第18章：概率图模型
Probabilistic Graphic Model

刘智勇（zhiyong.liu@ia.ac.cn）
中国科学院自动化研究所

助教：杨学行(xhyang@nlpr.ia.ac.cn)
吴一超(yichao.wu@nlpr.ia.ac.cn)

上次内容简要回顾

- 特征提取
  - PCA
  - ICA
  - LDA
- 特征选择
  - Filter
  - Wrapper

提纲

- 概述
- 有向概率图模型
- 无向概率图模型
- 模型的推理

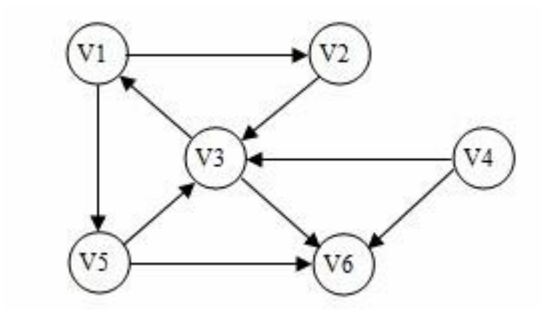
参考资料:

1. Bishop, C., Pattern Recognition and Machine Learning, Chapter 8
2. Murphy, K., An introduction to graphical models
3. Jordan M.I., An introduction to probabilistic graphical models

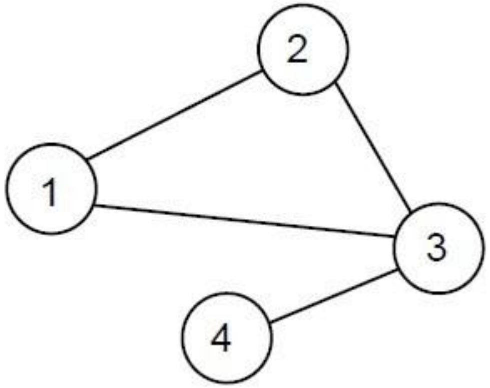
概述

图（graph）

- A graph comprises *nodes* (also called *vertices*) connected by *links* (also known as *edges* or *arcs*)
- Mathematically, a graph is denoted by $G = (V, E)$ where V is the set of nodes, and $E \in V \times V$ denotes the set of edges
- 图一般分为有向图和无向图



$V = \{V1, ..V6\}, E = \{\{1,2\}, \{1,5\}, \dots, \{5,6\}\}$



$V = \{1,2,3,4\}, E = \{\{1,2\}, \{1,3\}, \dots, \{3,4\}\}$

概述

概率图（Probabilistic Graph）

- 概率图 = 概率+图
- 提供了处理两类问题的合适手段：不确定性+复杂性（uncertainty and complexity ）
  - 图提供了模块：简单模块可以组合成复杂模型
  - 概率则保证各部分可以协调一致工作
  - 提供了一个方便直观的手段来描述随机变量间的dependency关系
- 很多模型可以看成是通用概率图模型的一个特例，包括Mixture Model，Factor Analysis, Hidden Markov Model, Kalman Filter, Markov Random Fields ……

概述

概率图（Probabilistic Graph）的表示（Representation）

- 图的节点表示随机变量
- 图的边（或者说变量之间没有边）意味着变量间的条件独立
- 为变量间的联合概率分布（joint probability distribution）提供了一个紧致（compact）的描述
  - 例如，表述N个二值变量的联合概率分布需要$O(2^N)$个参数，如果利用概率图的条件独立性把这些变量分解（factorization），参数的数量将指数级减少
- 对应于图模型，概率图模型也分为有向概率图和无向概率图
  - 有向概率图（directed graphical models），又称为贝叶斯网（Bayesian Networks）,belief networks, generative models等，利用贝叶斯规则推理，在机器学习和AI等领域较多使用
  - 无向概率图（undirected graphical models）:马尔科夫随机场（Markov random field），在计算机视觉领域较多使用

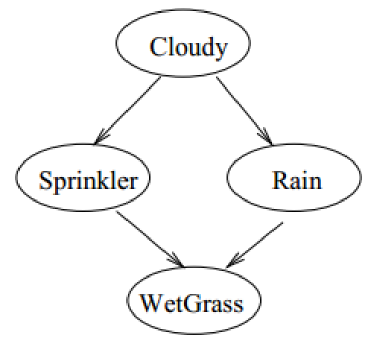
有向概率图

- 在变量（节点）A和B之间存在$A \rightarrow B$的边，称A为B的父节点，B为A的子节点。可以近似理解为A“导致”了B，因此不能有存在“循环”路径

一个简单的例子

- 每个节点代表一个二值变量
- “grass is wet”这个事件和“sprinkler”还有“rain”这两个事情相关，最下方表格它们之间的强度联系，这个表格称为“条件概率表格”（conditional probability table: CPT）；类似的还有“sprinkler”和“rain”这两个事件
- “cloudy”这个事件没有父节点，因此它的CPT被称为先验概率（prior probability）

P(C=F)	P(C=T)
0.5	0.5



C	P(S=F)	P(S=T)
F	0.5	0.5
T	0.9	0.1

C	P(R=F)	P(R=T)
F	0.8	0.2
T	0.2	0.8

S	R	P(W=F)	P(W=T)
F	F	1.0	0.0
T	F	0.1	0.9
F	T	0.1	0.9
T	T	0.01	0.99

有向概率图

- 贝叶斯网中的条件独立关系可以描述如下：给定一个贝叶斯网，给定一个节点A的父（parent）节点集合（$S(A)$），A独立于除$S(A)$外其它的祖先（ancestor）节点
- 利用上述原理来简化前面的例子
  - 利用chain rule

$$P(C,S,R,W)=P(C)P(S|C)P(R|C,S)P(W|C,S,R)$$

  - 利用上述条件独立关系

$$P(C,S,R,W)=P(C)P(S|C)P(R|C)P(W|S,R)$$

    - 给定C，R独立于S，记为$R\perp S|C$（有两竖），同样，有$W\perp C|S,R$
    - 一般来讲，利用条件独立关系可以更为紧致地描述联合概率分布， $O(2^N)$ v.s. $O(n2^k)$，这里k 表示图中所有节点具有的最多父节点数目
- Factorization:概率图最核心的性质！
  - 给定一个K个节点的有向概率图，它的联合概率分布可以表示为

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

pa_k表示x_k的父节点结合

有向概率图

条件独立（Conditional Independence）

- a is independent of b given c

$$p(a|b,c) = p(a|c)$$

- Equivalently

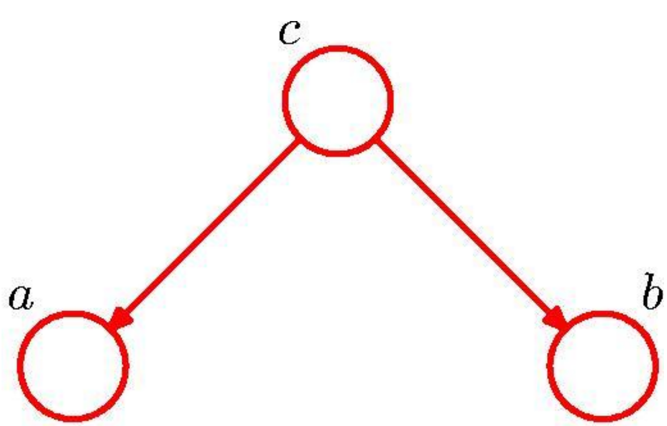
$$\begin{aligned} p(a,b|c) &= p(a|b,c)p(b|c) \\ &= p(a|c)p(b|c) \end{aligned}$$

