un grafo no dirigido puede ser convertido a un grafo de factores.
- Además, factorizaciones adicionales son posibles de representar(los grafos de factores son más expresivos)



Grafos de factores para modelos dirigidos

- Los grafos dirigidos son un caso especial en que los factores representan **distribuciones locales condicionadas**.
- Un modelo individualmente conectado generará un grafo de factores individualmente conectado: preserva la sencillez de la inferencia en estos casos (esto no ocurre si pasamos de dirigidos a no dirigidos).



Algoritmo suma-producto

Introducción

- Usando el marco de grafos de factores, derivaremos un algoritmo eficiente de **inferencia exacta** aplicable a grafos con estructura de árbol.
- Nos centraremos en evaluar marginales locales sobre nodos o conjuntos de nodos.
- Por sencillez, supondremos que todas las variables son discretas (la extensión a caso contínuo es trivial).
- Asumiremos que el grafo original es un **árbol no dirigido**, un **árbol dirigido** o un **poli- árbol**.
- En estos casos, el grafo de factores tiene estructura de árbol.

Objetivos

- Primero de todo convertimos el grafo original en un grafo de factores.
- El objetivo es explotar la estructura del grafo para:
 - 1. Obtener un algoritmo eficiente de inferencia exacta para encontrar las marginales.
 - 2. En el caso de computar muchas marrginales, *compartir* los cálculos de manera eficiente.

Algoritmo suma-producto (1)

• Empezamos por encontrar p(x) para un nodo en concreto.

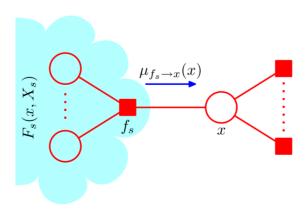
$$p(x) = \sum_{\mathbf{x}/x} p(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}/x} \prod_s f_s(x_s)$$

• La estructura de árbol permite dividir los factores en la distribución conjunta en grupos, cada uno asociado con un factor vecino de x.

Algoritmo suma-producto (2)

- Llamamos a ne(x) al conjunto de nodos factor vecinos de x.
- X_s : todas las variables **en el subárbol** conectado a x via un nodo factor f_s .
- $F_s(x, X_s)$ el producto de **todos los factores** del grupo asociado a f_s .
- Entonces:

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{s \in \mathrm{ne}(x)} F_s(x, X_s)$$



Algoritmo suma-producto (3)

• Sustituyendo, cambiando orden suma producto y definiendo **mensajes** entre f_s y x

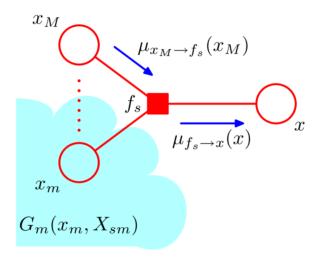
$$p(x) = \prod_{s \in ext{ne}(x)} \left[\sum_{X_s} F_s(x, X_s)
ight] := \prod_{s \in ext{ne}(x)} \mu_{f_s o x}(x)$$

• Necesitamos evaluar los mensajes. Vemos que cada factor $F_s(x, X_s)$ es a su vez un grafo de factores y puede ser factorizado.

Algoritmo suma-producto (4)

• Denotamos las variables asociadas a f_s (a parte de x) como x_1, \ldots, x_M .

$$F_s(x,X_s) = f_s(x,x_1,\dots,x_M) G_1(x_1,X_{s1}) \dots G_M(x_M,X_{sM})$$



Algoritmo suma-producto (5)

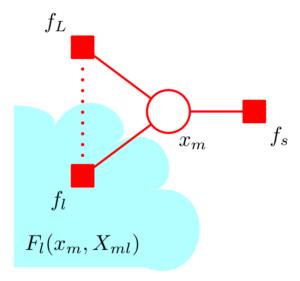
• Substituyendo y llamando $ne(f_s)$ al conjunto de nodos variable vecinos de f_s .

