INF8225 – Lesson 2

Plan de cours

- Les concepts en probabilité essentiels de base
- Les réseaux de Bayes
- Dépendance conditionnelle, indépendance conditionnelle, la couverture de Markov
- Les graphes de facteurs, l'algorithme de sumproduit et max-produit
- Le calcul de distributions marginales versus l'explication le plus probable

Notation

 La distribution conjointe est la probabilité d'une conjonction d'affectations particulières à chaque variable comme:

$$P(V_1 = v_1, V_2 = v_2, ..., V_n = v_n)$$

Souvent nous employons la notation:

a)
$$P(V_1, V_2, ..., V_n)$$
 et b) $P(v_1, v_2, ..., v_n)$

avec les variables discrètes ou binaires pour indiquer : a) les tables de probabilités (multidimensionnel) et/ou b) la probabilité unique associée à une configuration particulière

Les concepts <u>essentiels</u> de base

- Règle du produit
 (Règle fondamental)
- Règle de Bayes
- Règle de la somme (Marginalisation)
- Notez : pour obtenir une probabilité conditionnelle on peut utiliser le concept de conditionnement « conditioning »

$$P(A,B) = P(A \mid B)P(B)$$

$$P(B \mid A) = \frac{P(A \mid B)P(B)}{P(A)}$$

$$P(X_1) = \sum_{\{X\} \setminus X_1} P(X_1, X_2, \dots, X_N)$$

$$P(A \mid B) = \frac{P(A,B)}{P(B)}$$

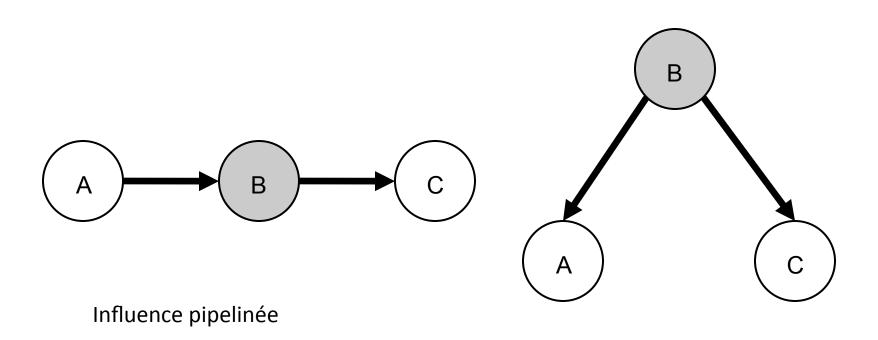
Définition: Un réseau de Bayes

• Il représente une factorisation d'une probabilité jointe des variables V_i de la forme:

$$P(V_1, V_2, ..., V_n) = \prod_{i=1}^n P(V_i \mid \text{parents}(V_i))$$
si parents $(V_i) = \emptyset$ (il n'a pas de parents)
alors, $P(V_i \mid \emptyset) = P(V_i)$

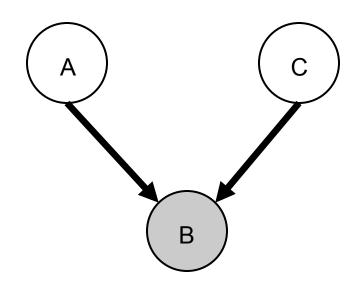
- Pour écrire le réseau: il y a un nœud (cercle) pour chaque variable et une arête orienté entre chaque variable et ses parents.
- Nœud gris implique que la variable est observée avec évidence (exact / dur, ou incertain / douce)

Exemples des modèles ou A et C sont conditionnellement indépendants sachant B



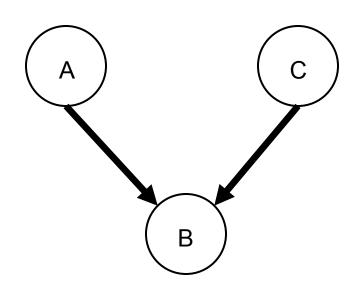
Influence divergente

Exemples d'un modèle ou A et C sont conditionnellement dépendants sachant B

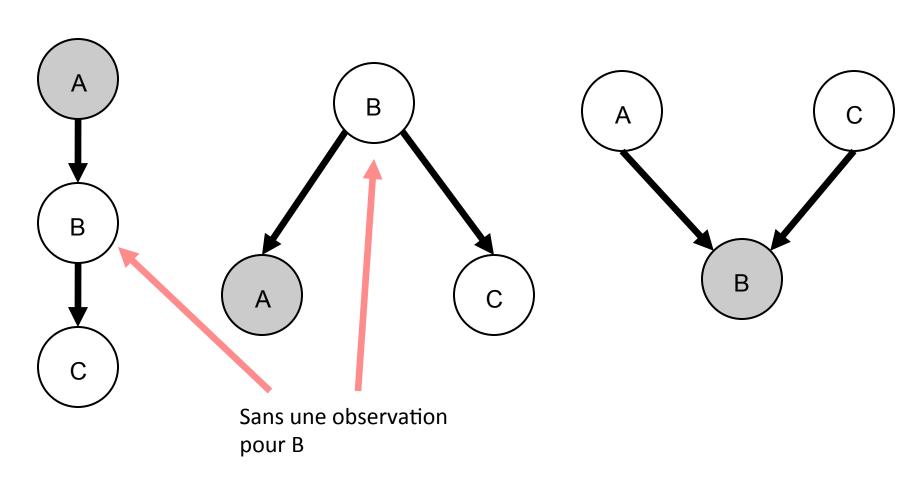


Influence convergente

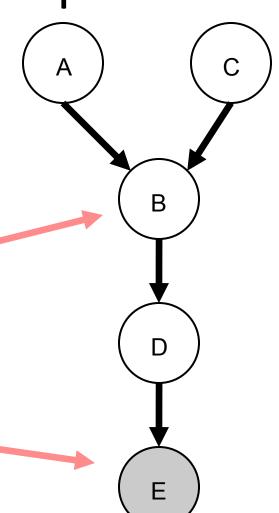
Par contre, sans évidence A et C sont <u>indépendantes</u>