- Notation

$$a \perp\!\!\!\perp b \mid c$$

有向概率图

- 条件独立：例子1



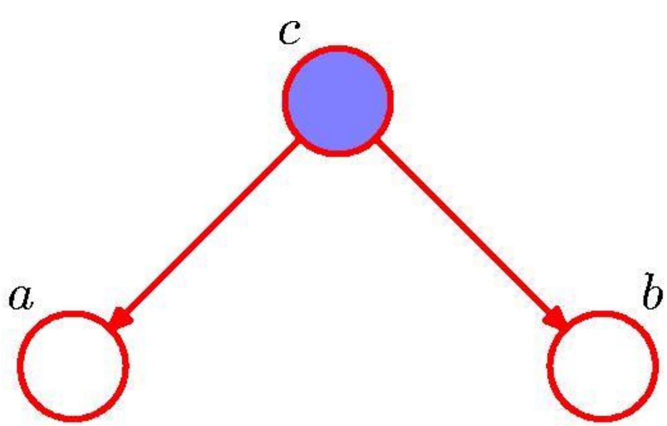
$$p(a,b,c) = p(a|c)p(b|c)p(c)$$

$$p(a,b) = \sum_c p(a|c)p(b|c)p(c)$$

$$a \not\perp\!\!\!\perp b \mid \emptyset$$

有向概率图

- 条件独立：例子1

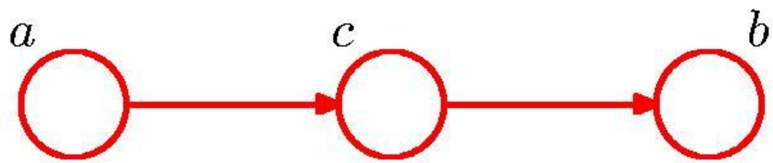


$$
\begin{aligned}
p(a, b|c) &= \frac{p(a, b, c)}{p(c)} \\
&= p(a|c)p(b|c)
\end{aligned}
$$

$$a \perp\!\!\!\perp b \mid c$$

有向概率图

- 条件独立：例子2



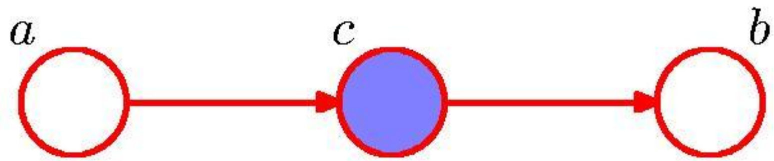
$$p(a,b,c) = p(a)p(c|a)p(b|c)$$

$$p(a,b) = p(a)\sum_c p(c|a)p(b|c) = p(a)p(b|a)$$

$$a \not\perp\!\!\!\perp b \mid \emptyset$$

有向概率图

- 条件独立：例子2

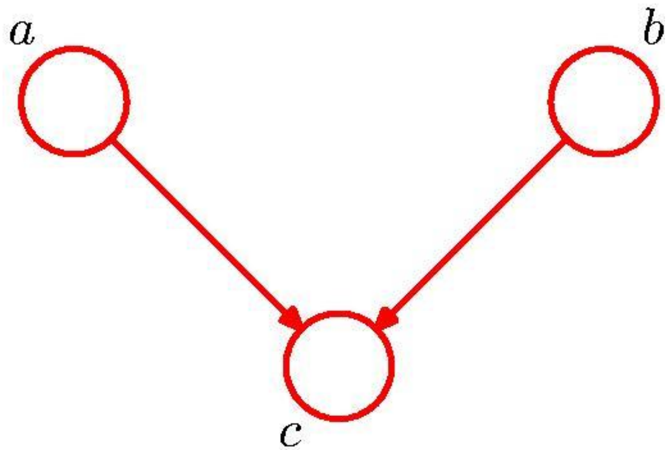


$$
\begin{aligned}
p(a,b|c) &= \frac{p(a,b,c)}{p(c)} \\
&= \frac{p(a)p(c|a)p(b|c)}{p(c)} \\
&= p(a|c)p(b|c)
\end{aligned}
$$

$$a \perp\!\!\!\perp b \mid c$$

有向概率图

- 条件独立：例子3



$$p(a, b, c) = p(a)p(b)p(c|a, b)$$

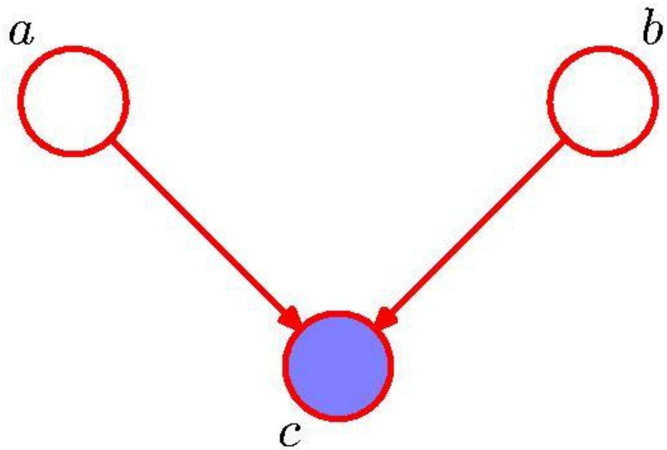
$$p(a, b) = p(a)p(b)$$

$$a \perp\!\!\!\perp b \mid \emptyset$$

Note: this is the opposite of Example 1, with c unobserved.

有向概率图

- 条件独立：例子3



$$p(a,b|c) = \frac{p(a,b,c)}{p(c)} = \frac{p(a)p(b)p(c|a,b)}{p(c)}$$

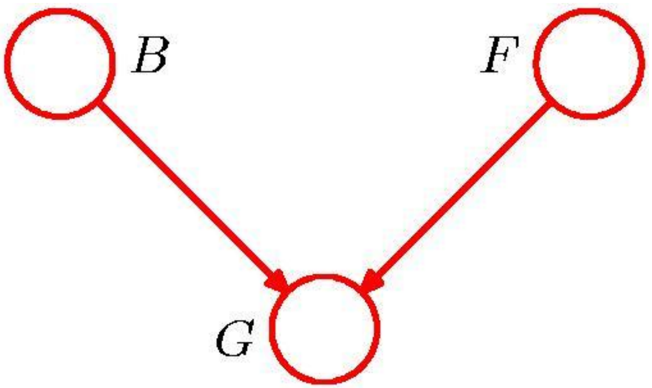
$$a \not\perp\!\!\!\perp b \mid c$$

Note: this is the opposite of Example 1, with c observed.

有向概率图

例子3，一个具体的案例

$$
\begin{aligned}
p(G=1|B=1,F=1) &= 0.8 \\
p(G=1|B=1,F=0) &= 0.2 \\
p(G=1|B=0,F=1) &= 0.2 \\
p(G=1|B=0,F=0) &= 0.1
\end{aligned}
$$



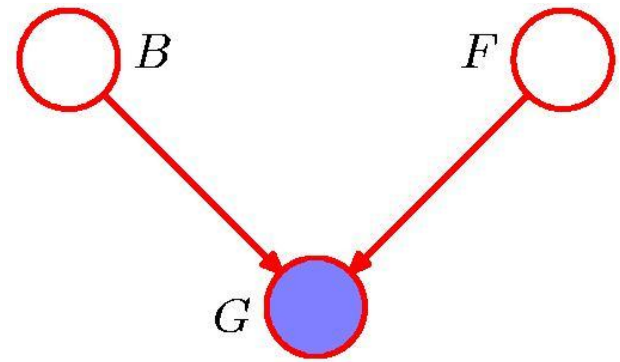
$$
\begin{aligned}
p(B=1) &= 0.9 \\
p(F=1) &= 0.9
\end{aligned}
$$

and hence

$$
p(F=0) = 0.1
$$

B = Battery (0=flat, 1=fully charged)
F = Fuel Tank (0=empty, 1=full)
G = Fuel Gauge Reading (0=empty, 1=full)

