# Monografía sobre Aprendizaje Automático

Nicolás Caro

Departamento de Ingeniería Matemática, Universidad de Chile, Santiago.

ncaro@dim.uchile.cl

## Contents

Preface	vii
Chapter 1. Modelos gráficos probabilísticos	1
Introducción	1
1.1. Modelos gráficos dirigidos	1
1.1.1. Naive Bayes	3
1.1.2. Regresión polinomial	3
1.1.3. Modelos gráficos dirigidos gaussianos	4
1.2. Independencia condicional en modelos gráficos dirigidos	5
1.2.1. d-separación	6
1.2.2. Markov blankets	7
1.3. Modelos gráficos no dirigidos	8
1.4. Inferencia exacta en modelos gráficos	8
Chapter 2. Métodos de inferencia aproximada	9
Inferencia Monte Carlo	9
Inferencia Markov chain Monte Carlo	9
Inferencia variacional	9
Chapter 3. Aprendizaje con Kernels	11
Chapter 4. Procesos Gaussianos	13
Chapter 5. Redes Neuronales	15
Bibliography	17
Index	10

### Preface

This document is a sample prepared to illustrate the use of the American Mathematical Society's IATEX document class amsbook and publication-specific variants of that class.

This is an example of an unnumbered chapter which can be used for a Preface or Foreword.

The purpose of this paper is to establish a relationship between an infinitedimensional Grassmannian and arbitrary algebraic vector bundles of any rank defined over an arbitrary complete irreducible algebraic curve, which generalizes the known connection between the Grassmannian and line bundles on algebraic curves.

Author Name

### Modelos gráficos probabilísticos

El machine learning fue un objeto de lujo, pero para nosotros es un artículo de primera necesidad: no podemos vivir sin machine learning.

#### Introducción

El eje central de este capitulo se basa en la búsqueda de una representación compacta, para distribuciones de probabilidad conjunta de la forma  $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$ . Esto, con la intención de realizar inferencia sobre variables y aprendizaje de parámetros de manera eficiente.

#### 1.1. Modelos gráficos dirigidos

Toda distribución de probabilidad conjunta  $p(x) = p(x_1, x_2, \dots x_v)$  se puede representar de la forma:

$$(1.1) p(\mathbf{x}) = p(x_1)p(x_2 \mid x_1)p(x_3 \mid x_1, x_2) \dots p(x_v \mid x_1, x_2, \dots, x_{v-1})$$

El problema con esta expresión es la dificultad computacional subyacente al cálculo de distribuciones condicionales de la forma  $p(x_t|x_1,...,x_{t-1})$  cuando el número de variables incidentes t aumenta.

No obstante, la representación (1.1) reduce su complejidad en presencia de independencia condicional.

En efecto, si se asume  $x_{t+1} \perp x_1, \ldots, x_{t-1} \mid x_t$ . Es decir, las observaciones futuras  $x_{t+1}$  son independientes del pasado  $x_1, \ldots, x_{t-1}$ , dado el estado presente  $x_t$ . La probabilidad conjunta se reduce entonces a:

(1.2) 
$$p(\mathbf{x}) = p(x_1) \prod_{t=2}^{v} p(x_t|x_1, \dots, x_{t-1}) = p(x_1) \prod_{t=2}^{v} p(x_t|x_{t-1})$$

De lo cual se obtiene una expresión más simple.

Modelar la independencia condicional entre las variables permite entonces reducir la complejidad de representación para la distribución conjunta. En particular, la elección tomada en (1.2) se conoce como **propiedad de Markov** de primer orden. En un contexto general, las relaciones de independencia condicional entre variables aleatorias de dimensión arbitraria, se modelan utilizando diagramas de independencia o **modelos gráficos**. Estos se valen de un grafo  $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})^{-1}$  para representar mediante nodos  $v = 1, \ldots, \mathcal{V}$  las variables aleatorias del modelo, mientras que la presencia o ausencia de aristas entre estos nodos, permite modelar las relaciones de dependencia condicional subyacentes.

NicoCaro: Poner algo profundo por el estilo. (?)

NicoCaro: Mejorar intro, añadir discusión sobre inferencia y aprendizaje.