Exemples ou A et C sont dépendants



Exemple ou A et C sont dépendants



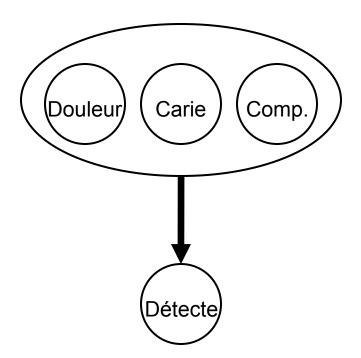
Même sans une observation (directe) pour B nous avons une exemple de dépendance conditionnelle

Exemple - Modélisation

Considérons la modélisation suivant d'un problème simple

P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

= **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur, Carie, Compétent)

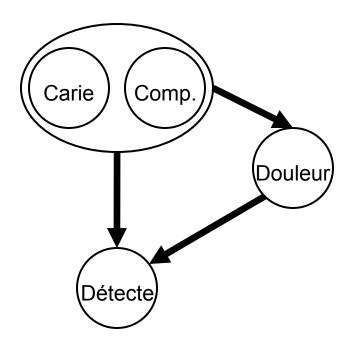


<u>Idée importante</u> : Il est possible d'appliquer nos règles simples récursivement avec les groupes de variables.

Exemple (suite) - Modélisation

P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur, Carie, Compétent)
- = P(Détecte|Douleur,Carie,Compétent) × P(Douleur|Carie,Compétent) ×
 P(Carie,Compétent)



P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur, Carie, Compétent)
- = P(Détecte|Douleur,Carie,Compétent) × P(Douleur|Carie,Compétent) ×
 P(Carie,Compétent)
- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur | Carie, Compétent) × **P**(Carie | Compétent) × **P**(Compétent)

Possible, mais...

P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur | Carie, Compétent) × **P**(Carie | Compétent) × **P**(Compétent)
- = P(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × P(Douleur | Carie, Compétent) × P(Carie) × P(Compétent)

La présence de carie ne dépend pas de la compétence du dentiste

P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur | Carie, Compétent) × **P**(Carie | Compétent) × **P**(Compétent)
- = P(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × P(Douleur | Carie) × P(Carie) × P(Compétent)

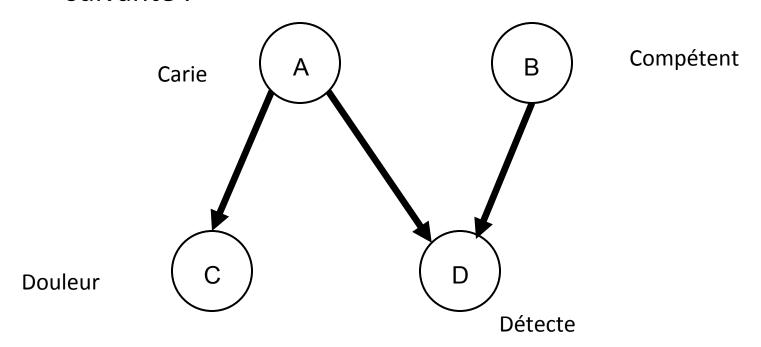
La présence de douleur de ne dépend pas de la compétence du dentiste

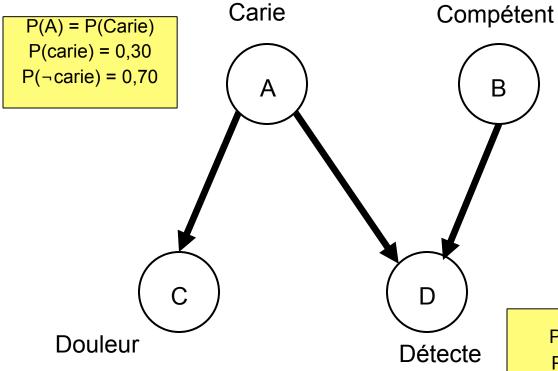
P(Détecte, Douleur, Carie, Compétent)

- = **P**(Détecte | Douleur, Carie, Compétent) × **P**(Douleur | Carie, Compétent) × **P**(Carie | Compétent) × **P**(Compétent)
- = $P(Détecte | Carie, Compétent) \times P(Douleur | Carie) \times P(Carie) \times P(Compétent)$

La détection d'une anomalie ne dépend pas de la présence de douleur

On obtient donc un réseau de Bayes avec la structure suivante :





P(B) = P(Compétent) P(compétent) = 0,95 P(¬compétent) = 0,05

```
P(C|A) = P(Douleur | Carie)

P(douleur | carie) = 0.8

P(douleur | \neg carie) = 0.3
```

```
P(D|A,B) =
P(Détecte | Carie, Compétent)
P(détecte | compétent \( \triangle \tau \) carie) = 0,99
P(détecte | compétent \( \triangle \tr
```

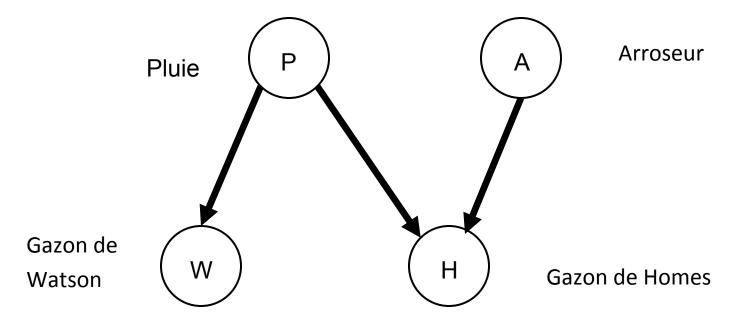
Notre exemple (suite)