有向概率图



例子3，一个具体的案例

- 当观察到$G = 0$时

$$p(F=0|G=0) = \frac{p(G=0|F=0)p(F=0)}{p(G=0)}$$

$$p(G=0) = \sum_{B=\{0,1\}} \sum_{F=\{0,1\}} p(G=0,B,F)$$

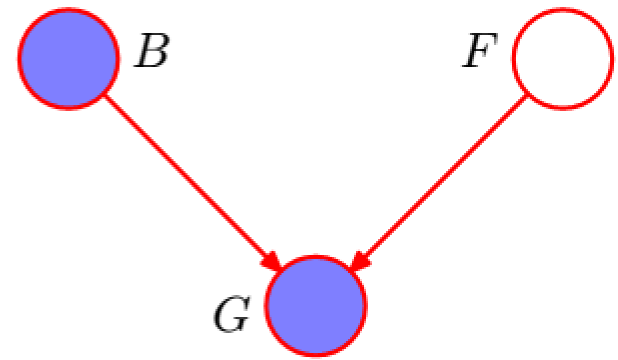
$$= \sum_{B=\{0,1\}} \sum_{F=\{0,1\}} p(G=0|B,F)p(B)p(F) = 0.315$$

$$p(G=0|F=0) = \sum_{B=\{0,1\}} p(G=0|B,F=0)p(B) = 0.81$$

$$p(F=0|G=0) = \frac{0.81 * 0.1}{0.315} \approx 0.257 > p(F=0)!!$$

Probability of an empty tank increased by observing G = 0.

有向概率图



例子3，一个具体的案例

- 假如我们同时又观察到$B = 0$

$$p(F=0|G=0,B=0) = \frac{p(F=0,G=0,B=0)}{p(G=0|B=0)p(B=0)}$$

$$= \frac{p(G=0|B=0,F=0)p(F=0)p(B=0)}{\sum_{F=\{0,1\}} p(G=0|B=0,F)p(F)p(B=0)}$$

$$= \frac{0.9 * 0.1}{0.9 * 0.1 + 0.8 * 0.9}$$

$$\approx 0.111 \quad \begin{cases} > p(F=0) \\ < p(F=0|G=0) \end{cases}$$

有向概率图

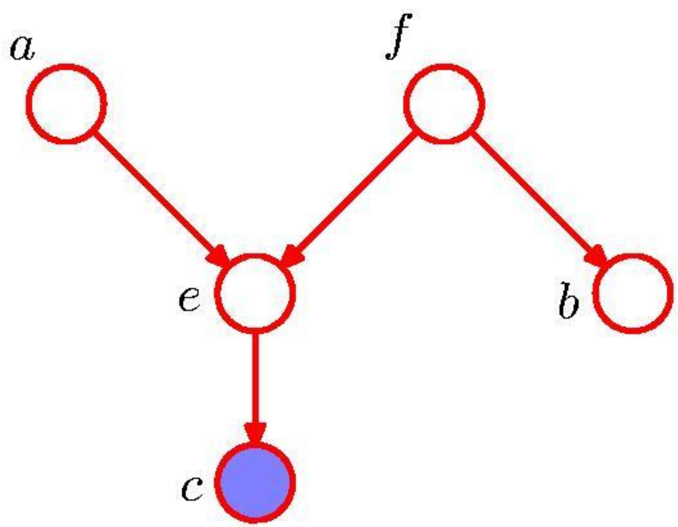
D-separation (D代表“directed”, Pearl 1988)

- A, B, and C are non-intersecting subsets of nodes in a directed graph.
- A path from A to B is blocked if it contains a node such that either
  a) the arrows on the path meet either head-to-tail or tail-to-tail at the node, and the node is in the set C, or
  b) the arrows meet head-to-head at the node, and neither the node, nor any of its descendants, are in the set C.
- If all paths from A to B are blocked, A is said to be d-separated from B by C.
- If A is d-separated from B by C, the joint distribution over all variables in the graph satisfies

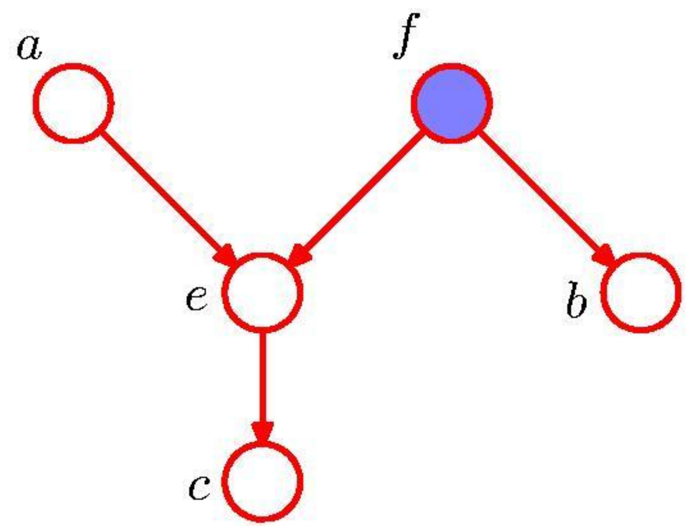
$$A \perp\!\!\!\perp B \mid C$$

有向概率图

D-separation 例子



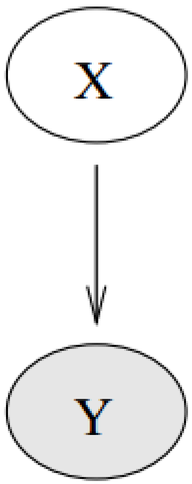
$a \not\!\perp\!\!\!\perp b \mid c$



$a \perp\!\!\!\perp b \mid f$

有向概率图

- 当节点中的变量是连续变量时，连续贝叶斯网，它的条件概率被称为条件概率分布（conditional probability distribution: CPD）
  - 右边这个最简单的例子，它代表了 $P(X,Y)=P(X)P(Y|X)$，此时CPD一般为参数模型，例如常见的高斯分布等
  - Y是灰色表示Y是被观察到的变量，而X则是隐变量



- 概率图模型最常见的两类任务：
  - 推理（inference），给定观察变量数据（Y），如何推断出隐藏变量的状态？
  - 学习（learning），如何学习模型中的参数（例如高斯分布的参数）和结构（本课程不涉及）

有向概率图

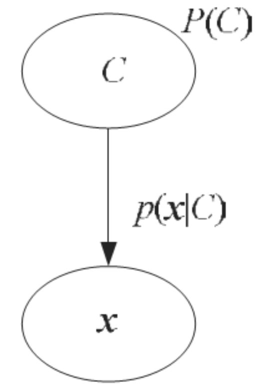
几个典型例子

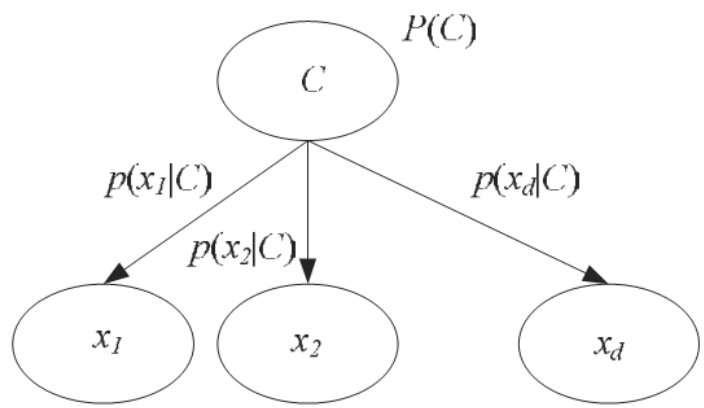
- 朴素贝叶斯（Naïve Bayes）
  - 模型，x：输入，C：类别，一般为多项式分布
  - 分类：求$p(C|x)$，利用Bayes公式

