机器学习

第 8 章概率图模型-Probabilistic Graphical Models

欧阳毅

浙江工商大学
管理工程与电子商务学院

2023

基础问题

- 表示 (Representation)
  - 如何获取模型的不确定度
  - 如何对我们的领域知识进行编码
- 学习（Learning)
  - 怎样的模型对于我们的数据是有效的?

$$M = \arg\max_{M \in \mathcal{M}} F(D; M)$$

- 推断（Inference)
  - 在给定一定的数据后，如何根据已有的知识对问题进行解答

$$P(X_i|D; M)$$

  - 如何对我们的领域知识进行编码

基础问题

- 表示 (Representation)
  - 什么是联合概率分布?

$$P(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6)$$

  - 若 X_i 是 0-1 取值的离散随机变量，他们有多少种状态?
  - 它们是否都需要被表示?
- 学习（Learning)
  - 我们如何获取这些概率?
  - 根据这些概率值和变量之间的关系，我们如何建立领域知识
- 推断（Inference)
  - 若有不可见观察变量，如何计算隐变量的条件概率分布?

贝叶斯理论 I

后验概率　　或然率 Likelihood

先验概率 Prior

$$p(\theta|x) = \frac{p(x|\theta)p(\theta)}{\sum_{\theta\in\Theta} p(x|\theta)p(\theta)}$$

$$p(\theta|x) \propto p(x|\theta)p(\theta)$$

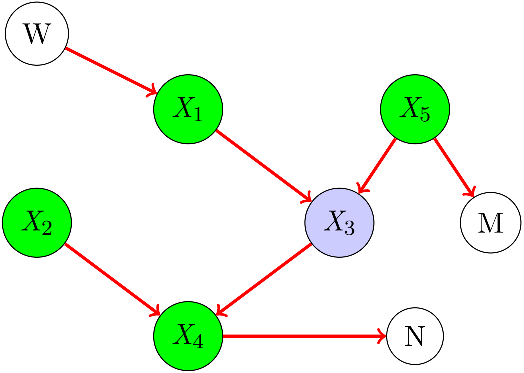
两类图模型 I

GM = Multivariate Statistics + Structure

- 有向图给出了因果关系（如：贝叶斯网络）
- 无向图给出了随机变量之间的联系（如：MRF）

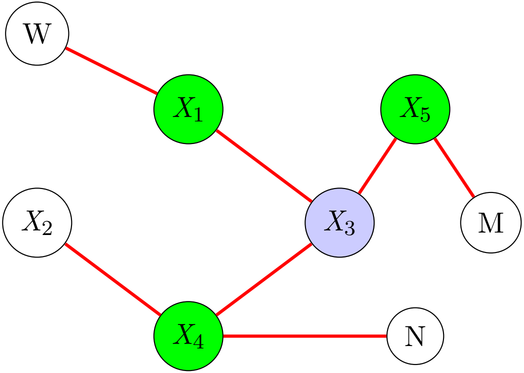
有向图 I

- 一个节点相对于马尔可夫毯（Markov blanket）之外的节点是条件独立
    - Parent
    - Child
    - Children's Co-parent



无向图 I

- 一个节点相对于直接相邻之外的节点是条件独立
- 通常使用势能函数 (potential) 和团 (cliques) 对联合概率进行建模



贝叶斯网络 I

- BN 是一种有向图结构，它的节点表示随机变量，边表示一个变量对另一个的影响。
- BN 提供了一种对联合概率进行因式分解的计算方法
- 它利用一组条件独立假设提供了一种完备的分布表示

因式分解定理 I

- 给定一个有向无环图 G，概率分布的形式与 G 中给定节点双亲的因子保持一致

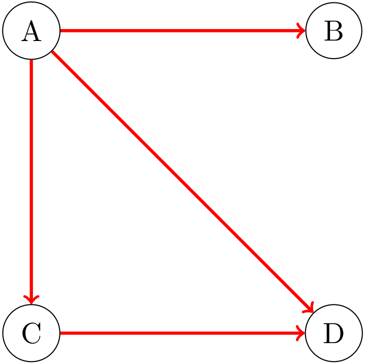
$$P(X) = \prod_{i=1,n} P(X_i|X_{pi})$$

- 也就是说联合概率可写成如下形式:

$$P(x_1, ..., x_m) = \prod_{i=1}^{m} p(x_i|x_{pi}))$$

我们说概率分布 P 可关于图 G 因式分解

因式分解定理 I



G1

$$P(A, B, C, D) = P(A)P(B|A)P(C|A)P(D|A, C)$$

我们说概率分布 P 可以关于 G1 因式分解

表示 Representation

定义 (无向图模型)

一个无向图模型由一个定义在无向图 H 上的概率分布 $P(X_1, .., X_n)$, 和一组与 H 中团 (maximal clique) 相连的正势能函数 (positive potential functions)Ψ_c 表示。
s.t.

$$P(X_1, ..., X_n) = \frac{1}{Z}\prod_{c \in C}\Psi_c(X_c) \qquad (A \quad Gibbs \quad distribution)$$

其中 Z 为划分函数:

$$Z = \sum_{X_1,...,X_n}\prod_{c \in C}\Psi_c(X_c)$$

势能函数可以理解为一种连续函数，它的参数是与随机变量在图结构中关联的反映

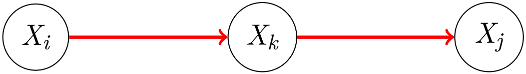
目录

贝叶斯网络模型 I

在一个贝叶斯网络中，任意一条由三个变量构成的图 X_i, X_k, X_j，可能存在下面三种连接方式：

- 1）串行连接（serial connection）或链（chain），如图所示。根据公式，图相应的联合分布为

$$P(X_i, X_k, X_j) = P(X_i)P(X_k|X_i)P(X_j|X_k) \tag{1}$$



贝叶斯网络模型 II

根据“条件局部独立性”可以得出这样一个结论：给定节点 k 时，节点 j 和其非后代节点 i 关于节点 j 的父节点 k 条件独立。证明：

$$
\begin{aligned}
P(X_i, X_j|X_k) &= \frac{P(X_i, X_j, X_k)}{P(X_k)} &(2)\\
&= \frac{P(X_i)P(X_k|X_i)P(X_j|X_k)}{P(X_k)} &(3)\\
&= \frac{P(X_i, X_k)P(X_j|X_k)}{P(X_k)} &(4)\\
&= P(X_i|X_k)P(X_j|X_k) &(5)
\end{aligned}
$$