Distribution jointe complète:

```
[detecte===0, douleur===0, competent===0, carie===0] 0.020825
[detecte===1, douleur===0, competent===0, carie===0] 0.003675
[detecte===0, douleur===1, competent===0, carie===0] 0.008925
[detecte===1, douleur===1, competent===0, carie===0] 0.001575
[detecte===0, douleur===0, competent===1, carie===0] 0.442225
[detecte===1, douleur===0, competent===1, carie===0] 0.023275
[detecte===0, douleur===1, competent===1, carie===0] 0.189525
[detecte===1, douleur===1, competent===1, carie===0] 0.009975
[detecte===0, douleur===0, competent===0, carie===1] 0.0015
[detecte===1, douleur===0, competent===0, carie===1] 0.0015
[detecte===0, douleur===1, competent===0, carie===1] 0.006
[detecte===1, douleur===1, competent===0, carie===1] 0.006
[detecte===0, douleur===0, competent===1, carie===1] 0.00057
[detecte===1, douleur===0, competent===1, carie===1] 0.05643
[detecte===0, douleur===1, competent===1, carie===1] 0.00228
[detecte===1, douleur===1, competent===1, carie===1] 0.22572
```

Autre exemple avec le même structure (exemple célèbre de « wetgrass »)

On obtient donc un réseau de Bayes avec la structure suivante :



Exemple: « Explaining Away »

Pour un même jeu de données... Plusieurs réseaux possibles

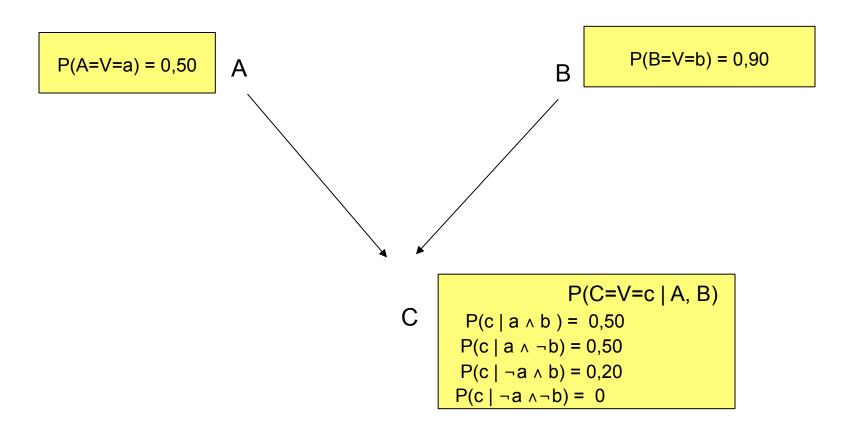
Exemple : Etant donné la distribution jointe complète pour les

variables binaires A, B et C,

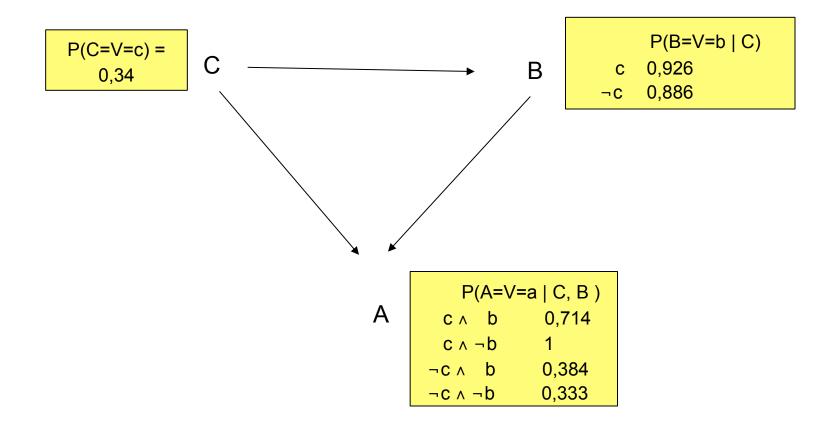
Rapel – notation : A = Vrai = V = a, $A = Faux = F = \neg a$

альлс	0.225
альл¬с	0.225
ал¬влс	0.025
ал¬вл¬с	0.025
¬а∧ь ∧с	0.09
¬а∧ь∧¬с	0.36
¬ал¬b лс	0
¬ал¬Ьл¬с	0.05

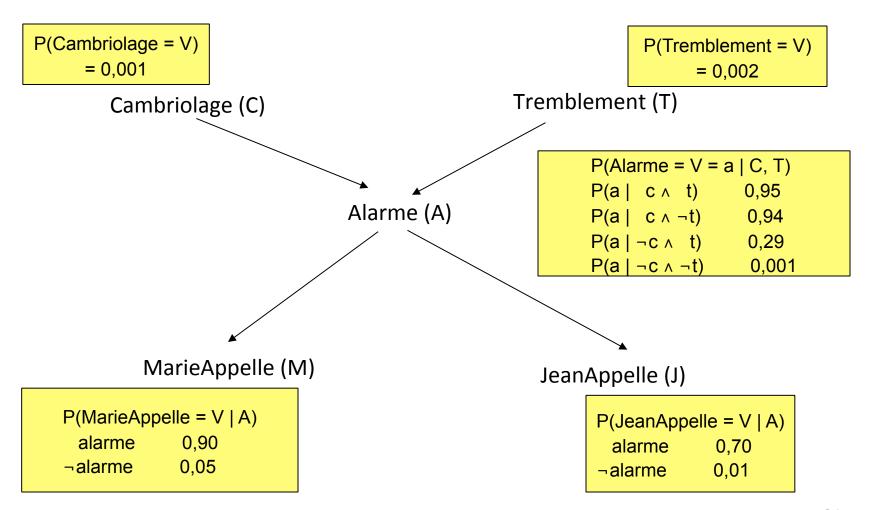
Plusieurs réseaux possibles pour un même jeu de données



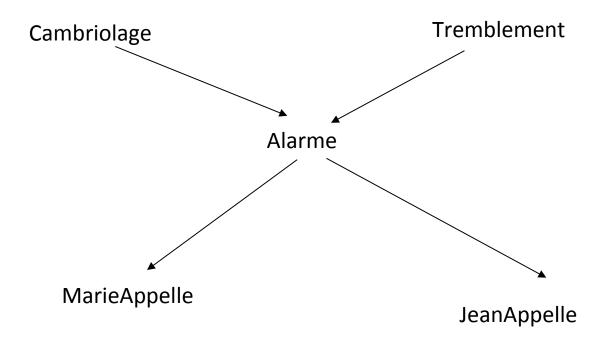
Plusieurs réseaux possibles...