$$p(C|x) = \frac{p(x|C)p(C)}{p(x)}$$

  - 如果x维数很高，那么$p(x|C)$难以估计（维数灾）
  - Naïve Bayes (NB)假设给定C，$x = \{x_1, x_2, \ldots x_d\}$之间相互独立

$$p(x|C) = \prod_{i=1}^{d} p(x_i|C)$$





有向概率图

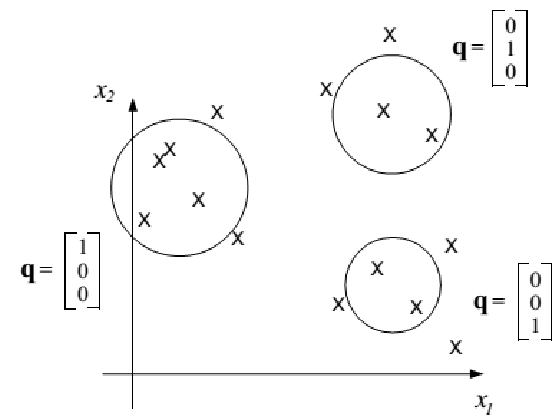
几个典型例子

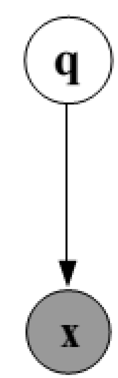
- 混合高斯模型（Mixture of Gaussian）
  - 隐藏变量$q=[q_1,q_2,\dots,q_k]^T$为多项式随机变量，先验概率为

    $$\pi_i=P(q_i=1)$$

  - 观察（输出）量x为高斯变量,类-条件（class-conditional）概率为高斯分布

    $$p(x|q_i=1)=G(x|\Sigma_i,\mu_i)$$

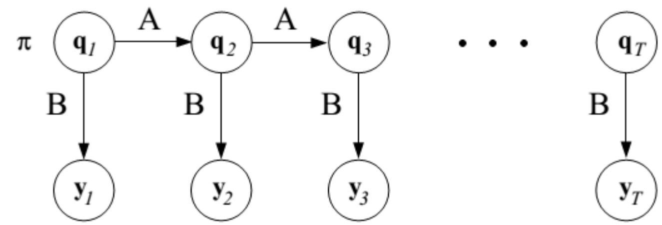




- 推理问题（聚类问题）为

$$p(q_i=1|x)=\frac{\pi_i G(x|\Sigma_i,\mu_i)}{\sum_i \pi_i G(x|\Sigma_i,\mu_i)}$$

有向概率图



几个典型例子

- 隐马尔科夫模型（Hidden Markov Model）
  - 一类著名的时序模型，也可称为动态混合模型（mixture model with dynamics）
  - T为时间，$\boldsymbol{q}_t$是一个多项式变量（M个状态），状态之间的转移矩阵$A = P(\boldsymbol{q}_{t+1}|\boldsymbol{q}_t)$，最初状态为$\pi = P(\boldsymbol{q}_1)$
    - A不随时间变化，则称为齐次马尔科夫链
  - Y可以为离散的（多项式变量），也可以是连续的，如高斯（混合高斯）$p(y_t = y|\boldsymbol{q}_t = i) = G(y|\Sigma_i, \mu_i)$
  - 马尔科夫性质如$P(\boldsymbol{q}_{t+1}|\boldsymbol{q}_t, \boldsymbol{q}_{t-1}) = P(\boldsymbol{q}_{t+1}|\boldsymbol{q}_t)$，它的联合概率分布为

$$p(q, y) = p(\boldsymbol{q}_1)p(y_1|\boldsymbol{q}_1)\prod_{t=2}^{T} p(\boldsymbol{q}_t|\boldsymbol{q}_{t-1})p(y_t|\boldsymbol{q}_t)$$

  - 推理问题为给出观察数据y_t，如何计算隐藏节点（状态）的后验概率

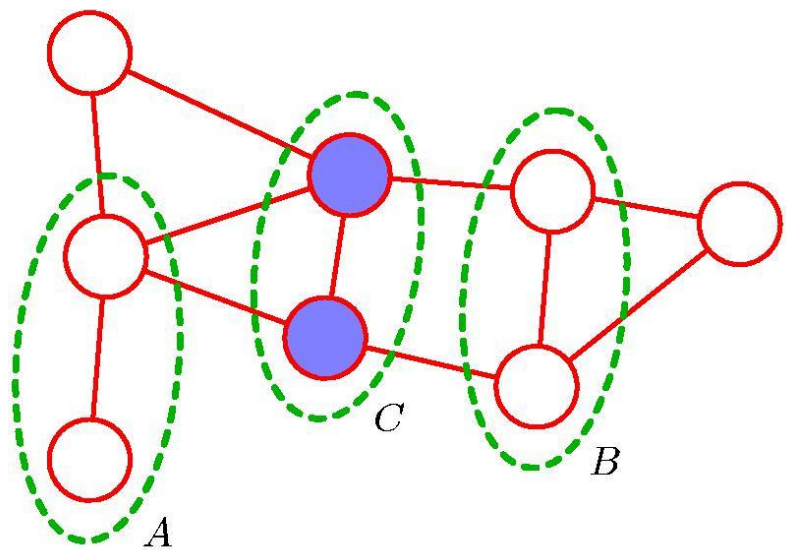
无向概率图（MRF）

- 也称为马尔科夫随机场（Markov random field：MRF）或者马尔科夫网（Markov networks），处理图像的天然利器！

- MRF的条件独立性相对容易判断

$$A \perp\!\!\!\perp B \mid C$$

  ✓ 将C以及和它相连的边去除，A，B之间不再存在通路
  ✓ A，B的任何通路之间必须经过至少C中的一个节点



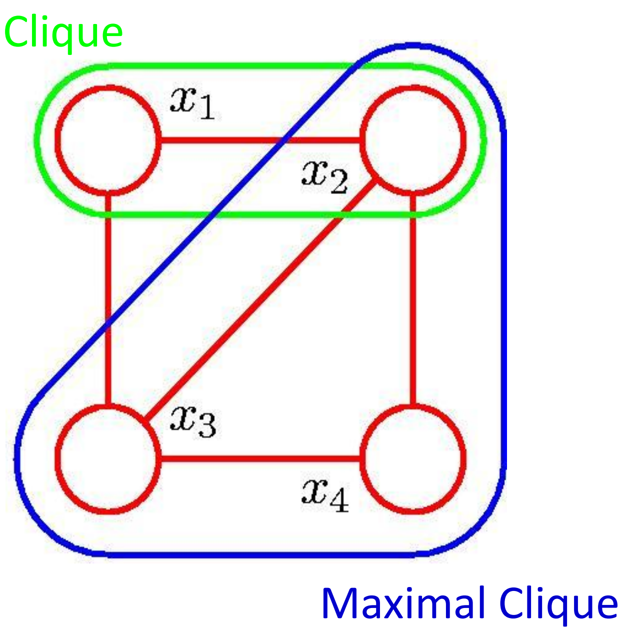
无向概率图（MRF）

Factorization

- 不直接相连的两个节点x_i, x_j不应该出现在一起，因为

  $$p(x_i, x_j | \boldsymbol{x} \backslash \{x_i, x_j\}) = p(x_i | \boldsymbol{x} \backslash \{x_i, x_j\}) p(x_j | \boldsymbol{x} \backslash \{x_i, x_j\})$$

- 定义“簇”（clique）
  - 图的一个子集，其中所有的节点都两两相连
  - 右图包含5个簇
  - 最大簇，“规则”图中只需要考虑最大簇



无向概率图（MRF）

Joint distribution

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z}\prod_{C}\psi_C(\mathbf{x}_C)$$