$$egin{aligned} \mu_{f_s o x}(x) &= \sum_{X_s} F_s(x, X_s) \ &= \sum_{x1, \dots, x_M} f_s(x, x_1, \dots, x_M) \prod_{m \in ext{ne}(f_s)/x} \left[\sum_{X_{sm}} G_m(x_m, X_{sm})
ight] \ &= \sum_{x1, \dots, x_M} f_s(x, x_1, \dots, x_M) \prod_{m \in ext{ne}(f_s)/x} \left[\mu_{x_m o f_s}(x_m)
ight] \end{aligned}$$

- Existen dos tipos de mensajes: variable-factor y factor-variable.
- Evaluar mensaje de nodo factor a nodo variable requiere evaluar el **producto de mensajes recibidos** por el nodo factor, **multiplicar factor asociado** a este nodo y **marginalizar en variables asociadas a mensajes recibidos**.

Algoritmo suma-producto (6)

• Para cerrar círculo, evaluamos los mensajes variable-factor.



• Vemos que $G_m(x_m,X_{sm})$ admite la factorización

$$\prod_{l\in \mathrm{ne}(x_m)/f_s} F_l(x_m,X_{ml})$$

Algoritmo suma-producto (6)

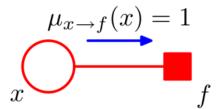
Con esto

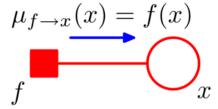
$$egin{aligned} \mu_{x_m o f_s}(x_m) &= \prod_{l \in ext{ne}(x_m)/f_s} \left[\sum_{X_{ml}} F_l(x_m, X_{ml})
ight] \ &= \prod_{l \in ext{ne}(x_m)/f_s} \mu_{f_l o x_m}(x_m) \end{aligned}$$

• Para evaluar mensajes mandados por variable nodo a variable factor, calcular producto de todos los mensajes que llegan a la variable nodo.

Algoritmo suma-producto (7)

- Cada mensaje puede ser calculado recursivamente en términos de otros mensajes.
- ¿Cómo empezar la recursión?
- Vemos x como el nodo raíz, y nos vamos a loas nodos hoja.





Algoritmo suma-producto (8)

- Para calcular todas las marginales de forma eficiente:
 - 1. Escoger nodo arbitrario como raíz.
 - 2. Calcular y propagar mensajes de las hojas hasta la raíz, guardando todos los mensajes recibidos en cada nodo.
 - 3. Calcular y propagar mensajes de la raíz hasta las hojas, guardando todos los mensajes recibidos en cada nodo.
 - 4. Calcular el producto de mensajes recibidos en cada nodo y normalizar si es necesario.

Algoritmo suma-producto (9)

• **Ejercicio**: Demostrar que las marginales sobre variables asociadas a un factor se pueden escribir como

$$p(oldsymbol{x_s}) = f_s(oldsymbol{x_s}) \prod_{m \in ext{ne}(f_s)} \mu_{x_m o f_s}(x_m)$$

Algoritmo suma-producto (10)

- Cuando hay variables observadas, particionamos \mathbf{x} en variables observadas \mathbf{v} y ocultas \mathbf{h} .
- Sean $\hat{\boldsymbol{v}}$ los valores observados. Redefinimos la conjunta como

$$p(oldsymbol{x})\prod_i I(v_i,\hat{v}_i)$$

- Que no es más que la versión sin normalizar de $p(h|v=\hat{v})$.
- Con el agoritmo suma-producto podemos calcular las versiones sin normalizar de

$$p(h_i|oldsymbol{v}=oldsymbol{\hat{v}})$$

• Que es barato de normalizar.