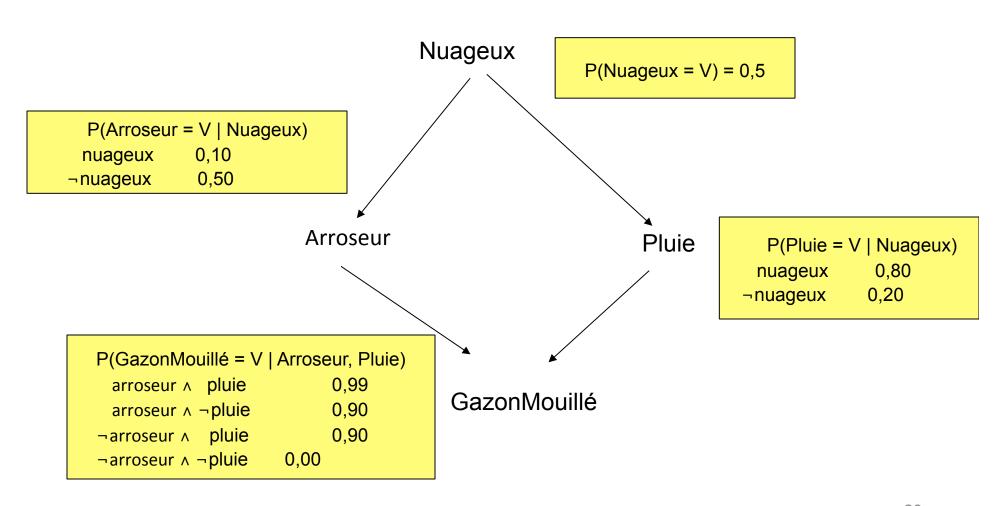
Exemple (célèbre) « earthquake »



Exemple



Exemple

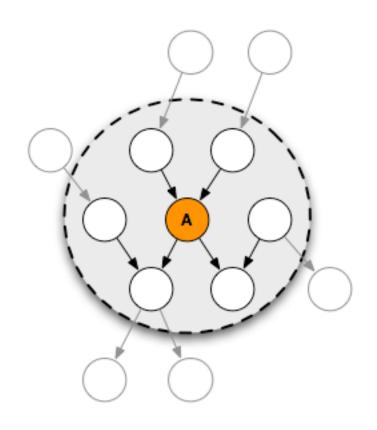


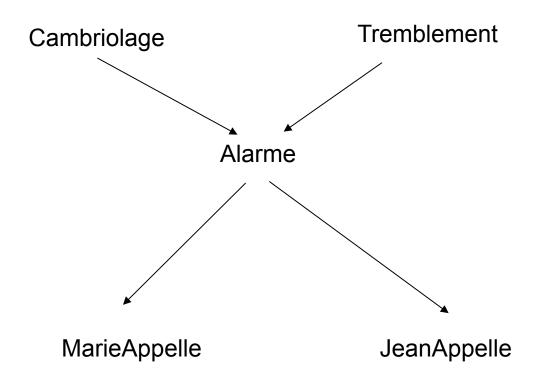
Indépendance conditionnelle dans les réseaux bayésiens

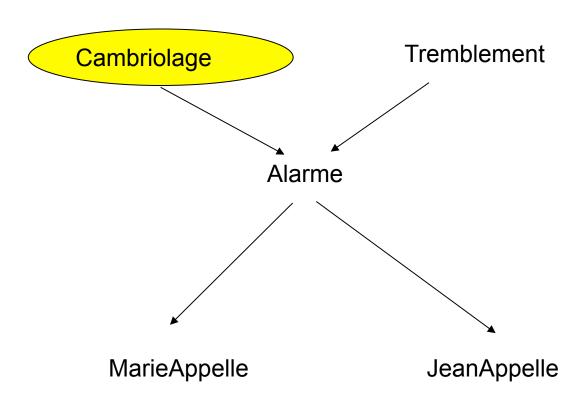
- Un noeud est conditionnellement indépendant de ses non-descendants, étant donné ses parents
- Un noeud est conditionnellement indépendant de tous les autres noeuds du réseau, étant donné sa couverture de Markov (c'est-à-dire ses parents, ses enfants et les parents de ses enfants)

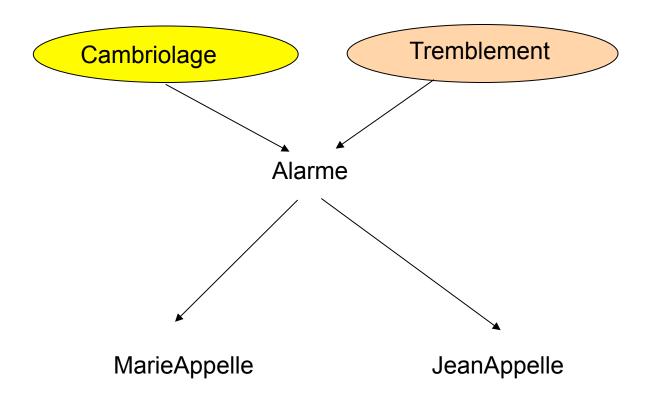
Couverture de Markov

 Etant donné un nœud, la couverture de Markov consiste de ses parents, ses enfants et les autres parents de ses enfants.