- where $\psi_C(\mathbf{x}_C)$ is the potential over clique C and

$$Z = \sum_{\mathbf{x}}\prod_{C}\psi_C(\mathbf{x}_C)$$

is the normalization coefficient; note: M K-state variables $\rightarrow$ K^M terms in Z. 相对于有向图则没有此项

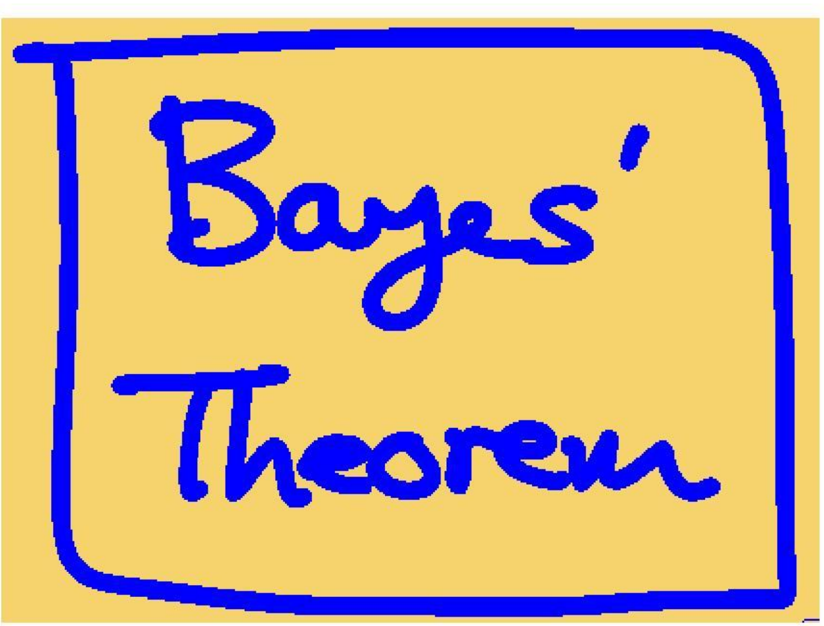
- Energies and the Boltzmann distribution

$$\psi_C(\mathbf{x}_C) = \exp\{-E(\mathbf{x}_C)\}$$

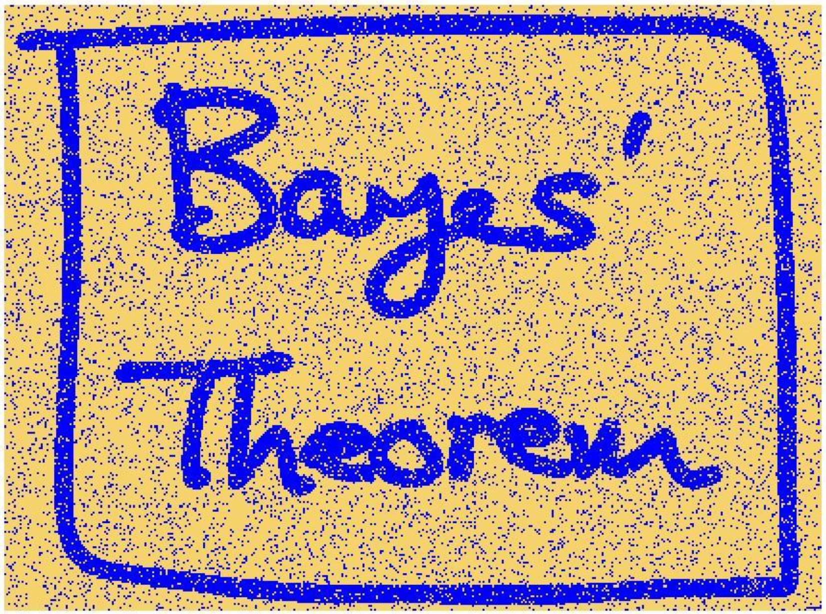
- Distribution的相乘 = 能量的相加 ---- 计算机视觉中的能量最小化方法
- 如何设计E是一个关键问题！

无向概率图（MRF）

一个简单的例子：图像去噪



Original Image

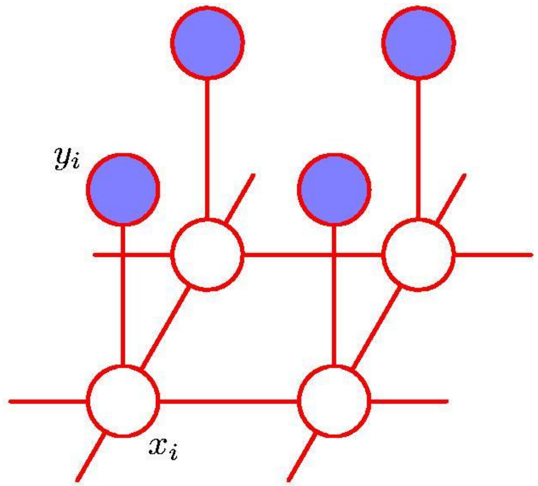


Noisy Image

无向概率图（MRF）

一个简单的例子：图像去噪

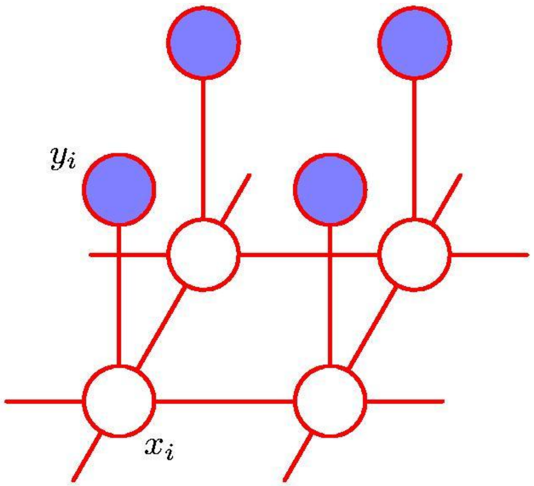
- Observed image $y_i = \{-1, 1\}, i = 1,2, \dots N, N$ 为总的像素数目
- y是被噪声污染观察到的变量（图像），x是隐藏变量（待复原的图像）
- 相邻像素间的值相关，也即相邻的x值相关；x和对应的y值相关
- 构建一个MRF，包含两类clique，即$\{x_i, x_j\}, \{x_i, y_i\}$



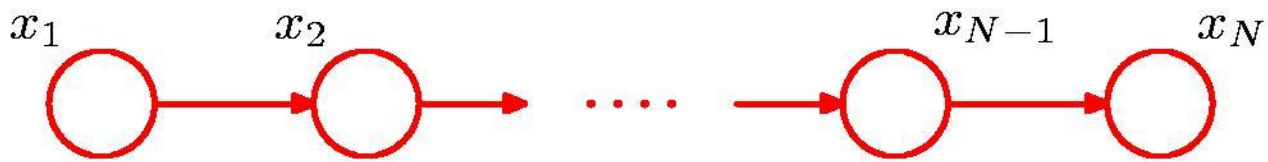
无向概率图（MRF）

一个简单的例子：图像去噪

- 针对两类clique设计能量函数
  - $\{x_i, x_j\}$：$V_{ij} = x_i x_j$，使得两者尽量相同，smooth先验
  - $\{x_i, y_i\}$：$d_i = x_i y_j$，使得两者尽量相同，likelihood
  - $E(X,Y) = \beta \sum_{\{i,j\}} V_{ij} + \eta \sum_i d_i$
  - $p(X,Y) = \frac{1}{Z} e^{-E(X,Y)}$
- Y为观察到的变量，$p(X,Y)$某种意义上反映了$p(X|Y)$，因此，我们最大化$p(X,Y)$，也就是最小化能量函数
- 计算机视觉中的能量最小化方法！[A Comparative Study of Energy Minimization Methods for Markov Random Fields with Smoothness-Based Priors，TPAMI2008]



