# Construcción e inferencia en redes bayesianas con R

Modelos gráficos probabilísticos

Francisco Luque Sánchez

29/02/2020

#### 1 Introducción

En esta práctica se mostrará la modelización de redes bayesianas utilizando las librerías gRain y bnlearn de R. Partiremos del enunciado de un problema de pequeño tamaño que puede modelarse utilizando redes bayesianas.

La práctica está basada en el problema que definimos para la práctica anterior. En dicho problema, establecimos un enunciado en el que se relacionaban infecciones de las vías urinarias con diversos factores de riesgo y algunas pruebas médicas. El contexto médico es un ámbito de aplicación directo de las redes bayesianas, y es por esto por lo que decidimos modelar un problema en este contexto.

En esta práctica vamos a llevar la implementación de dicha red bayesiana a R. Utilizaremos dos librerías que nos permiten trabajar con este tipo de modelos. En una primera sección, especificaremos el problema con el que vamos a trabajar, y mostraremos la red bayesiana que lo modela, así como las tablas de probabilidades que necesitamos para trabajar. En una segunda etapa, mostraremos qué secuencia de órdenes tenemos que especificar en R para crear esta estructura de red y especificar las probabilidades. Finalmente, pondremos algunos ejemplos de cálculo de probabilidades tanto con métodos exactos como con métodos probabilísticos, y comprobaremos la d-separación de algunas de nuestras variables.

Comenzamos dando el enunciado del problema que vamos a modelar.

### 2 Enunciado del problema

#### El problema con el que trabajaremos es el siguiente:

Existen dos tipos principales de infecciones del aparato urinario, la infección de las vías urinarias bajas y de las vías urinarias altas. Ambas infecciones están fuertemente relacionadas con el consumo de agua diario, siendo más probables cuando dicho consumo es demasiado bajo o demasiado alto. Además, la infección de las vías bajas puede producirse por falta de higiene. La predisposición a sufrir una infección en las vías altas tiene cierto componente genético, así que el historial familiar resulta relevante. Por otro lado, no es extraño que una infección en las vías bajas produzca una infección en las altas.

Existen varias pruebas que nos permiten discernir si se está sufriendo alguna enfermedad urinaria. En primer lugar, un análisis de orina nos muestra la presencia de infección en alguna de las vías. De forma más concreta, se puede hacer un cultivo de una biopsia para confirmar la infección en las vías inferiores. Para las vías superiores, puede observarse cierta inflamación tras realizar una ecografía.

## 3 Descripción de la red

Dado el enunciado anterior, vamos a describir la red de forma cualitativa (especificando la estructura de una red que represente todas las condiciones especificadas anteriormente) y de forma cuantitativa (asignando las probabilidades necesarias para describir completamente el problema). No detallaremos en profundidad la construcción de la red, ya que no es el objetivo de esta práctica.

#### 3.1 Descripción cualitativa

Comenzamos identificando las variables involucradas (por orden de aparición):

- Infección de las vías bajas (IB)
- Infección de las vías altas (IA)
- Consumo de agua (CA)
- Falta de higiene (FH)
- Historial familiar (HF)
- Análisis de orina (AO)
- Cultivo de la biopsia (CB)
- Inflamación en la ecografía (IE)

Establecemos el orden en el que introducimos las variables en el grafo. Como ya sabemos, se deben introducir comenzando por las causas, de forma que cuando se va a introducir una variable ya se han introducido todas aquellas de las que depende. Un posible orden de introducción de nuestras variables es el siguiente:

$$CA \rightarrow FH \rightarrow HF \rightarrow IB \rightarrow IA \rightarrow AO \rightarrow CB \rightarrow IE$$

Tenemos las tres primeras, que hacen referencia a los factores de riesgo y que son independientes de todos los demás nodos, después las dos infecciones (metemos la de las vías bajas primero porque la de las vías altas también depende de ésta), y por último las tres posibles pruebas, cuyos resultados estarán influenciados por ambas enfermedades. Una vez introducidas todas las variables en el grafo y colocadas todas las relaciones de dependencia, el grafo final queda de la siguiente manera:

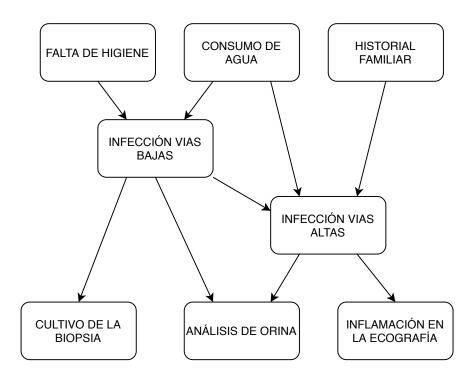


Figure 1: Red bayesiana completa

A continuación, especificamos las tablas de probabilidades que necesitamos para definir el sistema completo.