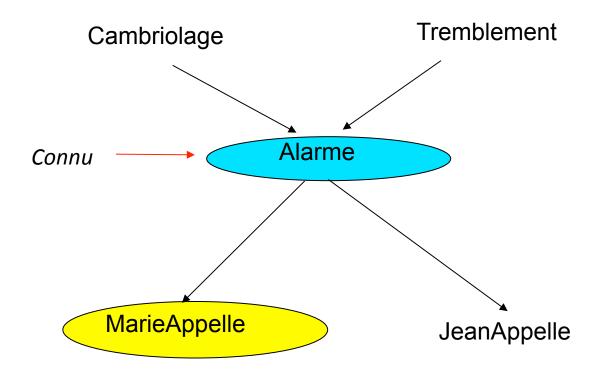




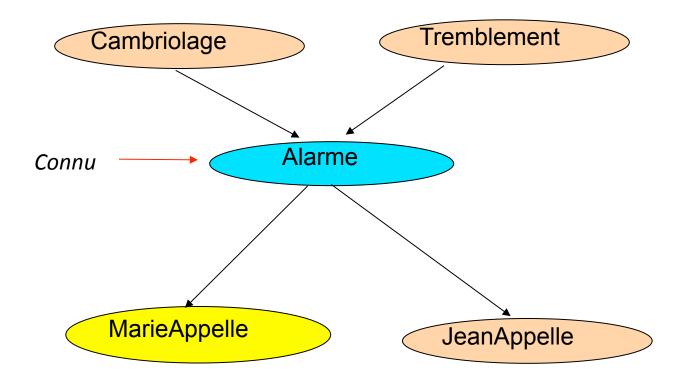




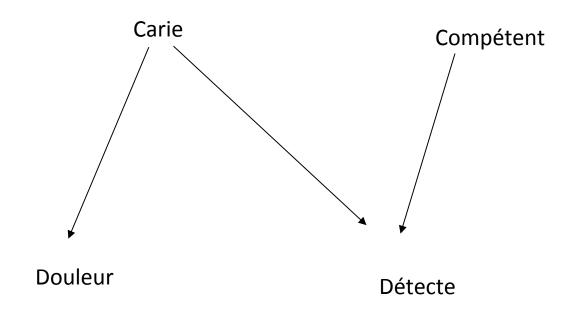
Les noeuds ____ sont indépendants du noeud ____ étant donné le noeud ____

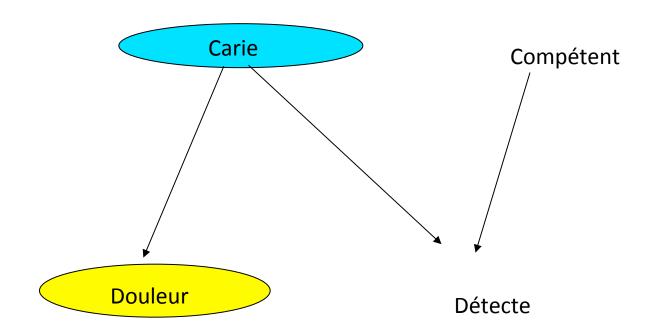


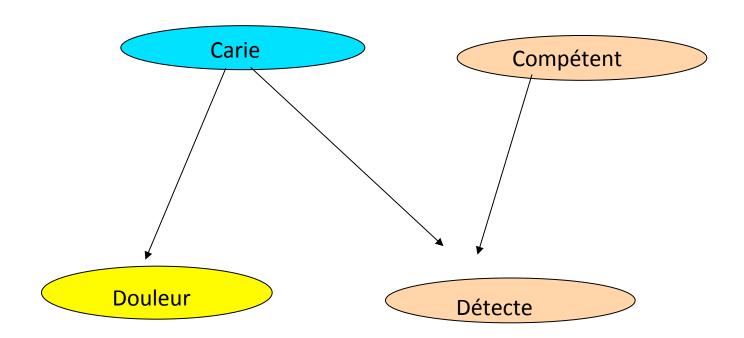
Les noeuds ____ sont indépendants du noeud ____ étant donné le noeud ____



Les noeuds ont indépendants du noeud ftant donné le noeud

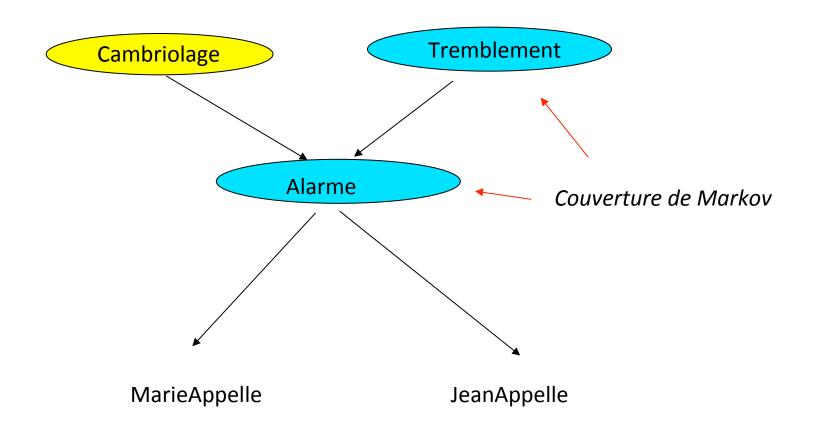




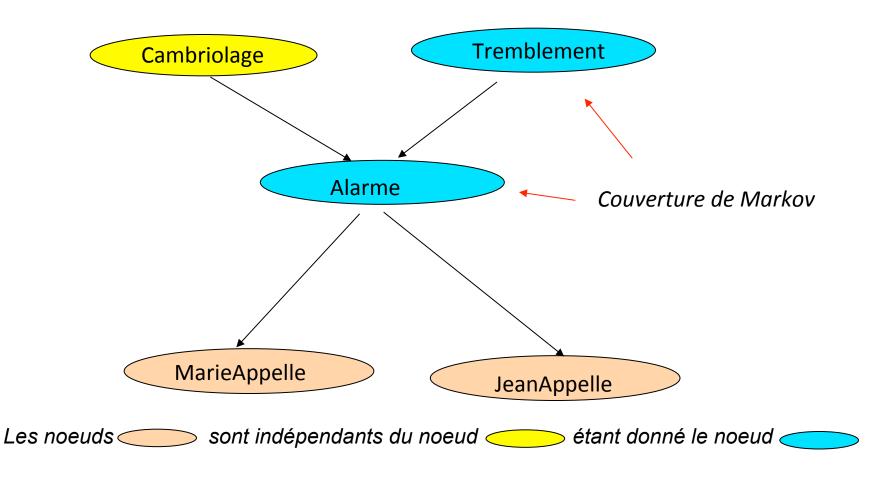


Les noeuds ____ sont indépendants du noeud ____ étant donné le noeud ____

Exemple – indép. conditionnelle



Exemple – indép. conditionnelle



Probabilités marginales et l'algorithme de somme-produit

- Dans les graphes avec quelques observations inconnues (ou des variables cachées) nous avons besoin de distributions marginales.
- Pour apprentissage avec des variables inconnues, les algorithmes tels que la maximisation d'espérance (EM) sont typiquement utilisées pour estimer des paramètres
- Ces algorithmes exigeant de nous de calculer des distributions marginales locales
- Donc, dans beaucoup de circonstances importantes on a besoin de marginales