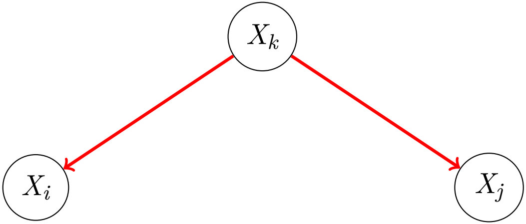
$$X_i \longrightarrow X_k \longrightarrow X_j$$

即：在给定 X_k 的条件下，X_i, X_j 被阻断是独立的:head-to-tail

贝叶斯网络模型 III

- 2）发散连接（diverging connection）或叉口（fork），表示 X_i 和 X_j 有共同的原因，相应的联合分布为

$$P(X_i, X_k, X_j) = P(X_k)P(X_i|X_k)P(X_j|X_k) \tag{6}$$



贝叶斯网络模型 IV

给定节点 k 时，节点 j 和其非后代节点 i 关于节点 i 的父节点 k 条件独立。

$$
\begin{aligned}
P(X_i, X_j|X_k) &= \frac{P(X_i, X_j, X_k)}{P(X_k)} && (7)\\
&= \frac{P(X_k)P(X_i|X_k)P(X_j|X_k)}{P(X_k)} && (8)\\
&= \frac{P(X_i, X_k)P(X_j|X_k)}{P(X_k)} && (9)\\
&= P(X_i|X_k)P(X_j|X_k) && (10)
\end{aligned}
$$

这说明，在发散连接的情况下，$X_i \perp X_j | X_k$。
即：在给定 X_k 的条件下，X_i, X_j 被阻断是独立的:tail-to-tail

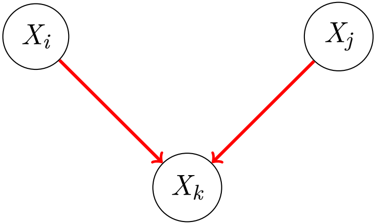
贝叶斯网络模型 V

- 3）收敛连接（v-structure），相应的联合分布为

$$P(X_i, X_k, X_j) = P(X_i)P(X_j)P(X_k|X_i, X_j) \tag{11}$$

节点 i 和节点 j 是先验独立的

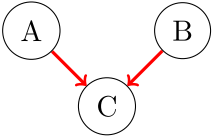
$$P(X_i, X_j) = P(X_i)P(X_j) \tag{12}$$



但给定 X_k 后，X_i, X_j 并不独立。在 X_k 未知的条件下，X_i, X_j 被阻断是独立的

V-structure

添加条件 C 可能损失独立性



A	B	C	Prob
0	0	0	0.25
0	1	1	0.25
1	0	1	0.25
1	1	1	0.25

- 这个图也可以用来解释上面这句话。在图中 A 和 B 相互独立，如果给定 C 的值，那么 A 和 B 之间不独立。
- 给定 C=1，$P(A=1|C)=2/3$
- 但是 $P(A=1|C)$ 的大小和 B 的取值有关，
  如果 B 取 0，那么 $P(A=1|C)=1$，
  如果 B 取 1，$P(A=1|C)=1/2$，此时 A 和 B 不独立。

目录

性质分析

研究哪些问题?

- 因果关系的先验信息
- 模块间的先验信息

定义 (Local Structures & Independencies)

- Common parent: Fixing B decouples A and C
  在给定 B 以后，A 和 C 是相互独立的
- Cascade: Knowing B decouples A and C
  在给定 B 以后，A 并未提供额外的预测信息给 C
- V-structure: Knowing C couples A and B
  在给定 C 后，A 和 B 并不独立，可相互影响

I-maps

定义 (I(P))

令 P 是在随机变量 X 上的分布. 我们定义独立性集合 $I(P)$ 为具有 $(X \perp Y | Z)$ 形式的独立断言集合.

定义 (I-maps)

图中任意的对象 K 同一组与独立性集合 $I(K)$ 相联系。若 $I(K) \subseteq I$ 我们说 K 是一个独立集 I 的 I-map.

若 G 是独立集 I（P）的一个 I-map，我们可以说 G 是 P 的一个 I-map

关于 I-map 的性质

- G 是 P 的一个 I-map, 是一个 G 不会误导对 P 独立性分析的必要条件
- 任何 G 的断言必在 P 中保持，相反不成立，P 可能会有另外的独立性，其并未在 G 中反映。

Local Markov assumptions

定义 (G)

一个贝叶斯网络 (BN) 结构 G 是一个有向无环图 (DAG), 它的节点表示随机变量 $X_1, ..., X_n$.