有向 v.s. 无向



$$p(\mathbf{x}) = \underbrace{p(x_1)p(x_2|x_1)} \, p(x_3|x_2) \cdots p(x_N|x_{N-1})$$

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

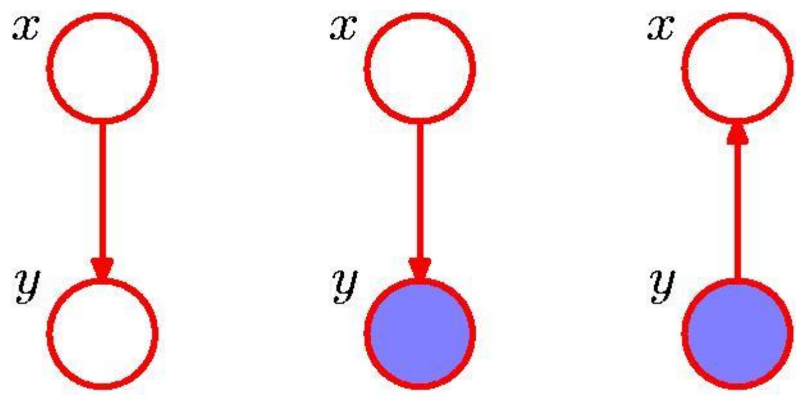
无向 v.s. 有向

有向图转换成无向图

- Chain（每个节点拥有至多一个父节点）
- 将无向图两两节点之间的potential设置成有向图的条件分布（没有父节点$p(x_1)$放入第一个potential的），那么这两个图完全等价
- Implying $Z = 1$
- 其它类型的有向图转换成无向图（略）
  - 不是所有的图都可以相互转换的

图的推理（inference on a graph）

Inference：基于某些观察节点（具有观察值），计算剩下的某个或某些节点的后验概率

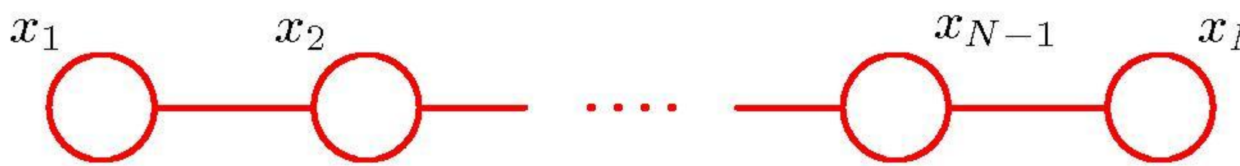


$$p(y) = \sum_{x'} p(y|x')p(x') \qquad p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)}$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- 考虑一个无向链图（有向链图可以等价转换）



- 假如我们的任务要求得某个节点n的边际分布$p(x_n)$

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

  – 假如每个样本有K个状态，那么需要K^N存储和计算复杂度（这是传统方法）

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- 如果考虑条件独立性

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

  - $p(x_n) = \sum_{x_1}\ldots\sum_{x_{n-1}}\sum_{x_{n+1}}\ldots\sum_{x_N}\frac{1}{Z}\psi_{1,2}(x_1, x_2)\psi_{2,3}(x_2, x_3)\ldots\psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N) = \frac{1}{Z}\sum_{x_1}\ldots\sum_{x_{n-1}}\sum_{x_{n+1}}\ldots\psi_{1,2}(x_1, x_2)\psi_{2,3}(x_2, x_3)\ldots\sum_{x_N}\psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N) = \cdots$

$$p(x_n) = \frac{1}{Z}\underbrace{\left[\sum_{x_{n-1}}\psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n)\cdots\left[\sum_{x_1}\psi_{1,2}(x_1, x_2)\right]\cdots\right]}_{\mu_\alpha(x_n)}$$
$$\underbrace{\left[\sum_{x_{n+1}}\psi_{n,n+1}(x_n, x_{n+1})\cdots\left[\sum_{x_N}\psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N)\right]\cdots\right]}_{\mu_\beta(x_n)}$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- 如果考虑条件独立性
- 复杂度：$O(NK^2)$ –线性
- 形式: (big scale)sum → (small scale)sum + (small scale)product

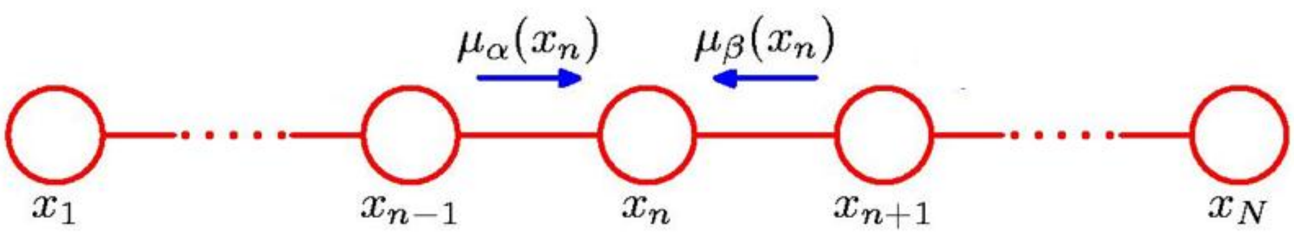
$$p(x_n) = \frac{1}{Z} \underbrace{\left[\sum_{x_{n-1}} \psi_{n-1,n}(x_{n-1},x_n) \cdots \left[\sum_{x_1} \psi_{1,2}(x_1,x_2)\right] \cdots \right]}_{\mu_\alpha(x_n)}$$

$$\underbrace{\left[\sum_{x_{n+1}} \psi_{n,n+1}(x_n,x_{n+1}) \cdots \left[\sum_{x_N} \psi_{N-1,N}(x_{N-1},x_N)\right] \cdots \right]}_{\mu_\beta(x_n)}$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

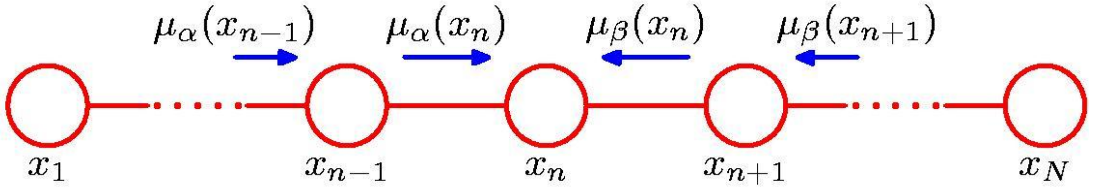
- 另一种解释：局部消息在图中的传递（local message passing around the graph）
  - $p(x_n) = \mu_\alpha(x_n)\mu_\beta(x_n)$
  - 将$\mu_\alpha(x_n)$解读为沿着链表从x_{n-1}向x_n正向传播的消息（forward message），$\mu_\beta(x_n)$解读为沿着链表从x_{n+1}向x_n反向传播的消息（backward message ）



图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- $\mu_\alpha(x_n)$，$\mu_\beta(x_n)$可以迭代求解



$$\begin{aligned}\mu_\alpha(x_n) &= \sum_{x_{n-1}} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) \left[\sum_{x_{n-2}} \cdots \right] \\ &= \sum_{x_{n-1}} \psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n) \mu_\alpha(x_{n-1}).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mu_\beta(x_n) &= \sum_{x_{n+1}} \psi_{n,n+1}(x_n, x_{n+1}) \left[\sum_{x_{n+2}} \cdots \right] \\ &= \sum_{x_{n+1}} \psi_{n,n+1}(x_n, x_{n+1}) \mu_\beta(x_{n+1}).\end{aligned}$$

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

$$\mu_\beta(x_{N-1}) = \sum_{x_N} \psi_{N-1,N}(x_{N-1}, x_N)$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- To compute all local marginals:
  - Compute and store all forward messages, .
  - Compute and store all backward messages, .
  - Compute Z at any node x_n
  - Compute

$$p(x_n) = \frac{1}{Z}\mu_\alpha(x_n)\mu_\beta(x_n)$$

  for all variables required.