NicoCaro: discusión sobre computabilidad. (?) (ref: Murphy, pg. 307)

NicoCaro:
propiedades
básicas del calculo
de probabilidades
(CI por ej.) al
apéndice.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Conjunto consistente de  $\mathcal{V} = \{1 \dots, V\}$  vértices (o nodos) y  $\mathcal{E} = \{(s,t) : s,t \in \mathcal{V}\}$  aristas.

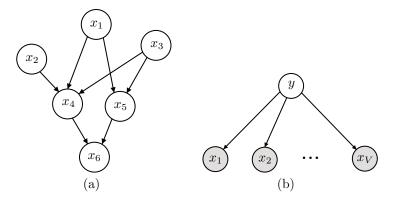


FIGURE 1. (a) Ejemplo de modelo gráfico dirigido. (b) Relaciones de dependencia condicional en el clasificador naive Bayes como un modelo gráfico dirigido, las variables aleatorias observadas se denotan por nodos grises.

Una red bayesiana o modelo gráfico dirigido es un modelo gráfico probabilístico, cuyo grafo subyacente es un grafo dirigido acíclico (DAG por sus siglas en ingles). Todo DAG posee un ordenamiento topológico, es decir, los nodos de cualquier DAG pueden ser numerados de manera tal, que todo nodo padre posea una numeración inferior a sus nodos hijos. Esta característica permite enriquecer la formulación de la propiedad de Markov (1.2), usando la estructura grafica como componente adicional. De esta forma, se puede formular la propiedad ordenada de Markov en modelos gráficos dirigidos:

$$(1.3) x_s \perp \boldsymbol{x}_{pred(s) \backslash pa(s)} \mid \boldsymbol{x}_{pa(s)}$$

Es decir, un nodo  $x_s$  es independiente de aquellos predecesores, menores en orden topológico, a sus padres  $x_{pred(s)\backslash pa(s)}$ , dados sus nodos padres  $x_{pa(s)}$ . De manera equivalente, un nodo  $x_s$  solo depende de sus padres inmediatos  $x_{pa(s)}$  y no de todos sus predecesores.

De esta forma, la probabilidad conjunta de un modelo gráfico dirigido, que cumple la propiedad ordenada de Markov, se puede descomponer de la forma:

(1.4) 
$$p(\boldsymbol{x}) = \prod_{t=1}^{V} p(x_t | \boldsymbol{x}_{pa(t)})$$

EXAMPLE 1.1 (Modelo grafico asociado a p(x)). Si se estudia un modelo probabilístico, donde la probabilidad conjunta de las variables estudiadas p(x) esta dada por:

$$(1.5) p(\mathbf{x}) = p(x_1)p(x_2)p(x_3)p(x_4|x_1, x_2, x_3)p(x_5|x_1, x_3)p(x_6|x_4, x_5)$$

Entonces, un grafo dirigido asociado a tal factorización es el de la figura 1(a). Para construir dicho grafo, se consideran las relaciones de independencia condicional en la factorización (1.5), para luego establecer aristas  $s \to t$  si la probabilidad condicional del nodo  $x_s$  depende de  $x_t$ . En este caso, no hay aristas incidentes hacia  $x_1, x_2$  ni  $x_3$ . Por otra parte, se deben crear aristas desde  $x_1, x_2$  y  $x_3$  hacia  $x_4$ , desde  $x_1$  y  $x_3$  hacia  $x_5$  y desde  $x_4, x_5$  hacia  $x_6$ .

NicoCaro: lema de ordenamiento topológico para DAG's en apéndice. En general, es posible reconstruir la probabilidad conjunta subyacente a un modelo gráfico probabilístico conociendo el grafo y haciendo el proceso inverso al descrito anteriormente.

Con el fin de explorar las posibilidades de este tipo de modelos e introducir conceptos referentes a la notación de estos, se pasan a estudiar los siguientes ejemplos:

**1.1.1.** Naive Bayes. Dado un problema de clasificación de vectores  $x = (x_1, \ldots, x_V)$  en C clases. Es posible modelar las variables de decisión  $x_t$  como condicionalmente independientes dada la categoría de clasificación:

$$(1.6) x_i \perp x_j \mid y = c, \ i \neq j$$

Si se usa este enfoque, se obtiene que la densidad condicional de clases toma la forma:

(1.7) 
$$p(\mathbf{x} | y = c) = \prod_{t=1}^{V} p(x_t | y = c)$$

Al parametrizar las distribuciones de densidad condicional, es posible obtener un modelo de clasificación conocido como **clasificador naive Bayes**. La estructura de las relaciones de independencia inducidas por (1.6) se pueden expresar según (1.7) y el modelo gráfico dirigido de la figura 1(b).