Inférence exacte vs. approximative

- Pour les graphes de facteurs à structure arborescente, nous pouvons calculer toutes les probabilités marginales sans approximation avec l'algorithme de somme-produit (défini avec des graphes de facteurs)
- On parle souvent d'inférence exacte dans un arbre
- Quand il existe un ou plusieurs cycles dans un graphe de facteurs, il est possible d'appliquer l'algorithme de somme-produit, toutefois l'inférence sera une approximation

Calculant la « meilleure configuration » et l'algorithme maximum - produit

- Un marginal est une distribution locale de probabilité dans un graphique après avoir intégré sur d'autres variables
- <u>La meilleure configuration</u> d'un graphe est les meilleures valeurs des variables
- Pour un modèle de probabilité, c'est <u>l'explication la plus probable</u> (l'EPP ou MPE en anglais)
- Pour un réseau bayésien ou un modèle avec une distribution a priori, une vraisemblance et un postérieur, nous référons souvent à la tâche d'inférence <u>maximum a posteriori</u> (MAP) pour : a) des variables aléatoires ou b) pour l'estimation des paramètres en utilisant une probabilité a priori

Considérons

La marginalisation nécessaire pour calculer :

$$P(X_4 = x_4)$$

riginalisation saire pour calculer :
$$= x_4)$$

$$= \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3, X_4 = x_4)$$

$$= \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3, X_4 = x_4)$$

$$= \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} P(X_1 = x_1) P(X_2 = x_2) P(X_3 = x_3 | X_1 = x_1)$$

 X_2

$$= \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} P(X_1 = x_1) P(X_2 = x_2) P(X_3 = x_3 | X_1 = x_1)$$

$$P(X_4 = x_4 | X_1 = x_1, X_2 = x_2)$$

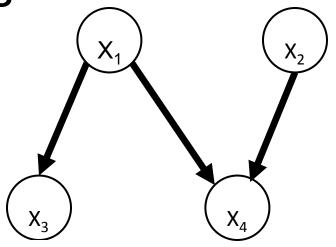
 X_1

Exercice: Combien multiplications et additions avec des variables binaires?

Considérons

$$f_1(x_1) = P(X_1 = x_1)$$

 $f_2(x_2) = P(X_2 = x_2)$
 $f_3(x_1, x_3) = P(X_3 = x_3 | X_1 = x_1)$
 $f_4(x_1, x_2, x_4) = P(X_4 = x_4 | X_1 = x_1, X_2 = x_2)$



$$P(X_4 = x_4) =$$

$$= \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} f_1(x_1) f_2(x_2) f_3(x_1, x_3) f_4(x_1, x_2, x_4)$$

$$= \sum_{x_1} f_1(x_1) \sum_{x_3} f_3(x_1, x_3) \underbrace{\sum_{x_2} f_2(x_2) f_4(x_1, x_2, x_4)}_{g_2(x_1, x_4)}$$

$$= \sum f_1(x_1) \left(\sum f_2(x_2) f_4(x_1, x_2, x_4) \right) \sum f_3(x_1, x_3)$$

Exercice: Combien multiplications et additions avec des variables binaires?

Rappelez une idée fondamentale : Factor Graphs

Kschischang, Frank R.; Brendan J. Frey and Hans-Andrea Loeliger (2001), "Factor Graphs and the Sum-Product Algorithm", *IEEE Transactions on Information Theory* 47 (2): pp. 498–519.

Définition: Un graphe de facteurs

 Il est possible de créer une fonction à partir des produits de s fonctions f_i de sousensembles de variables {X}_i

$$F(X_1, X_2, ..., X_n) = \prod^{s} f_i(\{X\}_i)$$

• Exemple: notre modèle recent, où nous avons

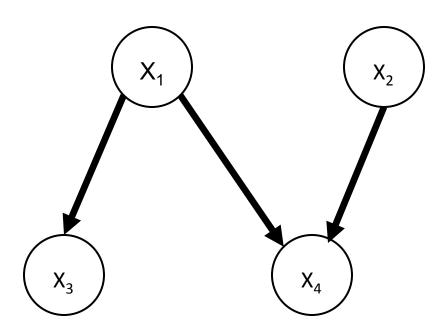
$$P(A,B,C,D) = f_1(\{X\}_1)f_2(\{X\}_2)f_3(\{X\}_3)f_4(\{X\}_4)$$
$$= P(C \mid A)P(D \mid A,B)P(A)P(B)$$

Un graphe de facteurs

Il se compose de (simplement) des :

- Rectangles pour chaque fonction, et des
- Liens, sans orientation entre chaque fonction et chaque variable dans la fonction

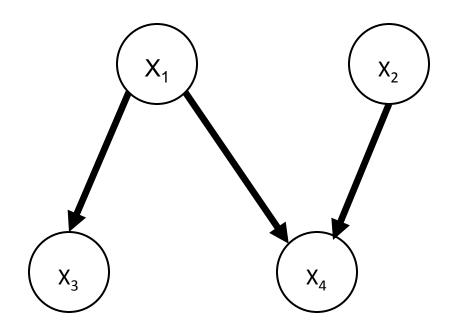
Considérons



Exercice : Ecrivez un graphe de facteurs.