定义 (local conditional independence assumptions $I_l(G)$)

令 Pa_{X_i} 表示 X 在 G 中的双亲节点集合，$ND(X_I)$ 表示图中非 X_i 子孙的集合，用 $I_l(G)$ 表示局部条件独立性假设集合

$$I_l(G) \triangleq \{X_i \perp ND(X_i) | Pa_{X_i} : \forall i\}$$

换句话说，在给定 X_i 其双亲的前提，节点 X_i 与其非子孙节点下独立

Active trail 有效迹

- Causal trail $X \to Z \to Y$
  :active if and only if Z is not observed.
- Evidential trail $X \leftarrow Z \leftarrow Y$
  : active if and only if Z is not observed.
- Common cause $X \leftarrow Z \to Y$
  :active if and only if Z is not observed.
- Common effect $X \to Z \leftarrow Y$
  :active if and only if either Z or one of Z’ s descendants is observed

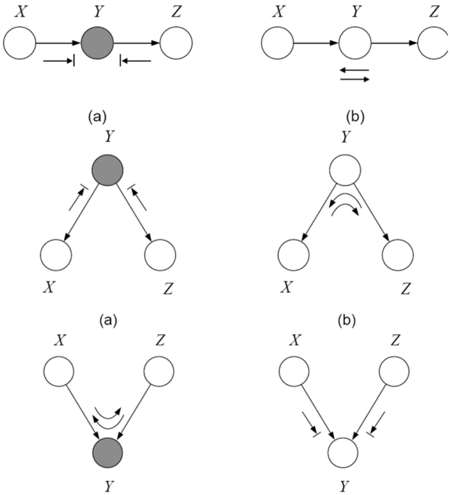
Active trail 有效迹

表: 给定证据 Z 的前提，什么情况 X 和 Y 存在相互影响?

情况 i	$W \notin Z$	$W \in Z$
$X \rightarrow Y$	$\surd$	$\surd$
$Y \rightarrow X$	$\surd$	$\surd$
$X \rightarrow W \rightarrow Y$	$\surd$	$\times$
$X \leftarrow W \leftarrow Y$	$\surd$	$\times$
$X \leftarrow W \rightarrow Y$	$\surd$	$\times$
$X \rightarrow W \leftarrow Y$	$\times$	$\surd$

$\times$ 处表示 X, Y 是独立的
$\surd$ 处表示 X, Y 不是独立的

从信息流动的角度对三种结构进行分析



图分割准则

贝叶斯网络的 D-separation 图分割准则（D 是指有向图）

定义 (D-separation)

若在 G 中，给定 Z 条件下，X 和 Y 间不存在有效迹，X 和 Y 在给定 Z 下是 D-separated（条件独立）

定义 (G)

$I(G)$= 包含了存在于 D-separation 中所有的独立性断言

$$I(G) = \{(X \perp Y | Z) : dsep_G(X, Y|Z)\}$$

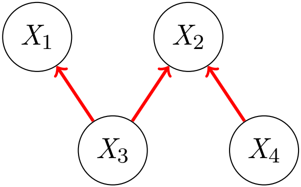
定义 (局部条件独行性假设 $I_l(G)$)

令 Pa_{X_i} 表示 X 在 G 中的双亲节点集合，$ND(X_I)$ 表示图中非 X_i 子孙的集合，用 $I_l(G)$ 表示局部条件独立性假设集合

$$I_l(G) \triangleq \{X_i \perp ND(X_i) | Pa_{X_i} : \forall i\}$$

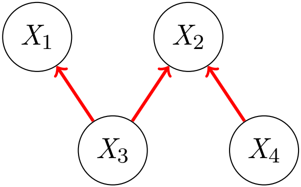
换句话说，在给定 X_i 其双亲的前提，节点 X_i 与其非子孙节点下独立

BN 练习



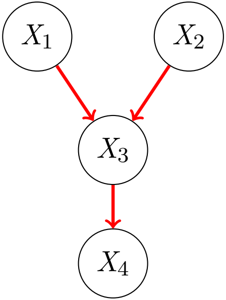
- 给出上图的 I（G）表示
- $I(G) = \{X_3 \perp X_4, X_1 \perp X_2 | X_3, X_1, X_4 | X_3\}$

BN 练习



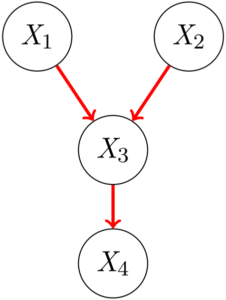
- 给出上图的 I（G）表示
- $I(G) = \{X_3 \perp X_4, X_1 \perp X_2 | X_3, X_1, X_4 | X_3\}$

BN 练习



- 给出上图的 I（G）表示
- $I(G) = \{X_1 \perp X_2, X_1 \perp X_4 | X_3, X_2, X_4 | X_3\}$

BN 练习



- 给出上图的 I（G）表示
- $I(G) = \{X_1 \perp X_2, X_1 \perp X_4 | X_3, X_2, X_4 | X_3\}$

目录

等价定理

定义

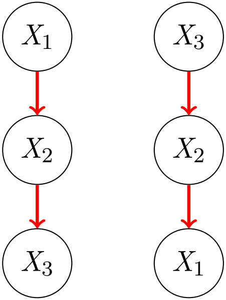
给定图 G，令 D_1 表示满足 $I(G)$ 的所有分布族，D_2 表示根据 G 因式分解的所有分布族，

$$P(X) = \prod_{i=1:d} P(X_i | X_{\pi_i})$$

则有：$D_1 \equiv D_2$

等价定理

不同的 BN 图可能是等价的，只要他们具有相同的条件独立性断言，如图：



$$X_1 \perp X_3 | X2$$

I-等价

定义 (I-equivalence)

在随机变量 X 上的，两个 BN 图 G1,G2，若 $I(G1) = I(G2)$, 则称为 I-等价

这提供了对 P 进行因式分解的途径

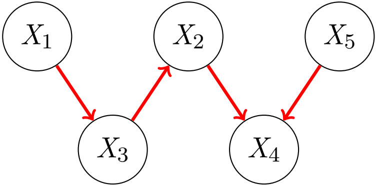
定义 (skeleton)