**1.1.2.** Regresión polinomial. <u>las variables aleatorias son el vector de co</u>eficientes polinomiales  $\boldsymbol{w}$  y los datos observados  $\boldsymbol{y}=(y_1,\ldots,y_N)^T$ . Adicionalmente, se parametriza el ruido del modelo a través de  $\sigma_{\varepsilon}^2$  y la varianza de la distribución a priori  $\sigma_{w}^2$ 0 el modelo a través de entrada se denotan por  $\boldsymbol{x}=(x_1,\ldots,x_N)^T$ .

NicoCaro: añadir intro significativa

La probabilidad conjunta de este modelo es el producto de la probabilidad a priori  $p(\mathbf{w})$  con las distribuciones condicionales  $p(y_i|\mathbf{w})$  para  $i=1,\ldots,N$ :

(1.8) 
$$p(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{w}) = p(\boldsymbol{w}) \prod_{i=1}^{N} p(y_i | \boldsymbol{w})$$

El grafo de tal factorización es similar al del clasificador naive Bayes 1(b). Para representarlo de manera compacta, se usa la notación de de placas o *plates*, en la figura 2(a) se muestra el grafo de (1.8) usando esta convención. Aquí N es la cantidad de nodos del modelo, de los cuales se muestra el representante  $y_i$ .

Si por otra parte, si se quiere estudiar la interacción de los parámetros en el modelo, es posible explicitarlos en la probabilidad conjunta para luego agregarlos al grafo:

(1.9) 
$$p(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{w} | \boldsymbol{x}, \sigma_{\varepsilon}^{2}, \sigma_{w}^{2}) = p(\boldsymbol{w} | \sigma_{w}^{2}) \prod_{i=1}^{N} p(y_{i} | \boldsymbol{w}, x_{i}, \sigma_{\varepsilon}^{2})$$

La figura 2(b) muestra el grafo correspondiente a (1.9). Por convención, las variables deterministas se incluyen en el grafo como círculos pequeños, mientras que las variables aleatorias observadas se muestran como nodos grises, los nodos incoloros representan variables latentes o no observadas, finalmente las aristas, al

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Consider}$ ándose una distribución a priori, gaussiana y esférica sobre  $\boldsymbol{w}.$ 

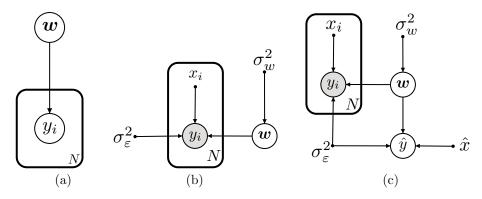


FIGURE 2. Modelo grafico dirigido para regresión polinomial usando notación de placas (o *plates*). En (a) se muestra el grafo correspondiente a (1.8). En (b) se añaden los parámetros deterministas y las variables aleatorias observadas. En (c) se añaden datos de entrada y predicciones.

igual que en los ejemplos anteriores, representan la dependencia condicional en la factorización de la probabilidad conjunta.

Para realizar predicciones en datos nuevos  $\hat{x}$ , se desea encontrar la distribución de probabilidad para  $\hat{y}$  condicionada a la información que ya se posee. Esta corresponde a:

$$(1.10) p(\hat{y}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{w} | \hat{x}, \boldsymbol{x}, \sigma_w^2, \sigma_\varepsilon^2) = \left[ \prod_{i=1}^N p(y_i | x_i, \boldsymbol{w}, \sigma_\varepsilon^2) \right] p(\boldsymbol{w} | \sigma_w^2) p(\hat{y} | \hat{x}, \boldsymbol{w}, \sigma_\varepsilon^2)$$

Finalmente, se deduce la distribución predictiva para  $\hat{y}$ :

(1.11) 
$$p(\hat{y}|\hat{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}, \sigma_w^2, \sigma_\varepsilon^2) \propto \int p(\hat{y}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{w}|\hat{x}, \boldsymbol{x}, \sigma_w^2, \sigma_\varepsilon^2) d\boldsymbol{w}$$

El modelo gráfico dirigido que encapsula estas últimas ecuaciones se aprecia en 2(c).