Exercice:

Écrivez un graphe de facteurs.



$$f_1(C,A) = P(C \mid A)$$

$$f_2(D,A,B) = P(D \mid A,B)$$

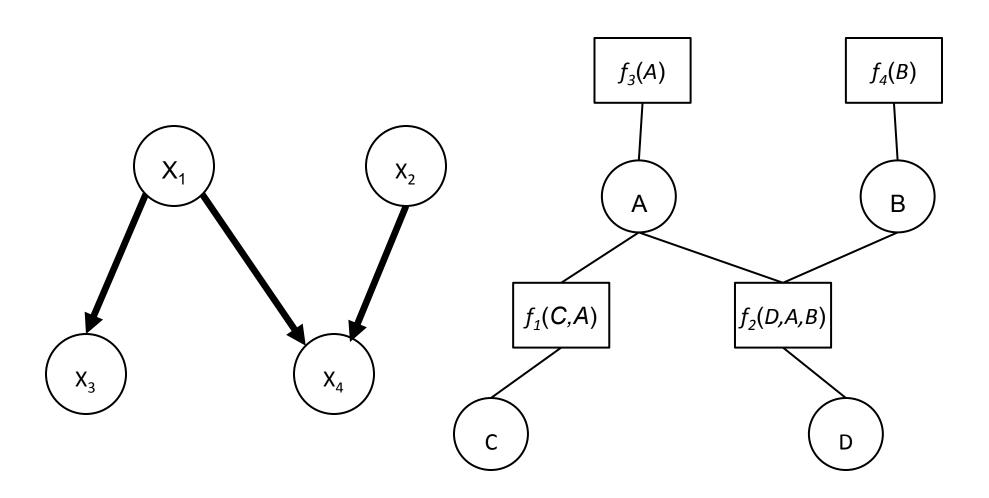
$$f_3(A) = P(A)$$

$$f_4(B) = P(B)$$

Il se compose de :

- Rectangles pour chaque fonction
- Liens, sans orientation entre la fonction et chaque variable dans la fonction

Un graphe de facteurs



Une méthode de calculer des probabilités par le passage de messages

- Les messages sont des vecteurs de nombres réels
- Les messages sont transmis de noeuds variables à des nœuds fonction, et de nœuds fonction à nœuds variables
- Un noeud peut envoyer un message à son voisin seulement si elle a reçu tous les messages de ses autres voisins.
- Étant donné un arbre, l'algorithme peut commencer par envoyant des messages de chaque des feuilles, et s'arrête une fois que chaque nœud a transmis un message à tous voisin.

Les messages fonction à variable

Les messages entre une fonction f et une variable X sont calculé par

$$m_{f\to X}(x) = \sum_{x_1,...,x_k} f(x,x_1,...,x_k) \ m_{X_1\to f}(x_1) \ \cdots m_{X_k\to f}(x_k)$$

- Avec une somme sur toutes les autres variables $X_1,...,X_k$ (sauf X) avec un arc à f et sur le produit de la fonction et tous les messages variable-fonction à partir de ces autres variables
- $m_{f\to X}(x) = f(x)$ Si f contient seulement X, alors (on a un nœud fonction feuille)

Les messages variable-fonction

 Les messages entre une variable X et une fonction f sont calculé par

$$m_{X o f}(x) = \left\{egin{array}{l} 1 & ext{, nœud (variable) feuille} \ m_{f_1 o X}(x) \cdots m_{f_k o X}(x) & ext{autrement} \end{array}
ight.$$

 Ou simplement un produit sur toutes les messages d'autres fonctions f₁,..., f_k (sauf f) contenant X

À la fin

- Une fois que tous les messages ont été transmis,
- alors le <u>marginal</u> final pour toute variable X peut être calculé par

$$P(X_i = x_i) = m_{f_1 \to X_i}(x_i) \cdots m_{f_k \to X_i}(x_i)$$

sur toutes les fonctions f₁,...,f_k contenant X

Slides from:

Data Mining

Practical Machine Learning Tools and Techniques

Slides from Chapter 9 of *Data Mining* by I. H. Witten, E. Frank, M. A. Hall and C.J. Pal

Computing Probabilities (in Tree Structured Graphs) More Efficiently with Factor Graphs

Intuition for the sum-product algorithm

- The sum-product algorithm refers to a much better solution for computing marginals: simply push the sums as far as possible to the right before computing products of probabilities
- In our example the required marginalization can be computed by

The sum-product algorithm

- Computes exact marginals in tree structured factor graphs
- Begin with variable or function nodes that have only one connection (leaf nodes)
- Function nodes send the message: $\mu_{f \to x}(x) = f(x)$ to the variable connected to them
- Variable nodes send the message: $\mu_{x\to f}(x) = 1$
- Other nodes wait until they have received a message from all neighbors except the one will send a message to

Function to variable messages

 When ready, function nodes send messages of the following form to variable x:

$$\mu_{f\to x}(x) = \sum_{x_1,\dots,x_K} f(x,x_1,\dots,x_K) \prod_{k\in N(f)\setminus x} \mu_{x_k\to f}(x_k),$$

- where N(f)\x represents the set of the function node
 f's neighbors, excluding the recipient variable x
- Variables of the K other neighboring nodes are $x_1,...,x_K$
- If a variable is observed, messages for functions involving it no longer need a sum over states of the variable, the function is evaluated with the observation
- One could think of the associated variable node as being transformed into the new modified function

Variable to function messages

 Variable nodes send messages to functions of form:

$$\mu_{x \to f}(x) = \mu_{f_1 \to x}(x) \dots \mu_{f_K \to x}(x) = \prod_{k \in N(x) \setminus f} \mu_{f_k \to x}(x),$$

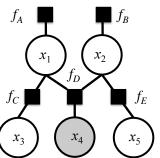
- where the product is over the (K) messages from all neighboring functions N(x) other than the recipient function f, i.e. $f_k \in N(x) \setminus f$
- The marginal for each node is obtained from the product over all K+1 incoming messages from all functions connected to a variable

$$P(x_i) = \mu_{f_1 \to x}(x) \dots \mu_{f_K \to x}(x) \mu_{f_{K+1} \to x}(x) = \prod_{k=1}^{K+1} \mu_{f_k \to x}(x)$$