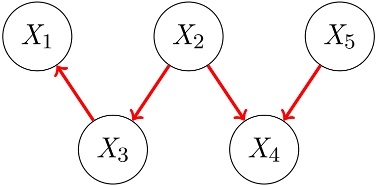
BN 图 G 的骨架为定义在 V 集上的一个无向图，它包含了原 G 图中 <X,Y> 的边作为 (X,Y)

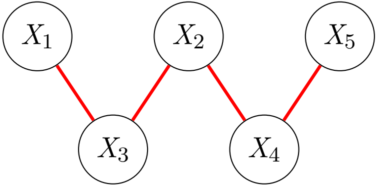
Detecting I-等价

定理

令 $G1$ 和 $G2$ 为两个在 V 上的图。若 $G1$ 和 $G2$ 有相同的骨架，并且 v-结构相同，则它们是 I-等价







极小 I-map

定义 (极小 I-map)

一个有向无环图 G 对于分布 P 是一个极小 I-map ，首先它是 P 的 I-map 映射, 并且若删除任意一个 G 中的边，都不再是 I-map.

一个分布可能存在多个极小 I-maps

P-maps

定义 (P-maps)

在一个有向无环图 G 和分布 P 中，若 $I(P) = I(G)$ ，则 G 对于分布 P 是一个 P-maps 映射 (perfect map),

定理

并不是每个分布都有 P-映射

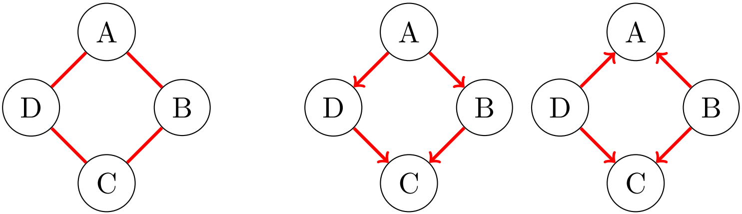
证明.

给个反例，若模型具有有以下独立性:

$$A \perp C | \{B, D\}, and \quad B \perp D | \{A, C\}$$

我们找不出贝叶斯网络的表现形式 $\square$

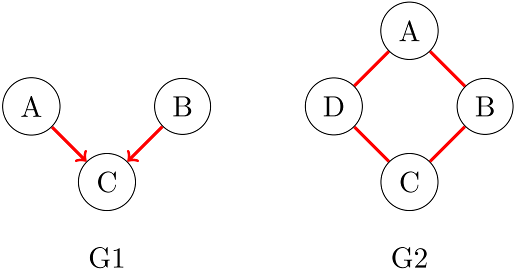
例子



Markov Network BN1 BN2

- MN:$\{A \perp C | \{B, D\}, B \perp D | \{A, C\}\}$
- BN1 中:$A \perp C | \{B, D\}$,$B \perp D | A$
- BN2 中:$A \perp C | \{B, D\}$, $B \perp D$
- This MN does not have a P-map as BN

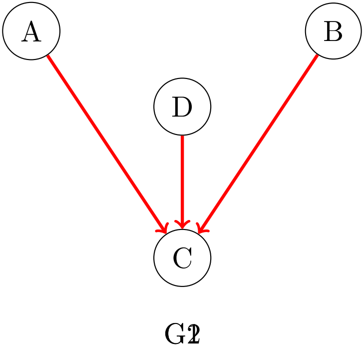
例子

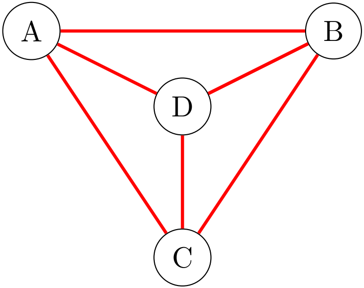


- 若一个分布的条件独立性断言为:$\{A \perp B, \neg(A \perp B|C)\}$ 那么 G1 就是该分布的 P-map, 对于该分布，没有无向图作为 P-map
- G2 中的条件独立性断言为:$\neg(A \perp B), C \perp D|\{A, B\}, A \perp B|\{C, D\}$，没有有向图作为 P-map

有向图转换为无向图

- Moralization 方法，保证添加了最少的连接。
- 1. 若一个节点只有一个 parent，那么 parent 到它的有向箭头可去掉
- 2. 若一个节点有多个双亲节点，则要把每个直接双亲组两两连接





目录

无向图模型

- 成对关系（非因果）
- 可构建模型，对图中结构进行评价，但不能显式产生样本

无向图模型

定义 (无向图模型)

一个无向图模型由一个定义在无向图 H 上的概率分布 $P(X_1, .., X_n)$, 和一组与 H 中团 (maximal clique) 相连的正势能函数 (positive potential functions)Ψ_c 表示。
s.t.

$$P(X_1, ..., X_n) = \frac{1}{Z}\prod_{c\in C}\Psi_c(X_c) \qquad (A \quad Gibbs \quad distribution)$$

其中 Z 为划分函数:

$$Z = \sum_{X_1,...,X_n}\prod_{c\in C}\Psi_c(X_c)$$

势能函数可以理解为一种连续函数，它的参数是与随机变量在图结构中关联的反映

目录

Global Markov Independencies

- 令 H 为一个无向图

定义

$sep_H(A; C|B)$ ：表示 B 分隔 A 和 C，即从节点 A 到节点 C 的路径都需经过 B

- 一个概率分布满足全局马尔可夫属性指：
  若任意的不相交集 A，B，C，B 分隔 A 和 C，在给定 B 的条件下，A 和 C 相互独立，即：

$$I(H) = \{A \perp C|B : sep_H(A; C|B)\}$$

Local Markov independencies I

- 对于每个节点 $X_i \in V$, 有唯一的马尔可夫毯（Markov blanket), 记为 MB_{X_i}, 它由与 X_i 相邻的一组节点构成。(无向图有共享边存在)