图的推理（inference on a graph）

Inference on a chain

- 上述讨论的节点皆为不可见的，如果某个节点n_j是可见的（观察值），那么对于n_j则无需求和
- 对于求邻域节点的联合概率分布也同样可以直接求取

$$p(x_{n-1}, x_n) = \frac{1}{Z}\mu_\alpha(x_{n-1})\psi_{n-1,n}(x_{n-1}, x_n)\mu_\beta(x_n)$$

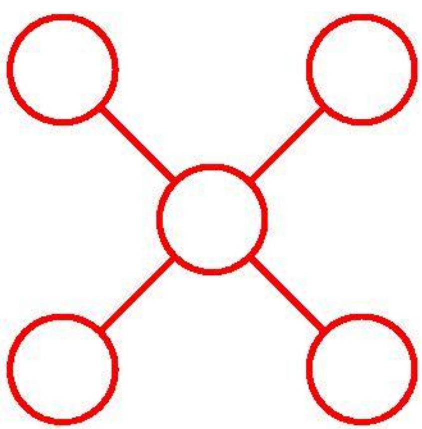
  – 可直接用于potential或者参数化条件分布函数的参数估计（直接是EM算法中的E-step所需）

图的推理（inference on a graph）

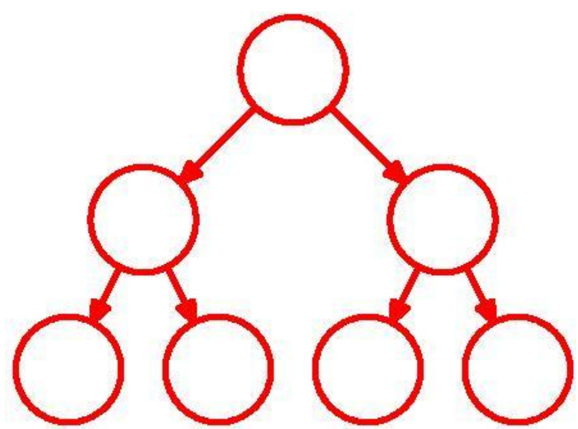
Inference on a tree

- 树（tree）的内涵：
  - 无向图：树意味着任意两个节点之间仅有一条通路（path）
  - 有向图：树意味着有且仅有一个节点没有父节点，剩余的节点有且仅有一个父节点
  - 没有loop
  - 有向树可以直接转换成无向树（拓扑结构不变），why?

Undirected Tree



Directed Tree



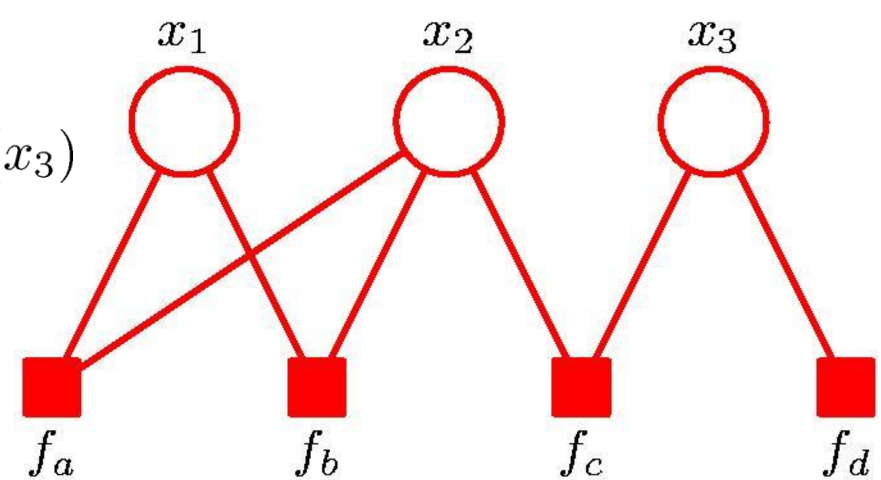
图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: factor graphs

- Factor graphs:在已有节点的基础上，对potential（无向）或conditional probability（有向）引入新的节点，使得概率图的factorization过程更为清晰

$$p(\mathbf{x}) = \prod_s f_s(\mathbf{x}_s)$$

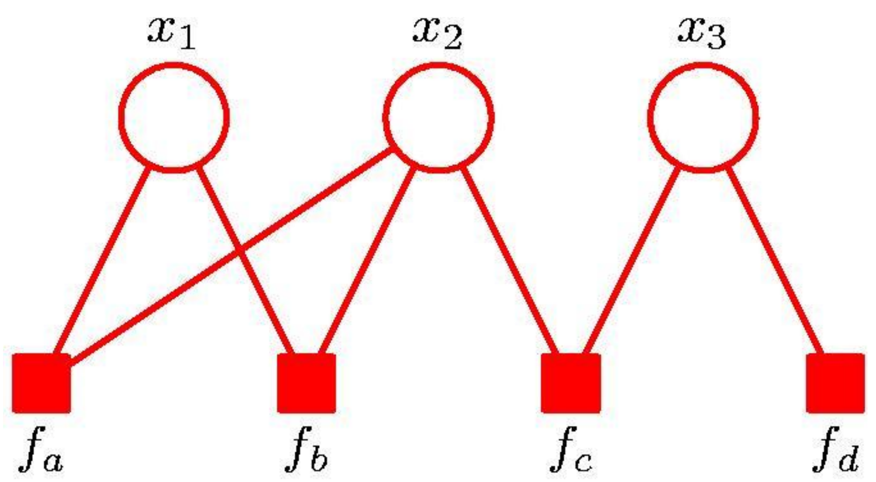
$$p(\mathbf{x}) = f_a(x_1, x_2) f_b(x_1, x_2) f_c(x_2, x_3) f_d(x_3)$$



图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: factor graphs

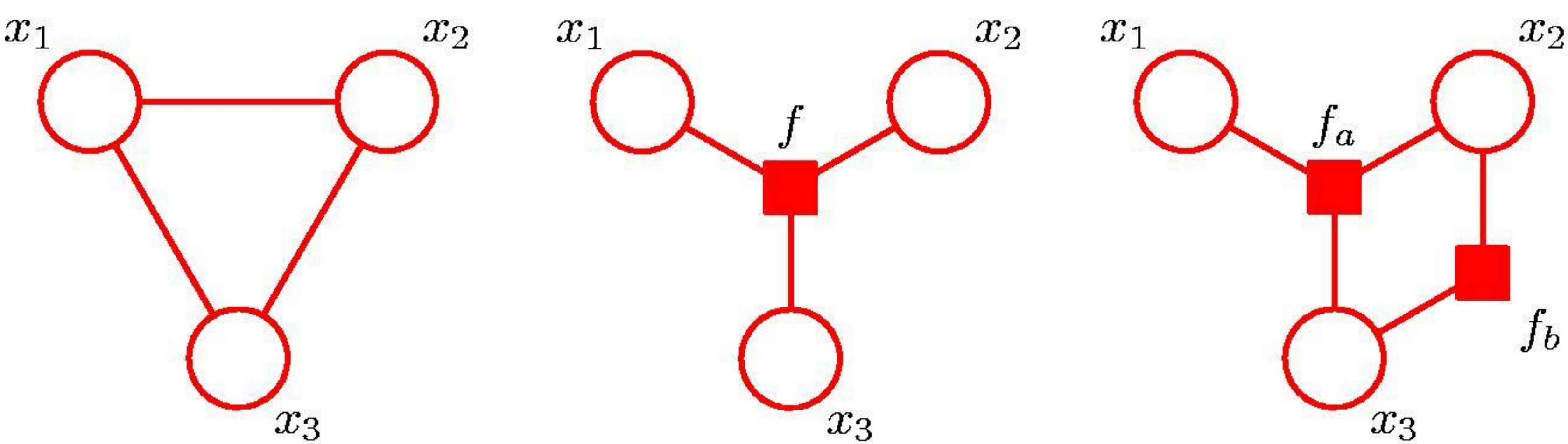
- Factor graph是一个二分图（bipartite）
- 原来的节点不再连接，而是通过新增的节点f_s来连接
- 有向树：每个f_s可以是每个节点的条件概率
- 无向树：每个f_s可以是每个clique的potential
- 树对应的factor graph还保持是树