1.1.3. Modelos gráficos dirigidos gaussianos. Sea  $\mathcal{M}$  un modelo grafico dirigido, en el cual todas las variables son reales y sus distribuciones de probabilidad condicional son lineal-gaussianas:

(1.12) 
$$p(x_t|\mathbf{x}_{pa(t)}) = \mathcal{N}(x_t|\mu_t + \mathbf{w}_t^T \mathbf{x}_{pa(t)}, \sigma_t^2)$$

La estructura de  $\mathcal M$  permite modelar la probabilidad conjunta de las variables del modelo en la forma:

(1.13) 
$$p(\boldsymbol{x}|\mathcal{M}) = \prod_{t=1}^{V} p(x_t|\boldsymbol{x}_{pa(t)}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

Lo cual se conoce como red bayesiana gaussiana. Para este tipo de modelos, es posible inferir  $\mu$  y  $\Sigma$ . En efecto, según (1.13):

(1.14) 
$$\log p(\boldsymbol{x}|\mathcal{M}) = -\sum_{t=1}^{V} \frac{1}{2\sigma_t^2} \left( x_t - \sum_{s \in pa(t)} w_{ts} x_s - \mu_t \right)^2 + K$$

NicoCaro: ver si es necesario cambiar el formato de los 3 grafos juntos. (muy pegados?) Donde K representa una constante independiente de  $\boldsymbol{x}$ . Al ser la logprobabilidad conjunta, cuadrática en las componentes de  $\boldsymbol{x}$ , se obtiene que efectivamente la probabilidad conjunta es normal multivariada para  $\boldsymbol{x}$  en (1.13). Para estimar la media, se observa en primera instancia:

(1.15) 
$$x_t = \sum_{s \in pa(t)} w_{ts} \mathbb{E}[x_s] + \mu_t + \sigma_t \varepsilon_t$$

Donde  $\varepsilon_t \sim \mathcal{N}(0,1)$  y  $\mathbb{E}[\varepsilon_t, \varepsilon_s] = 0$ , para  $s \neq t$ . De esto se deduce:

(1.16) 
$$\mathbb{E}[x_t] = \sum_{s \in pa(t)} w_{ts} \mathbb{E}[x_s] + \mu_t$$

Es posible entonces, encontrar las componentes de  $\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}[\boldsymbol{x}] = (\mathbb{E}[x_1], \dots, \mathbb{E}[x_V])^T$  utilizando la estructura gráfica dirigida de  $\mathcal{M}$  (y por tanto su ordenamiento topológico). Para ello, se comienza calculando  $\mathbb{E}[x_1]$  para luego continuar de manera recursiva según la numeración de los nodos.

Similarmente, es posible calcular el elemento  $\Sigma_{st}$  de la matriz de covarianza, observando:

(1.17) 
$$\operatorname{cov}(x_{s}, x_{t}) = \mathbb{E}[(x_{s} - \mathbb{E}[x_{s}])(x_{t} - \mathbb{E}[x_{t}])]$$

$$= \left[ (x_{s} - \mathbb{E}[x_{s}]) \left\{ \sum_{k \in pa(x_{t})} w_{tk}(x_{k} - \mathbb{E}[x_{k}]) + \sigma_{t} \varepsilon_{t} \right\} \right]$$

$$= \sum_{k \in pa(x_{t})} w_{tk} \operatorname{cov}[x_{s}, x_{t}] + \sigma_{t}^{2} \mathbf{I}_{st}$$

De donde al igual que en (1.16), se calculan los elementos de  $\Sigma$  recursivamente. Finalmente, se puede extender el modelo inducido por (1.12) a uno donde los nodos del modelo gráfico representen variables aleatorias gaussianas multivariantes. Para esto, se reescribe la distribución de probabilidad condicional para el nodo  $x_t$  en la forma:

(1.18) 
$$p(\boldsymbol{x}_t \mid pa(\boldsymbol{x}_t)) = \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x}_t \mid \sum_{s \in pa(\boldsymbol{x}_t)} \boldsymbol{W}_{ts} \boldsymbol{x}_s + \boldsymbol{\mu}_t, \boldsymbol{\Sigma}_t\right)$$

Donde  $W_{ts}$  es una matriz de pesos entre los vectores de cada nodo.