定义

局部马尔可夫独立性是指:

$$I_L(H) \triangleq \{X_i \perp V - \{X_i\} - MB_{X_i} | MBX_i : \forall i\}$$

目录

量化分析-Cliques 势团 I

定义

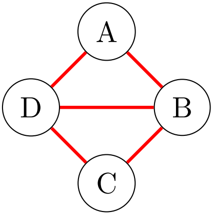
对于图 $G = \{V, E\}$, 一个完全子图（clique）是一个节点全连接的子图即：$G' = \{V' \subseteq V, E' \subseteq E\}$

定义

最大势团 (maximal clique) 是一个完全子图，任何节点超集合都不在是完全图。

即：加个节点就不是完全图了。

量化分析-Cliques 势团 I



子势团 (sub-cliques) 不必是最大势图

- max-cliques=$\{A, B, C\}, \{B, C, D\}$
- sub-cliques=$\{A, B\}, \{C, D\}$...
- 注意：A，C 之间没有直接边

Gibbs Distribution and Clique Potential I

定义

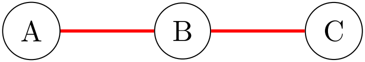
一个无向图模型由一个定义在无向图 H 上的概率分布 $P(X_1, .., X_n)$, 和一组与 H 中团 (maximal clique) 相连的正势能函数 (positive potential functions)Ψ_c 表示。
s.t.

$$P(X_1, ..., X_n) = \frac{1}{Z}\prod_{c\in C}\Psi_c(X_c) \qquad (A \quad Gibbs \quad distribution)$$

where Z is known as the partition function:

$$Z = \sum_{X_1,...,X_n}\prod_{c\in C}\Psi_c(X_c)$$

Clique Potential I



- 此模型蕴含 $A \perp C | B$. 则联合概率可因式分解为:

$$p(A, B, C) = p(B) p(A|B) p(C|B)$$

- 也可以写成:

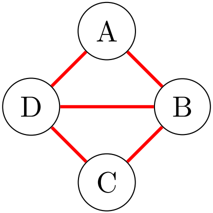
$$p(A, B, C) = p(A, B)(C|B)$$

  或

$$p(A, B, C) = p(B, C) p(A|B)$$

- 但不是所有势能函数都能进行边缘化
- 不能让所有的势能函数都是条件形式

Clique Potential-使用最大势团



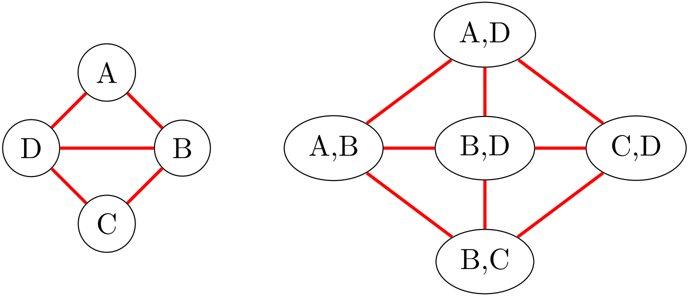
$\Psi_c(X_{124})$ $\Psi_c(X_{234})$

$$P(X_1, X_2, X_3, X_4) = \frac{1}{Z}\Psi_c(X_{124}) \times \Psi_c(X_{234})$$

$$Z = \sum_{X_1, X_2, X_3, X_4} \Psi_c(X_{124}) \times \Psi_c(X_{234})$$

- 对于离散节点，我们可以表示 $P(X_{1:4})$ 为 2 个三维表，而不是 1 个四维表

Clique Potential-使用 subcliques



$$P(X_1, X_2, X_3, X_4) = \frac{1}{Z} \prod_{ij} \Psi_{ij}(X_{ij})$$

$$= \frac{1}{Z} \Psi_{12}(X_{12}) \Psi_{23}(X_{23}) \Psi_{24}(X_{24}) \Psi_{34}(X_{34})$$

- 对于离散节点，我们可以表示 $P(X_{1:4})$ 为 5 个二维表，而不是 1 个四维表

Hammersley-Clifford Theorem I

定理 (Hammersley-Clifford Theorem)

A strictly positive distribution $p(x)$ (i.e. $p(x) > 0$ for all x) satisfies the global Markov property (G) with respect to $G(V,E)$ if and only if it can be factorized according to G:

$$p(x) = \frac{1}{Z} \prod_{c \in C(G)} \psi_c(x_c)$$

若一个分布是严格正的且满足全局马尔可夫属性，当且仅当它对应的图模型可被因式分解为上式。

P-map 映射 (Perfect maps)

定理 (P-map 映射 (Perfect maps))

一个 *Markov* 网络 H 是一个分布 P 的 P-*map*（*perfect map*），则对任意的 $X; Y;Z$ 我们有：

$$sep_H(X, Z|Y) \Leftrightarrow P \vDash (X \perp Z|Y)$$

定理 (Perfect maps)

在无向图图模型中，并不是每个分布都存在 P-*map* 映射

证明.

举个反例：没有一个无向图可以描述所有存在 v-structure 中的独立性断言。$X \rightarrow Z \leftarrow Y$. □

指数形式

定义

我们采用一种非约束形式表示团势能 $\Psi_c(X_c)$，使用一个实数函数 $\phi_c(X_c)$ 表示能量函数

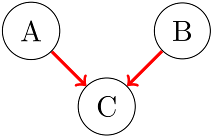
$$\Psi_c(X_c) = exp(-\phi_c(Xc))$$

- 这样的定义使得联合概率函数可写为一种累加的结构

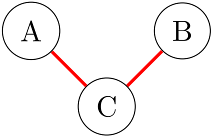
$$P(X) = \frac{1}{Z} exp\{-\sum_{c \in C} \phi_c(X_c)\} = \frac{1}{Z} exp\{-H(X)\}$$