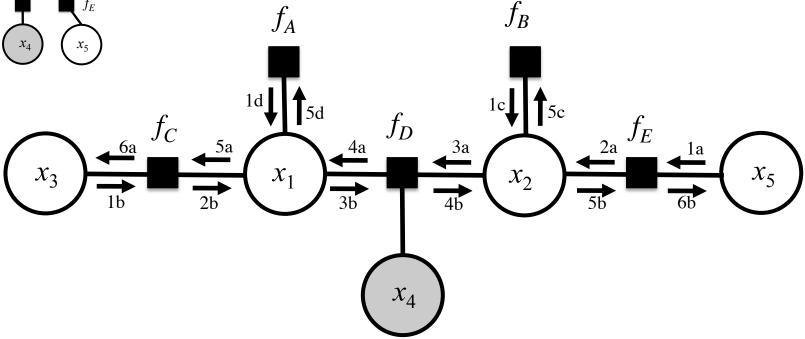
Numerical stability

- Multiplying many probabilities quickly leads to very small numbers
- The sum-product algorithm is often implemented with re-scaling
- Alternatively or additionally the computations can be performed in log space leading to computations of the form $c = \log(\exp(a) + \exp(b))$
- To help prevent loss of precision when computing the exponents, use the equivalent expression with the smaller exponent below

$$c = \log(e^a + e^b) = a + \log(1 + e^{b-a}) = b + \log(1 + e^{a-b})$$



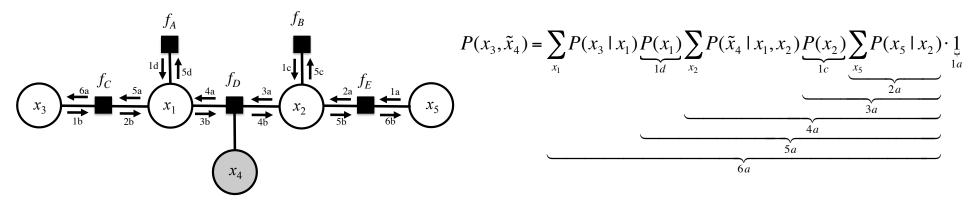
Sum product messages



$$P(x_{3}, \tilde{x}_{4}) = \sum_{x_{1}} P(x_{3} \mid x_{1}) \underbrace{P(x_{1})}_{1d} \underbrace{\sum_{x_{2}} P(\tilde{x}_{4} \mid x_{1}, x_{2})}_{x_{2}} \underbrace{P(x_{2})}_{1c} \underbrace{\sum_{x_{5}} P(x_{5} \mid x_{2})}_{3a} \cdot \underbrace{\frac{1}{1}}_{1a}$$

6*a*

The messages for our example



1a:
$$\mu_{x_5 \to f_E}(x_5) = 1$$
, 1c: $\mu_{f_B \to x_2}(x_2) = f_B(x_2)$, 1d: $\mu_{f_A \to x_1}(x_1) = f_A(x_1)$

2a:
$$\mu_{f_E \to x_2}(x_2) = \sum_{x_5} f_E(x_5, x_2)$$

3a:
$$\mu_{x_2 \to f_D}(x_5) = \mu_{f_B \to x_2}(x_2) \mu_{f_E \to x_2}(x_2)$$

$$4a: \mu_{f_D \to x_1}(x_1) = \sum_{x_2} f_D(\tilde{x}_4 \mid x_1, x_2) \mu_{x_2 \to f_D}(x_5)$$

5a:
$$\mu_{x_1 \to f_C}(x_1) = \mu_{f_A \to x_1}(x_1) \mu_{f_D \to x_1}(x_1)$$

6a:
$$\mu_{f_C \to x_3}(x_3) = \sum_{x_1} f_C(x_3, x_1) \mu_{x_1 \to f_C}(x_1)$$

The complete algorithm can yield all single-variable marginals in the graph using the other messages shown in the diagram

Finding the Most Probable Explanation

with the max-product algorithm

Finding the most probable configuration

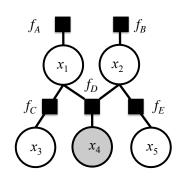
• Finding the most probable configuration of all other variables in our example given $x_4 = \tilde{x}_4$ involves searching for

$$\left\{x_1^*, x_2^*, x_3^*, x_5^*\right\} = \underset{x_1, x_2, x_3, x_5}{\operatorname{argmax}} P(x_1, x_2, x_3, x_5 \mid \tilde{x}_4),$$

for which

$$P(x_1^*, x_2^*, x_3^*, x_5^* \mid \tilde{x}_4) = \max_{x_1, x_2, x_3, x_5} P(x_1, x_2, x_3, x_5 \mid \tilde{x}_4).$$

Pushing max to the right



- Because max behaves in a similar way to sum, like in the sum-product algorithm we can push the max operations as far to the right as possible, noting that $\max(ab,ac) = a\max(b,c)$
- For our example we have

$$\max_{x_1} \max_{x_2} \max_{x_3} \max_{x_5} P(x_1, x_2, x_3, \tilde{x}_4, x_5)$$

$$= \max_{x_3} \max_{x_1} P(x_1) P(x_3 \mid x_1) \max_{x_2} P(x_2) P(\tilde{x}_4 \mid x_1, x_2) \max_{x_5} P(x_5 \mid x_2).$$

The max-sum algorithm

- A log-space version of max-product
- As in the sum-product algorithm, variables or factors that have only one connection in the graph begin by sending either:
 - a function-to-variable message $\mu_{x\to f}(x) = 0$
 - or a variable-to-function message $\mu_{f \to x}(x) = \log f(x)$
- Each function and variable node in the graph waits until it has received a message from all neighbors other than the node that will receive its message

Function to variable messages

- Each function and variable node in the graph waits until it has received a message from all neighbors other than the node that will receive its message
- Function nodes send messages of the following form to variable x

$$\mu_{f\to x}(x) = \max_{x_1,\dots,x_K} \left[\log f(x,x_1,\dots,x_K) + \sum_{k\in N(f)\setminus x} \mu_{x_k\to f}(x_k) \right],$$

where the notation $N(f)\setminus x$ is the same as for the sum-product algorithm above

Variable to function messages

Variables send messages to functions of this form

$$\mu_{x\to f}(x) = \sum_{k\in N(x)\setminus f} \mu_{f_k\to x}(x),$$

where the sum is over the messages from all functions other than the recipient function.

 When the algorithm terminates, the probability of the most probable configuration (MPC) can be extracted from any node using

$$p^* = \max_{x} \left[\sum_{k \in N(x)} \mu_{f_k \to x}(x) \right], \quad \text{the MPC} \quad x^* = \arg\max_{x} \left[\sum_{k \in N(x)} \mu_{f_k \to x}(x) \right].$$