#### 1.2. Independencia condicional en modelos gráficos dirigidos

Como se mencionó anteriormente, los modelos gráficos encapsulan las relaciones de independencia condicional entre las variables aleatorias del fenómeno que se modela. En esta sección se estudian las propiedades de los modelos gráficos dirigidos en cuanto sus propiedades

En un grafo G, se escribe  $x_i \perp_G x_j | x_k$  si el nodo  $x_i$  es independiente de  $x_j$  dado  $x_k$ . Se denota por I(G) al conjunto de todas las relaciones de independencia condicional codificadas en el grafo G.

DEFINITION 1.2 (Diagrama de independencia). Sea  $p(\cdot)$  una distribución de probabilidad. Se dice que un grafo G es un diagrama de independencia o I-map para p si y solo si  $I(G) \subseteq I(p)$ . Donde I(p) es el conjunto de todas las relaciones de independencia condicional ciertas para las variables de p.

NicoCaro: terminar intro De la definición anterior, se deduce que un grafo G es un diagrama de independencia para la distribución de probabilidad p, si este no contiene más relaciones de independencia condicional que las permitidas por p. De esta forma, toda distribución de probabilidad  $p(\boldsymbol{x})$ , donde  $\boldsymbol{x}=(x_1,...,x_V)^T$ , posee al menos un diagrama de independencia. En efecto, si se considera un grafo G con nodos  $\mathcal{V}=\{x_1,...,x_V\}$  completamente conectados, entonces G es un diagrama de independencia para p pues no presenta aristas faltantes y por tanto se condiciona en todas las variables.

De la discusión anterior, tiene sentido hablar de un diagrama de independencia minimal G para p, es decir, un grafo G, tal que si G' es otro diagrama de independencia para p que cumple  $G' \subseteq G$ , entonces G' = G.

Finalmente, tal representación, permite extraer de su estructura gráfica, relaciones no triviales de independencia condicional, entre las variables de importancia. En el caso de un modelo gráfico dirigido, la noción de separación dirigida o d-separación facilita dicha tarea.

- **1.2.1.** d-separación. Se dice que un camino no dirigido P esta separado de manera dirigida o d-separado por un conjunto de nodos E, si y solo si, se cumple alguna de las siguiente condiciones:
  - (1) P contiene una cadena,  $s \to e \to t$ , donde  $e \in E$ .
  - (2) P contiene una estructura  $s \leftarrow e \rightarrow t$ , donde  $e \in E$ .
  - (3) P contiene una estructura  $s \to e \leftarrow t$ , donde  $e \notin E$  o e **no** es descendiente de algún elemento de E.

Se dice que un conjunto de nodos A esta d-separado de un conjunto de nodos B, dado un conjunto de nodos E, si y solo si, todo camino no dirigido desde cada nodo de A a cada nodo de B esta d-separado por E.

En un grafo acíclico dirigido G, se aprecia la siguiente propiedad:

Para comprender las propiedades anteriores, se analizan los siguientes ejemplos:

• Sea  $x \to y \to z$  una cadena, tal grafo codifica la siguiente probabilidad conjunta:

$$p(x, y, z) = p(x)p(y|x)p(z|y)$$

Usando la propiedad (1), se puede deducir que  $x \perp z|y$ . Esto se comprueba pues:

$$p(x,z|y) = \frac{p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x)p(z|y)}{p(y)} = \frac{p(x,y)p(z|y)}{p(y)} = p(x|y)p(z|y)$$

• Sea la estructura  $x \leftarrow y \rightarrow z$ , según la propiedad (2),  $x \perp z | y$ . En efecto,

$$p(x,z|y) = \frac{p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{p(y)p(x|y)p(z|y)}{p(y)} = p(x|y)p(z|y)$$

• Sea finalmente la estructura  $x \to y \leftarrow z$ , en este caso  $x \not\perp z | y$ :

$$p(x,z|y) = \frac{p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{p(x)p(y|x,z)p(z)}{p(y)} \neq p(x|y)p(z|y)$$

Es por tal motivo que en la propiedad (3), se requiere en este tipo de estructuras, que no existan nodos, ni descendientes de nodos de la familia condicionante E.

En el último caso, se puede comprobar que los nodos x e y son marginalmente independientes entre si, es decir, p(x,z) = p(x)p(z). Sin embargo, al condicionar ambos nodos por y, se vuelven dependientes, este efecto se denomina **paradoja de Berkson**. Finalmente, un modelo gráfico probabilístico que verifica la equivalencia (??) se dice que cumple la **propiedad global de Markov**.