- H(X) 被称为自由能量

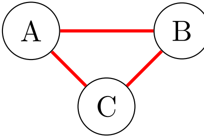
问题：存在一个马尔可夫网络是是给定贝叶斯网络的 P-map 吗？



$A \perp B, \neg(A \perp B | C)$



$A \perp B | C, \neg(A \perp B)$



$\neg(A \perp B | C), \neg(A \perp$

- V-structure 在马尔可夫网络中并没有对应的结构

概率推断和学习

- 一个 GM 模型描述了一个唯一的概率分布 P
- 典型任务
  - 1. 如何回答如 $P_M(X|Y)$ 的查询
    我们用推断描述这一类查询过程
  - 2. 从数据 D 中如何估计可能的模型 M
    我们用学习描述这一类估计 M 的处理过程
    并不是所有变量都是可观察的，我们需要推断来计算缺失信息。

Likelihood

- 多数查询会涉及到证据 evidence
- Evidence e 是一个 E 集合在其定义域中的一种取值情况。
- 简单查询：计算证据概率

$$P(e) = \sum_{x_1} \dots \sum_{x_k} P(x_1, \dots, x_k, e)$$

- 这也被称为计算 e 的 likelihood

条件概率

- 我们通常对给定证据的条件下，变量的条件概率感兴趣

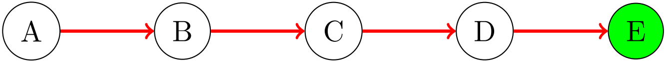
$$P(X|e) = \frac{P(X, e)}{P(e)} = \frac{P(X, e)}{\sum_x P(X = x, e)}$$

- 我们会查询 Y 的一个子集，而不关心其它随机变量 Z 的取值：

$$P(Y|e) = \sum_z P(Y, Z = z|e)$$

这个过程称为 z 的边缘化

链式消解



- 查询 $P(e)$

$$P(e) = \sum_d \sum_c \sum_b \sum_a P(a, b, c, d, e)$$

- 通过链式分解，我们有：

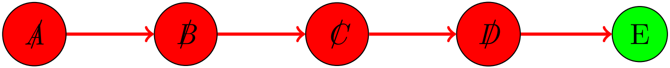
$$= \sum_d \sum_c \sum_b \sum_a P(a)P(b|a)P(c|b)P(d|c)P(e|d)$$

- 通过重新排列

$$= \sum_d \sum_c \sum_b P(c|b)P(d|c)P(e|d) \sum_a P(a)P(b|a)$$

目录

链式消解



- 通过重新排列，消除了 A 变量

$$=\sum_d\sum_c\sum_b P(c|b)P(d|c)P(e|d)P(b)$$

- 通过重新排列，消除了 B 变量

$$=\sum_d\sum_c P(d|c)P(e|d)P(c)$$

- 通过重新排列，消除了 C 变量

$$=\sum_d P(e|d)P(d)$$

- 通过重新排列，消除了 D 变量：$P(e)$
- 计算复杂度为 $O(kN^2)$，而原来是 $O(N^k)$

目录

采用变量消解方法对 GM 进行推理

思路:

- 给出查询形式:

$$P(X_1, e) = \sum_{x_n} \dots \sum_{x_3} \sum_{x_2} \prod_i P(x_i|Pa_i)$$

- 这实际是给出了对隐变量进行消解的顺序
- 迭代进行以下步骤:
  - 将所有不相关的项移动到内部累加之外
  - 执行内部累加，产生一个新项
  - 将新项插入到乘积项中
- wrap-up

$$P(X_1|e) = \frac{\phi(X_1, e)}{\sum_{x_1} \phi(X_1, e)}$$

变量消解的输出

- 令 X 为某组随机变量
  F 是一因子集合，其中 $\phi \in F$
  $Y \subset X$ 为查询变量，$T = X - Y$ 为被消解变量集合
- T 被消解后的结果是一个因子:

$$\tau(Y) = \sum_{T} \prod_{\phi \in F} \phi$$

这个因子不必对应于网络中的任何概率或条件概率

对于证据 (Evidence) 的处理

根据条件使用 Sum-Product 操作

- 证据的势能:

$$\delta(E_i, e_i) = \begin{cases} 1 & if E_i \equiv e_i \\ 0 & if E_i \neq e_i \end{cases}$$

- 总体证据的势能:

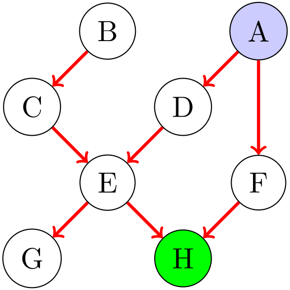
$$\delta(E, e) = \prod_{i \in I_E} \delta(E_i, e_i)$$

- 引入证据

$$\tau(E, e) = \sum_{T,e} \prod_{i \in I_E} \phi \times \delta(E, e)$$

变量消解-例子 I

- 查询:$P(A|h)$
  - 需要消解变量 B,C,D,E,F,G,H

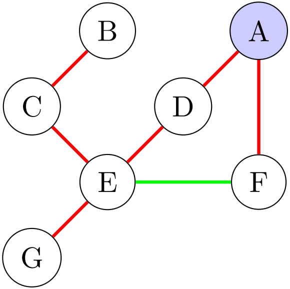


- 初始化因子:

$$P(A:H) = P(a)P(b)P(c|b)P(d|a)P(e|c,d)P(f|a)P(g|e)P(h|e,f)$$

- 选择消解次序:H,G,F,E,D,C,B

变量消解-例子 I



Step1 :Conditioning, 根据 h 的观察值 $\hat{h}$ 固定证据节点 h

$$m_h(e,f) = p(h=\hat{h}|e,f)$$

$$P(A:H) = P(a)P(b)P(c|b)P(d|a)P(e|c,d)P(f|a)P(g|e)m_h(e,f)$$

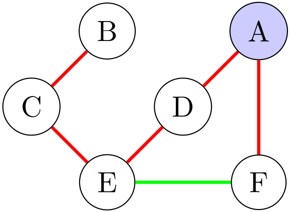
变量消解-例子 II

- 还需要消解:G,F,E,D,C,B

Step2 : 消除 G

$$m_g(e) = \sum_g P(g|e) = 1$$

$$P(A:H) = P(a)P(b)P(c|b)P(d|a)P(e|c,d)P(f|a)m_h(e,f)$$



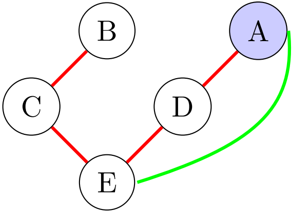
- 还需要消解:F,E,D,C,B

变量消解-例子 III

Step3 ：消除 F

$$m_f(e, a) = \sum_f P(f|a) m_h(e, f)$$

$$P(A : H) = P(a)P(b)P(c|b)P(d|a)P(e|c, d)m_f(a, e)$$



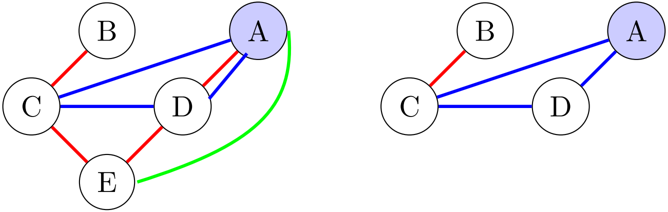
- 还需要消解:E,D,C,B

变量消解-例子 IV

Step4 ：消除 E

$$m_e(a, c, d) = \sum_e P(e|c, d) m_f(a, c)$$

$$P(A:H) = P(a)P(b)P(c|b)P(d|a)m_e(a, c, d)$$



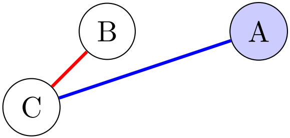
- 还需要消解:D,C,B

变量消解-例子 V

Step5 ：消除 D

$$m_d(a,c) = \sum_d P(d|a) m_e(a,c,d)$$

$$P(A:H) = P(a)P(b)P(c|b)m_d(a,c)$$



- 还需要消解:C,B

变量消解-例子 VI

Step6 ：消除 C

$$m_c(a,b) = \sum_c P(c|b) m_d(a,c)$$

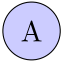
$$P(A:H) = P(a)P(b)m_c(a,b)$$

- 还需要消解:B

Step7 ：消除 B

$$m_b(a) = \sum_c P(b) m_c(a,b)$$

$$P(A:H) = P(a)m_b(a)$$



变量消解-例子 VII

Step8 :Wrap-up

$$P(a, \hat{h}) = P(a)m_b(a), P(\hat{h}) = \sum_a P(a)m_b(a)$$

$$P(a|\hat{h}) = \frac{P(a)m_b(a)}{\sum_a P(a)m_b(a)}$$

变量消解-例子 I

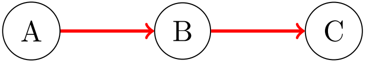
$$A \rightarrow B \rightarrow C$$

$$P(A, B, C) = P(A)P(B|A)P(C|B)$$

我们说概率分布 P 可以关于 G1 因式分解

- A: 性别（Male：0.6；Female: 0.4)
- B：身高
  Male 大于 170cm=0.6 小于 170cm= 0.4
  Female 大于 170cm=0.3 小于 170=0.7
- C: 体重
  身高大于 170cm：大于 80kg=0.65；小于 80kg=0.35
  身高小于 170cm：大于 80kg=0.45；小于 80kg=0.55

变量消解-例子 I



$$P(A,B,C)=P(A)P(B|A)P(C|B)$$

令：体重大于 80kg,C=0；体重小于 80kg,C=1
身高大于 170cm，B=0, 身高小于 170cm,B=1
有位同学体重小于 80kg 预测身高?

$$\begin{aligned}
P(B_1|C_1) &= \frac{\sum_A P(A,B=1,C=1)}{P(C=1)} \\
&= \frac{\sum_A P(A,B=1,C=1)}{\sum_A \sum_B P(A,B,C=1)} \\
&= \frac{0.6*0.4*0.55+0.4*0.7*0.55}{0.6*0.6*0.35+0.6*0.4*0.55+0.4*0.3*0.35+0.4*} \\
&= 0.63
\end{aligned}$$

变量消解-例子 I

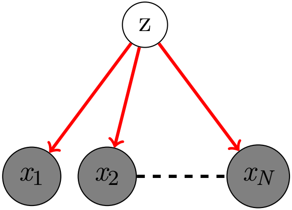
```
model = BayesianModel( [("A", "B"), ("B", "C")])
# add CPD to each edge
cpd_a = TabularCPD("A", 2, [[0.6], [0.4]])
cpd_b = TabularCPD(
            "B", 2,
            [[0.6, 0.3],
             [0.4, 0.7]],
            evidence=["A"],
            evidence_card=[2],)
cpd_c = TabularCPD(
            "C", 2,
            [[0.65,0.45],
             [0.35,0.55]],
            evidence=["B"],
            evidence_card=[2],)
model.add_cpds(cpd_a, cpd_b, cpd_c)
infer = VariableElimination(model)
print(infer.query(variables =['B'], evidence={'C':1}))
```

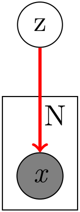
目录

变分推断 *

思路：

- 通过使用已知简单分布来逼近需推断的复杂分布，并通过限制近似分布的类型，从而得到一种局部最优，但具有确定解的近似后验分布。
- 概率图模型一种表示方法：盘式记法 (plate notation)
  - N 个变量 $\{x_1, ..., x_N\}$ 均依赖于隐变量 z
  - 相互独立，由相同机制生成的多个变量被放在一个方框 (plate) 内，并在方框中标出个数 N
  - 方框可以嵌套，阴影表示已知（观测到）变量