#### 3.2 Descripción cuantitativa

Para dar la descripción completa de una red bayesiana tenemos que especificar, además de la estructura de la red, las tablas de probabilidad de cada uno de los nodos. Para cada nodo, tenemos que dar la probabilidad de cada uno de los posibles valores que puede tomar, condicionado a todas las posibles combinaciones de los valores de los padres. Comenzamos dando las tablas de probabilidad de los factores de riesgo, los cuales no dependen de ningún otro nodo de la red, y por tanto tendremos que especificar la probabilidad de cada uno de los valores que toman. Dichas tablas son las siguientes:

FH = Sí FH = No	CA = Bajo	CA = Medio	CA = Alto	HF = Sí	HF = No
0.2 0.8	0.1	0.85	0.05	0.3	0.7

**Table 1:** Falta de higiene **Table 2:** Consumo de agua **Table 3:** Historial familiar

Ahora, tenemos que definir las probabilidades para las enfermedades. Tenemos que especificar las

probabilidades condicionadas a todas las posibles parejas de valores de los padres. Comenzamos con la infección de las vías bajas. Los dos padres son la falta de higiene y el consumo de agua. La primera toma dos valores y la segunda, tres. Tendremos, por tanto, seis combinaciones posibles, y para cada uno de estos seis valores, tendremos que especificar la probabilidad de sí y no, dando lugar a un total de 12 valores:

	FH = Sí	FH = No	FH = Sí	FH = No	FH = Sí	FH = No
	CA = Alto	CA = Alto	CA = Medio	CA = Medio	CA = Bajo	CA = Bajo
IB = Sí	0.4	0.35	0.2	0.05	0.3	0.25
IB = No	0.6	0.65	0.8	0.95	0.7	0.75

**Table 4:** Probabilidades condicionadas de la infección en las vías bajas

Pasamos ahora a la definición de las probabilidades para las vías altas. Ahora tenemos tres padres. Dado que el tamaño de la tabla aumenta significativamente (tenemos que especificar 24 valores distintos), vamos a separar la información en dos tablas distintas. En una tabla pondremos los valores de las probabilidades de padecer una infección en las vías altas, y en la otra las de no padecerla. Es conveniente observar que una de las tablas es redundante con la otra, debido a que por el teorema de la probabilidad total se puede obtener toda la información. De la misma manera, en la tabla anterior, una fila habría sido suficiente. No obstante, especificaremos todas las probabilidades en todos los casos para hacer más explícita la información:

IA = Sí	HF = Sí	HF = No	HF = Sí	HF = No	HF = Sí	HF = No
	CA = Alto	CA = Alto	CA = Medio	CA = Medio	CA = Bajo	CA = Bajo
IB = Sí	0.6	0.35	0.5	0.15	0.4	0.35
IB = No	0.5	0.25	0.35	0.03	0.3	0.15

**Table 5:** Probabilidades condicionadas para el caso Sí en la infección en las vías altas

			IA = Sí IB = No	
AO = Sí	0.99	0.94	0.88	0.03
AO = No	0.01	0.06	0.12	0.97

**Table 9:** Análisis de orina

IA = No	HF = Sí	HF = No	HF = Sí	HF = No	HF = Sí	HF = No
IA – NO	CA = Alto	CA = Alto	CA = Medio	CA = Medio	CA = Bajo	CA = Bajo
IB = Sí	0.4	0.65	0.5	0.85	0.6	0.65
IB = No	0.5	0.75	0.65	0.97	0.7	0.85

**Table 6:** Probabilidades condicionadas para el caso No en la infección en las vías altas

Finalmente, queda especificar las tablas de las tres pruebas. En el caso de la biopsia y la ecografía, tendremos que dar 4 valores de probabilidad, dado que ambas pueden tomar dos valores, al igual que sus padres. Para el análisis de orina, serán 8 en total:

	IB = Sí	IB = No
CB = Sí	0.97	0.07
CB = No	0.03	0.93

**Table 7:** Cultivo de la biopsia

	IA = Sí	IA = No
IE = Sí	0.95	0.02
IE = No	0.05	0.98

**Table 8:** Inflamación en la ecografía

Ya tenemos completamente definida nuestra red bayesiana, con todas las probabilidades necesarias especificadas. En la siguiente sección vamos a traducir esta red a una red en R utilizando gRain.