#### 1.2.2. Markov blankets. De la d-separación es posible concluir:

$$(1.19) x_t \perp \boldsymbol{x}_{nd(t) \backslash pa(t)} | \boldsymbol{x}_{pa(t)} |$$

Donde nd(t) son los **no-descendientes** del nodo  $x_t$  <sup>3</sup>. De esta forma, es posible concluir que en 1(a)  $x_4 \perp x_5 | x_1, x_2, x_3$ , pues en efecto,  $nd(4) \setminus pa(4) = x_5$  y  $pa(4) = x_1, x_2, x_3$ . La ecuación (1.19) se conoce como **propiedad dirigida local de Markov**.

En especial, dado que  $pred(t) \subseteq nd(t)$  se deriva la **propiedad ordenada de Markov**, ya presentada en (1.3). Sorprendentemente, estas tres propiedades son equivalentes.

Por otra parte, para cada nodo  $x_t$  es posible extraer el conjunto de nodos que lo separan del resto del grafo, es decir, se puede para cada nodo  $x_t$ , obtener el conjunto de todas las variables aleatorias que lo vuelven condicionalmente independiente a los demás nodos del modelo. El conjunto antes descrito se denomina **Markov** blanket y se denota por mb(t) este conjunto de nodos corresponde a:

$$(1.20) mb(t) := ch(t) \cup pa(t) \cup copa(t)$$

Donde ch(t) son los nodos hijos de  $x_t$ , de manera análoga pa(t) son nodos padres y copa(t) sus copadres <sup>4</sup>. En la figura 1(a) se tiene por ejemplo  $mb(5) = \{x_6, x_1, x_3, x_4\}$ . Según la propiedad global de Markov, la presencia de los nodos copadres no parece ser necesaria en primera instancia (la dependencia condicional debería recaer unicamente en los nodos padres), sin embargo, al definir  $\mathbf{x}_{-t}$  como el conjunto de nodos distintos a  $x_t$ , es posible observar que la probabilidad conjunta adquiere la forma  $p(\mathbf{x}) = p(x_t, \mathbf{x}_{-t})$ . De donde, al marginalizar sobre el nodo  $x_t$ , se obtiene que  $p(\mathbf{x}_{-t})$  contiene sólo a aquellos nodos del modelo en los que la variable  $x_t$  no aparece como argumento, ni como condicionante (dada la factorización de la probabilidad conjunta codificada en el grafo). Lo anterior implica que en  $p(x_t|\mathbf{x}_{-t}) = p(\mathbf{x})/p(\mathbf{x}_{-t})$  solo se podrán encontrar probabilidades condicionales donde  $x_t$  sea el argumento, lo que expresa con  $p(x_t|\mathbf{x}_{pa(t)})$ , o donde sea variable condicionante, es decir, sea padre o copadre de algún otro nodo. Se deduce:

(1.21) 
$$p(x_t|\boldsymbol{x}_{-t}) \propto p(x_t|\boldsymbol{x}_{pa(t)}) \prod_{s \in ch(t)} p(x_s|\boldsymbol{x}_{pa(s)})$$

La expresión (1.21) se conoce como condicional completa del nodo  $x_t$ .

NicoCaro: revisar demostración Koller, Friedman 2009

 $<sup>^{3}</sup>nd(t) = \mathcal{V} \setminus \{t \cup desc(t)\}$ , donde desc(t) son los descendientes del nodo  $x_t$ , es decir, aquellos nodos que provienen de un camino dirigido con origen en  $x_t$ .

 $<sup>^{4}</sup>$ nodos que comparten hijos con  $x_{t}$ 

#### 1.3. Modelos gráficos no dirigidos

Los modelos gráficos dirigidos presentan una alternativa de modelación modular e interpretable. Sin embargo, su estructura los hace demasiado rígidos en aplicaciones donde las variables interactúan de manera simétrica (datos espaciales y relacionales por ejemplo).

Como alternativa, se encuentran los **modelos gráficos no dirigidos**, los cuales, como indica su nombre, no requieren el uso de aristas dirigidas y por tanto, encapsulan de manera natural la simetría que pierden los modelos dirigidos.

Para ilustrar la Introducción anterior, las figuras 3(a) y 3(a) muestran los markov blankets de un nodo para el caso dirigido y no dirigido en un arreglo 2d, común en aplicaciones referentes a imágenes y datos espaciales.