变分推断 *

观察变量 x 的联合分布的概率密度函数:

$$p(x|\Theta) = \prod_{i=1}^{N} \sum_{z} p(x_i, z|\Theta)$$

$$lnp(x|\Theta) = \sum_{i=1}^{N} ln\{\sum_{z} p(x_i, z|\Theta)\}$$

可使用 EM 算法求解:

- E Step: 根据 t 时刻的参数 Θ^t 对 $p(z|x, \Theta^t)$ 进行推断，并计算联合似然函数 $p(x, z|\Theta^t)$.(已知 Θ^t，求 $p(z|x, \Theta^t)$ 最大化)
- M Step: 基于 E 步的结果最大化寻找 Θ, 即对关于变量 Θ 的函数 $Q(\Theta; \Theta^t)$ 进行最大化

$$\begin{aligned} \Theta^{t+1} &= \arg\max_{\Theta} Q(\Theta; \Theta^t) && (13) \\ &= \arg\max_{\Theta} \sum_{z} p(z|x, \Theta^t) lnp(x, z|\Theta) && (14) \end{aligned}$$

变分推断 *

实际上 $Q(\Theta;\Theta^t)$ 是对 $lnp(x,z|\Theta)$ 在分布 $p(z|x,\Theta^t)$ 下的期望，当分布 $p(z|x,\Theta^t)$ 于变量 z 的真实后验分布相等时，$Q(\Theta;\Theta^t)$ 近似于对数似然函数。从而得到稳定的 Θ 参数。

$$lnp(x) = L(q) + KL[q(z)||p(z|x)]$$

- $L(q) = \int q(z)ln\frac{p(x,z)}{q(z)}dz$
- $KL[q(z)||p(z|x)] = -\int q(z)ln\frac{p(z|x)}{q(z)}dz$
- $q(z) = \prod_{i=1}^{M} q_i(z_i)$ 指数族

$$\begin{aligned} KL[q||p] &= \int q(x)ln\frac{q(x)}{p(x)}dx = -\int q(x)\frac{p(x)}{q(x)} \\ lnp(x) &= lnp(x,z) - lnp(z|x) \\ KL[q(z)||p(z|x)] &= -\int dz(q(z)ln\frac{p(x,z)}{q(z)} + lnp(x)) \\ &= -L + lnp(x) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
L(q) &= \int \prod_i q_i \{ lnp(x,z) - \sum_i lnq_i(z) \} dz \\
&= \int q_j \{ \int lnp(x,z) \prod_{i \neq j} q_j dz_i \} dz_j - \int \prod_k q_k \sum_i lnq_i dz
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\int \prod_k q_k \sum_i lnq_i dz &= \sum_i \int \prod_k q_k lnq_i dz \\
&= \sum_i \int q_i(z_i) q_i(\hat{z}_i) lnq_i(z_i) dz_i d\hat{z}_i \\
&= \sum_i \int q_i(z_i) lnq_i(z_i) dz_i
\end{aligned}
$$

- 求和可以拿到积分外面
- $z = \{z_i, \hat{z}_i\}$
- $\forall i, \int q_i(z_i) dz_i = 1$

$$L(q) = \int q_j\{\int lnp(x,z)\prod_{i\neq j} q_j dz_i\}dz_j - \sum_i \int q_i(z_i)lnq_i(z_i)dz_i$$

$$\begin{aligned}\int q_j\{\int lnp(x,z)\prod_{i\neq j} q_j dz_i\}dz_j &= \int q_i dz_i \int q(\hat{z}_i)lnp(x,z)d\hat{z}_i \\ &= \int q_i(z_i)lnq_i^*(z_i)dz_i + lnZ\end{aligned}$$

- 令 $q_i^*(z_i) = \frac{1}{Z}exp < \int lnp(x,z)q(\hat{z})d\hat{z} >$

$$\begin{aligned} L(q) &= \int q_i(z_i) ln q_i^*(z_i) dz_i + lnZ - \sum_i \int q_i(z_i) ln q_i(z_i) dz_i \\ &= \{\int q_i(z_i) ln q_i^*(z_i) dz_i - \int q_i(z_i) ln q_i(z_i) dz_i\} + H[q(\hat{z}_i)] + lnZ \end{aligned}$$

考虑花括号中部分

$$\begin{aligned} \int q_i(z_i) ln q_i^*(z_i) dz_i - \int q_i(z_i) ln q_i(z_i) dz_i &= \int q_i(z_i) ln \frac{q_i^*(z_i)}{q_i(z_i)} dz_i \\ &= -KL[q_i(z_i)||q_i^*(z_i)] \end{aligned}$$

因此有:

$$L(q) = -KL[q_i(z_i)||q_i^*(z_i)] + H[q(\hat{z}_i)] + lnZ$$

我们希望最大化联合似然函数 $p(x,z|\Theta^t)$，就是最大化 $L(q)$. 观察到 L 依赖于每个 q_i 仅通过 KL 项。

$$\frac{\partial L(q(z))}{\partial q_i(z_i)} = \frac{\partial - KL[q_i(z_i)||q_i^*(z_i)] - \lambda_i(\int q_i(x_i) dx_i - 1)}{\partial q_i(z_i)} = 0$$

最大化 L，实际上就是 KL 差异等于 0

$$q(z_i) = q^*(x_i)$$

$q_i^*(z_i) = \frac{1}{Z} exp < \int lnp(x,z) q(\hat{z}) d\hat{z} >$ 迭代更新公式:

$$q(z_i) \leftarrow \frac{1}{Z} exp < \int lnp(x,z) q(\hat{z}_i) d\hat{z}_i >$$