Algoritmo max-suma

Algoritmo max-suma (1)

- El algoritmo suma-producto nos permitía calcular marginales de forma eficiente.
- En muchas ocasiones, también nos interesará calcular una **configuración de variables** x que maximice la probabilidad del modelo.
- Solución: usaremos el algoritmo max-suma.
- Objetivo: encontrar un algoritmo eficiente para
 - 1. Calcular x_{max} tal que maximize p(x).
 - 2. Calcular $p(x_{max})$.
- En general, maximizar marginales \neq máximo conjunto:

$$\begin{array}{c|cc} & x=0 & x=1\\ \hline y=0 & 0.3 & 0.4\\ y=1 & 0.3 & 0.0 \\ \\ \arg\max_x p(x,y)=1 & \arg\max_x p(x)=0 \end{array}$$

Algoritmo max-suma. Inferencia en cadena

Volvamos al caso de inferencia en una cadena...

• La clave vuelve a ser intercambiar las operaciones.

$$egin{aligned} p(x_{max}) &= \max_x p(x) = \max_{x_1} \ldots \max_{x_N} p(x) = \ &= rac{1}{Z} \max_{x_1} \ldots \max_{x_N} \left[\psi_{1,2}(x_1, x_2) \cdots \psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N)
ight] = \ &= rac{1}{Z} \max_{x_1} \left[\max_{x_1} \left[\psi_{1,2}(x_1, x_2) \left[\cdots \max_{x_N} \psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N)
ight]
ight] \end{aligned}$$

- Al igual que con las marginales, intercambiar los operadores max y producto resulta en un algoritmo mucho más eficiente, dejando de tener coste exponencial.
- Puede ser interpretado en términos de un **paso de mensajes** desde x_N hasta x_1 .

Algoritmo max-suma. Generalización a árboles

 Al igual que suma-producto, puede aplicarse en grafos de factores con estructura de árbol

$$\max_x p(x) = \max_{x_n} \prod_{f_s \in ne(x_n)} \max_{X_s} f_s(x_n, X_s)$$

• Frente al original:

$$p(x) = \prod_{f_s \in ne(x)} \left[\sum_{X_s} F_s(x, X_s)
ight]$$

- max-producto $\rightarrow max$ -suma
 - 1. Por razones numéricas, es más estable trabajar en espacio logarítmico:

$$\log(\max_x p(x)) = \max_x \log p(x)$$

2. Y usamos la propiedad distributiva para los intercambios de operadores:

$$\max\{a+b,a+c\}=a+\max\{b,c\}$$

Algoritmo max-suma

• Ya es directo pasar del algoritmo suma-producto al max-suma: basta cambiar los operadores:

$$\circ$$
 + \rightarrow max,
 \circ × \rightarrow + (de logaritmos)

• Inicialización (los elementos neutros para ambos operadores):

$$egin{array}{ll} \circ & \mu_{f
ightarrow x}(x) = 0 \ \circ & \mu_{x
ightarrow f}(x) = \log f(x) \end{array}$$

• Caso recursivo:

$$egin{aligned} \mu_{f o x} &= \max_{x_1,\dots,x_M} \left[\log f(x,x_1,\dots,x_M) + \sum_{m\in ne(f_s)} \mu_{x_m o f}(x_m)
ight] \ \mu_{x o f}(x) &= \sum_{l\in ne(x)} \mu_{f_l o x}(x) \end{aligned}$$

Generalizaciones de suma-producto

• Consideramos un (semi-)anillo con dos operaciones:

```
+, ×: marginalización.
max, +: MAP.
~, +: forward-filter, backward-sample (para obtener muestras del posterior).
...
```

- Es lo que recientemente se ha denominado como semiring dynamic programming.
- Permite encontrar de forma natural algoritmos eficientes en más contextos aparte de PGMs.
- Por ejemplo: Belle, de Raedt, Semiring Programming: A Framework for Search, Inference and Learning (2016).

Inferencia en grafos generales

- El algoritmo *junction tree* generaliza el marco visto a grafos arbitrarios (con ciclos), pero no es eficiente en general.
- Otra alternativa es usar métodos aproximados.
- Loopy belief propagation propone usar el algoritmo suma producto aunque haya ciclos.
- La información fluye indefinidamente por los ciclos. En algunos casos se converge (no garantizado!).