# 4 Implementación de la red en R

Como hemos dicho anteriormente, vamos a proceder a la implementación de esta red en R. Para ello, utilizaremos el paquete gRain.

Comenzamos definiendo la lista de variables, así como de las variables de las que dependen, y convertimos dicha lista en un grafo dirigido acíclico:

Ahora, definimos para cada variable los posibles estados que puede tomar:

```
## Variables states definition
FH.st <- c("Si", "No")
CA.st <- c("Alto", "Medio", "Bajo")
HF.st <- c("Si", "No")
IB.st <- c("Si", "No")
CB.st <- c("Positivo", "Negativo")
AO.st <- c("Positivo", "Negativo")
IE.st <- c("Presente", "Ausente")</pre>
```

Y construimos las tablas de probabilidad:

```
## PROBABILITIES DEFINITION
 ## Risk factors
 FH.CPT <- cptable(~FH, values=c(0.2, 0.8), levels=FH.st)</pre>
CA.CPT <- cptable(~CA, values=c(0.05, 0.85, 0.1), levels=CA.st)
HF.CPT <- cptable(~HF, values=c(0.3, 0.7), levels=HF.st)</pre>
 ## Diseases
 IB.CPT <- cptable(</pre>
                     ~IB+FH+CA,
                     values=c(0.4, 0.6, 0.35, 0.65, 0.2, 0.8, 0.05, 0.95, 0.3, 0.7, 0.25,
                        \rightarrow 0.75),
                     levels=FH.st
 )
 IA.CPT <- cptable(</pre>
                      ~IA+CA+HF+IB,
                     values=c(0.6, 0.4, 0.5, 0.5, 0.4, 0.6, 0.35, 0.65, 0.15, 0.85, 0.35, 0.35, 0.65, 0.15, 0.85, 0.85, 0.35, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0.85, 0
                        \rightarrow 0.65,
```

Construimos las tablas de probabilidades condicionadas de todo el modelo, y comprobamos que en efecto los valores que hemos introducido coinciden con las tablas que definimos en el enunciado del problema (mostramos una única tabla):

```
## , , IB = Si
##
##
## AO
           Si No
## Positivo 0.99 0.94
   Negativo 0.01 0.06
## , , IB = No
##
##
           IΑ
## AO
           Si
## Positivo 0.88 0.03
##
   Negativo 0.12 0.97
```

Podemos comprobar que el resultado parece correcto, así que hemos introducido la información correctamente en la red. La introducción de las probabilidades en la red puede no ser trivial, ya que depende del orden en el que se especifiquen las variables. Una vez creadas las tablas de probabilidades, convertimos dicha información a un objeto de tipo red bayesiana:

```
## Creation of grain object
bayesian.network <- grain(potential.list)
bayesian.network.compiled <- compile(bayesian.network)</pre>
```

Ahora, podemos hacer consultas sobre las probabilidades en nuestra red:

```
## Exact queries over the network (no evidence)
querygrain(bayesian.network.compiled, nodes="IA")
querygrain(bayesian.network.compiled, nodes="IB")
```

```
## $IA
## IA
## Si No
## 0.157842 0.842158
##
## $IB
## IB
## IB
## O.112 0.888
```

En la consulta anterior, podemos ver cómo se ha aplicado la operación de marginalización para producir los resultados. Aunque nosotros no hemos especificado explícitamente estas probabilidades en ningún momento, sí que hemos especificado las probabilidades condicionadas de estas dos variables a todas las posibles combinaciones de sus padres, así como las probabilidades completas para los padres. Esto hace que la probabilidad de estas dos variables se pueda calcular por completo. Para comprobar la corrección de la información que hemos introducido, mostramos la red que implementamos en Elvira para la práctica anterior, en la que se puede observar que las probabilidades para estas dos variables coinciden en ambos casos, si redondeamos los valores anteriores a dos decimales:

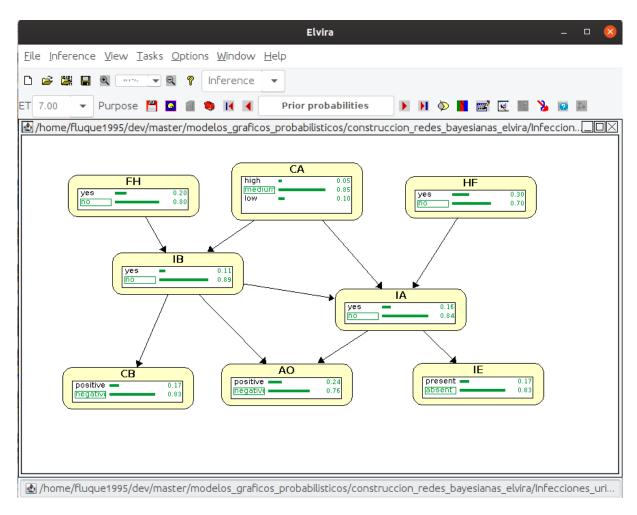


Figure 2: Red bayesiana construida en Elvira

A continuación, mostraremos cómo podemos realizar consultas sobre la red que hemos construido, una vez fijamos algunas observaciones.

# 5 Consultas sobre la red bayesiana

En este apartado vamos a estudiar cómo introducir evidencia en nuestra red, y calcular probabilidades fijadas dichas observaciones. En primer lugar, estudiaremos cómo se modifican las probabilidades de padecer las dos enfermedades en función de los resultados en algunas pruebas. Comenzamos fijando nuestra evidencia, la cual será haber dado positivo en las prueba del cultivo de la biopsia y el análisis de orina:

```
## Evidence introduction
evidence.1 <- setEvidence(
    bayesian.network.compiled,
    nodes=c("CB", "AO"), states=c("Positivo", "Positivo")
)</pre>
```

Una vez introducida dicha evidencia, podemos calcular las probabilidades de padecer las enfermedades, tanto viendo las marginales para cada variable como la distribución conjunta:

```
## Query, both joint and marginal, for diseases (exact method)
querygrain(evidence.1, nodes = c("IA", "IB"), type = "joint")
##
      IΑ
## IB
            Si
## Si 0.29302230 0.62551803
   No 0.06724943 0.01421025
querygrain(evidence.1, nodes = c("IA", "IB"), type = "marginal")
## STB
## IB
        Si
##
## 0.91854032 0.08145968
##
## $IA
## IA
       Si
##
## 0.3602717 0.6397283
```

Podemos observar cómo, dada la evidencia de las dos pruebas que nos permiten conocer si existe una infección en las vías bajas, la probabilidad de padecer dicha enfermedad ha crecido muchísimo. Además, dado que la infección de las vías altas está influenciada por la de las vías bajas, también ha aumentado la probabilidad de dicha infección, aunque de forma menos significativa.

Podemos llegar a los mismos resultados utilizando otras técnicas. A continuación, mostramos cómo podemos usar los métodos de Montecarlo para obtener las mismas probabilidades. En particular, obtendremos la probabilidad, dada la evidencia anterior, de padecer las dos enfermedades simultáneamente. Utilizaremos ahora bnlearn, por lo que tenemos que transformar nuestro modelo:

## [1] 0.291787

Lo que se hace en este caso es simular el experimento un número n de veces (en nuestro caso  $10^6$ ), y calcular la frecuencia en la que se observa el evento que hemos especificado. Si en alguna de las simulaciones no se da la evidencia que hemos especificado, dicha simulación se descarta y se repite el experimento. Podemos observar cómo este método nos da unos resultados más o menos similares a los que conseguimos con la inferencia exacta, pero no completamente precisos. En este contexto puede parecer que esta forma de calcular probabilidades no es adecuada, pero tiene la ventaja de ser mucho más eficiente que el método exacto de cálculo, por lo que si la red tiene una complejidad muy alta, puede no ser viable el cálculo exacto, y hay que recurrir a métodos como este.

Otra posible forma de hacer este cálculo, para obtener los resultados más completos, consiste en simular experimentos y calcular las tablas por nuestra parte, en lugar de establecer específicamente el evento en el que estamos interesados:

```
## IA
## IB Si No
## Si 0.29047088 0.62764846
## No 0.06827523 0.01360544
```

De esta forma hemos obtenido  $10^6$  muestras del experimento, y hemos calculado las tablas de combinaciones que obtenemos. Después hemos convertido esos resultados absolutos en tantos por 1, y obtenemos las probabilidades.

Resulta interesante observar cómo, si el número de experimentos no es suficientemente grande, las probabilidades calculadas por el método de Montecarlo pierden precisión significativamente. Con  $10^6$  muestras obtenemos una precisión cercana a los 2 decimales. Si reducimos el número de muestras a 100:

```
## IA
## IB Si No
## Si 0.1875 0.7500
## No 0.0000 0.0625
```

El resultado empeora significativamente. Esto pone de manifiesto la importancia de tener un número de muestras considerablemente alto.