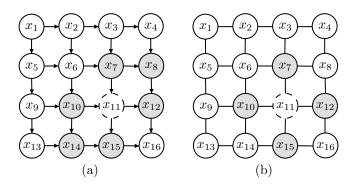


FIGURE 3. Modelo gráfico dirigido (izquierda) contrapuesto a uno no dirigido (derecha). En (a) el markov blanket de  $x_{11}$  añade a  $x_8$  y  $x_{14}$  a sus vecinos inmediatos, mientras excluye a  $x_6$  y  $x_16$  en aplicaciones basadas en imágenes, este comportamiento puede no ser el deseado. Por otra parte en (b) el nodo  $x_{11}$  esta separado del resto solo por sus vecinos inmediatos.

#### 1.4. Inferencia exacta en modelos gráficos

## Métodos de inferencia aproximada

En este recinto se prohíbe dormir Entrenar, validar, testear Armonizar, huir, interceptar.

Inferencia Monte Carlo
Inferencia Markov chain Monte Carlo
Inferencia variacional

NicoCaro: Poner algo profundo por el estilo(?)

FT: estoy de acuerdo

## Aprendizaje con Kernels

Alza del hiperparametro origina nueva alza del hiperparametro Alza de los errores
Provoca instantáneamente la duplicación de los errores
Alza de las métricas
Origina alza de las métricas.

NicoCaro: Poner algo profundo por el estilo. (?)

## Procesos Gaussianos

El sobreajuste es al modelo Lo que los cocodrilos a los ángeles.

NicoCaro: Poner algo profundo por el estilo. (?)

## Redes Neuronales

Qué es el deep learning: Un comerciante en datos y códigos? Un sacerdote que no cree en nada?

> NicoCaro: Poner algo profundo por el estilo. (?)

## Bibliography

- [A] T. Aoki, Calcul exponentiel des opérateurs microdifferentiels d'ordre infini. I, Ann. Inst. Fourier (Grenoble) 33 (1983), 227–250.
- [B] R. Brown, On a conjecture of Dirichlet, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1993.
- [D] R. A. DeVore, Approximation of functions, Proc. Sympos. Appl. Math., vol. 36, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986, pp. 34–56.

# Index

Absorbing barrier, 4	Helmhotz decomposition, 214
Adjoint partial differential operator, 20	Hilbert-Schmidt expansion theorem, 120
A-harmonic function, 16, 182	T 11 1 1 1 1 1 2 2
$A^*$ -harmonic function, 182	Initial-boundary value problem, 22
	Initial condition, 22
Boundary condition, 20, 22	Invariant measure (for the fundamental
Dirichlet, 15	solution), 167
Neumann, 16	Maximum principle
Boundary value problem	for A-harmonic functions, 183
the first, 16	for parabolic differential equations, 65
the second, 16 the third, 16	strong, 83
Bounded set, 19	
Bounded Set, 19	Neumann
Diffusion	boundary condition, 16
coefficient, 1	boundary value problem, 16
equation, 3, 23	function, 179
Dirichlet	One-parameter semigroup, 113
boundary condition, 15	3 47
boundary value problem, 16	Parabolic initial-boundary value problem,
	22
Elliptic	Partial differential equation
boundary value problem, 14, 158	of elliptic type, 14
partial differential equation, 14	of parabolic type, 22
partial differential operator, 19	Positive definite kernel, 121
Fick's law, 1	Reflecting barrier, 4
Flux, 1	Regular (set), 19
Formally adjoint partial differential	Removable isolated singularity, 191
operator, 20	Robin problem, 16
Fundamental solution	,
conceptional explanation, 12	Semigroup property (of fundamental
general definition, 23	solution), 64, 113
temporally homogeneous case, 64, 112	Separation of variables, 131
	Solenoidal (vector field), 209
Genuine solution, 196	Strong maximum principle, 83
Green function, 156	Symmetry (of fundamental solution), 64,
Green's formula, 21	112
**	Temporally homogeneous, 111
Harnack theorems	Tomporony nomogonoous, 111
first theorem, 185	Vector field with potential, 209
inequality, 186	*** 1 1
lemma, 186	Weak solution
second theorem, 187	of elliptic equations, 195
third theorem, 187	of parabolic equation, 196

20 INDEX

associated with a boundary condition,  $204\,$