Pasamos a estudiar un experimento distinto. Ahora, introduciremos información sobre el consumo de agua, antecedentes familiares, y presencia de inflamación en la ecografía:

```
## Evidence introduction
evidence.2 <- setEvidence(
    bayesian.network.compiled,
    nodes=c("CA", "HF", "IE"), states=c("Bajo", "Si", "Presente")
)</pre>
```

De nuevo, calculamos las probabilidades de padecer las enfermedades por los tres métodos:

```
n=10^6)
prop.table(table(IAxIB))
```

```
## [1] "Método exacto"
##
## IB
            Si
## Si 0.3057120 0.009654063
## No 0.6525775 0.032056439
## $IB
## IB
## Si No
## 0.315366 0.684634
##
## $IA
## IA
##
        Si No
## 0.9582895 0.0417105
##
## [1] "Método de montercarlo para un valor"
## [1] "Muestreo aleatorio sobre la red y tablas de frecuencias"
##
## IB
              Si
                        No
##
   Si 0.31271759 0.01034200
   No 0.64550481 0.03143559
```

Donde podemos observar que los resultados que obtenemos son muy similares. Tenemos que dados los factores de riesgo y el positivo en la prueba de la ecografía, la probabilidad de padecer una infección en las vías superiores es muy alta.

Finalmente, vamos a utilizar el muestreo de Montecarlo para calcular probabilidades de sucesos más complejos. En particular, calcularemos la probabilidad de nuestras enfermedades en una unión de sucesos. Tendremos que la evidencia es haber dado positivo en el cultivo de la biopsia y saber que el consumo de agua es alto, o conocer que el consumo de agua es bajo y que hay inflamación en la ecografía. Como podemos observar, esta unión de sucesos es mucho más compleja de expresar en la inferencia exacta, pero su expresión es sencilla cuando utilizamos el enfoque probabilístico. No significa esto que no pueda calcularse dicha probabilidad de forma exacta, lo cuál sí es posible, pero requiere de cálculos más complejos. Con el enfoque probabilístico, calculamos esta probabilidad de la siguiente forma:

```
## [1] "Método de montecarlo para un valor"
## [1] 0.3707124
## [1] "Muestreo sobre la red y construcción de tabla de frecuencias"
## IB
## IA Si No
## Si 0.3737282 0.3292923
## No 0.2350729 0.0619066
```

Finalmente, vamos a aplicar el criterio de D-separación sobre nuestras variables. Esto nos permite conocer la independencia que existe entre las mismas. Comenzamos comprobando que los factores de riesgo, cuando el resto del grafo es desconocido, son independientes, ya que en todos los caminos que los unen hay algún patrón cabeza-cabeza con todas las variables sin observaciones:

```
## Given no information about the other variables, causes are independent
## due to head-to-head relations
dsep(bnl.network, x="FH", y="CA")
dsep(bnl.network, x="HF", y="CA")
dsep(bnl.network, x="HF", y="FH")

## [1] TRUE
```

```
## [1] TRUE
## [1] TRUE
## [1] TRUE
```

En cambio, en cuanto metemos información sobre alguna variable en el sistema, dejan de ser dseparables (no tiene por qué ser directamente el nodo en el que se produce la colisión, puede ser alguno de sus descendientes):

```
## Given any other variable, d-separation gets broken
dsep(bnl.network, x="HF", y="CA", z="AO")
```

```
## [1] FALSE
```

Por otra parte, no existe d-separación entre los factores de riesgo y las pruebas:

```
## Causes and consequences are dependent
dsep(bnl.network, x="HF", y="A0")
```

```
## [1] FALSE
```

De hecho, dada la relación que existe entre las dos enfermedades, el incluir una de ellas en el sistema sigue sin producir d-separación entre algunos pares de factores de riesgo y pruebas:

```
## Depending on the selected pair, the ovidence in one infection is
## not enough to establish d-separation
dsep(bnl.network, x="HF", y="AO", z=c("IB"))

## [1] FALSE

dsep(bnl.network, x="HF", y="AO", z=c("IA"))
```

En cambio, observadas ambas infecciones, sí se establece el criterio de d-separación entre ambos grupos de variables:

```
## Setting both diseases induces d-separation
dsep(bnl.network, x="HF", y="A0", z=c("IA", "IB"))
```

```
## [1] TRUE
```

## [1] FALSE