图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: factor graphs

– 无向图（分解不唯一）



$$\psi(x_1, x_2, x_3)$$

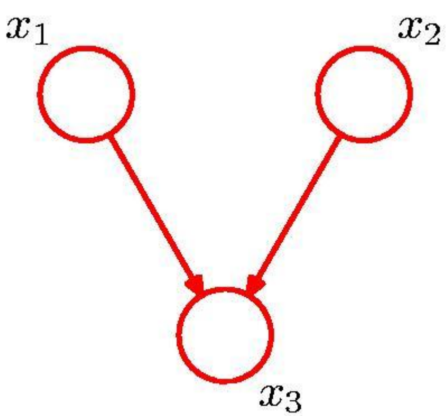
$$f(x_1, x_2, x_3) = \psi(x_1, x_2, x_3)$$

$$f_a(x_1, x_2, x_3) f_b(x_2, x_3) = \psi(x_1, x_2, x_3)$$

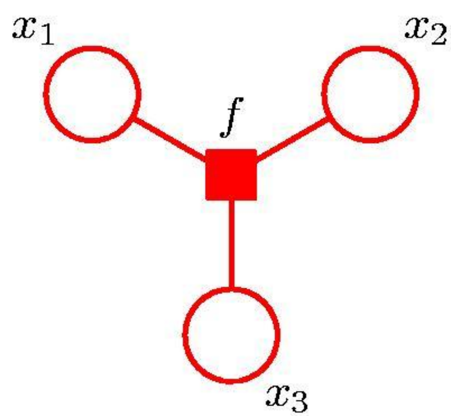
图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: factor graphs

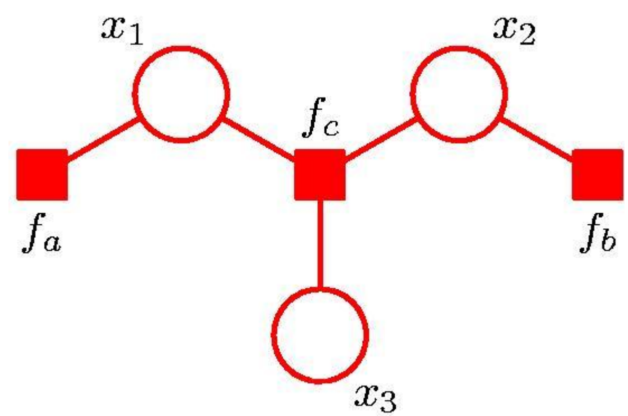
– 有向图（分解不唯一）



$$p(\mathbf{x}) = p(x_1)p(x_2)p(x_3|x_1,x_2)$$



$$f(x_1,x_2,x_3) = p(x_1)p(x_2)p(_3|x_1,x_2)$$



$$\begin{aligned} f_a(x_1) &= p(x_1) \\ f_b(x_2) &= p(x_2) \\ f_c(x_1,x_2,x_3) &= p(x_3|x_1,x_2) \end{aligned}$$

图的推理（inference on a graph）

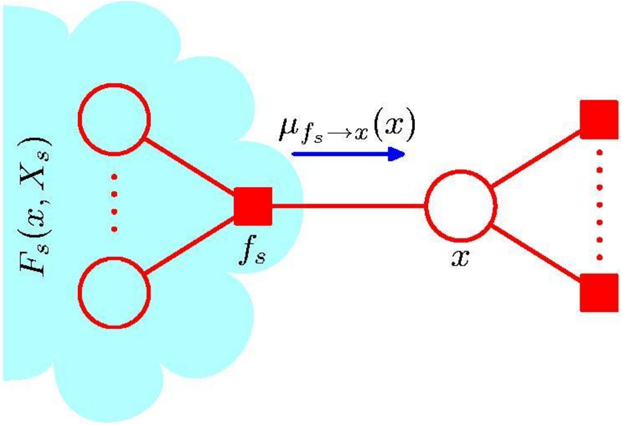
– Inference on a tree: sum-product algorithm

- Objective:
  i. to obtain an efficient, exact inference algorithm for finding marginals;
  ii. in situations where several marginals are required, to allow computations to be shared efficiently.
- 有向、无向图都转成了factor graph，因此只需考虑factor graph的推理
- 还是以求某个节点x的边际分布$p(x)$为例

图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: sum-product algorithm

- $p(x)=\sum_{\boldsymbol{x}\backslash x}p(\boldsymbol{x})$
- $p(\boldsymbol{x})=\prod_{s\in ne(x)}F_s(x,X_s)$
  - $ne(x)$表示与x相邻的factor节点，
  - X_s表示和factor节点s相邻的所有变量（除了x）
  - $F_s(x,X_s)$表示和factor 节点f_s相邻所有变量的potential（或者joint distribution）



图的推理（inference on a graph）

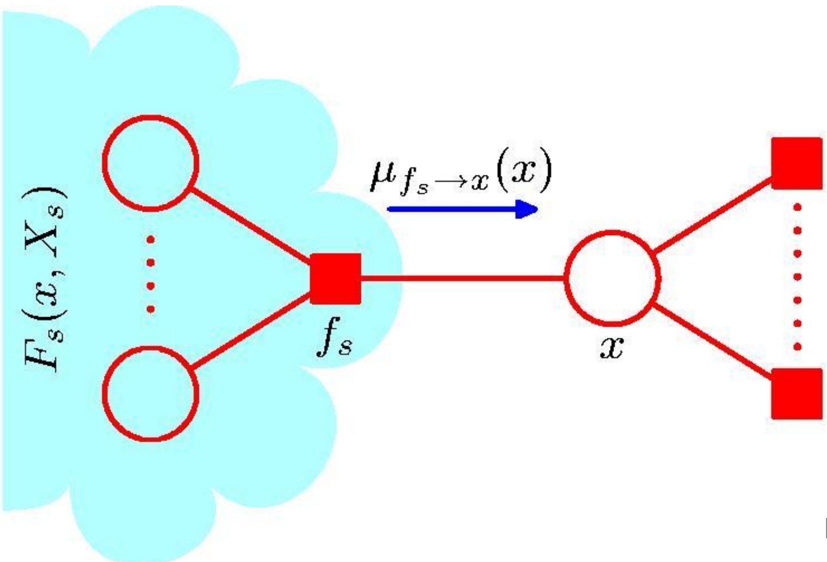
Inference on a tree: sum-product algorithm

- 进一步

$p(x)=\sum_{\mathbf{x}\backslash x}\prod_{s\in ne(x)}F_s(x,X_s)=\prod_{s\in ne(x)}\sum_{X_s}F_s(x,X_s)=\prod_{s\in ne(x)}\mu_{f_s\to x}(x)$, where we define

$$\mu_{f_s\to x}(x)\equiv\sum_{X_s}F_s(x,X_s)$$

- $\mu_{f_s\to x}(x)$可以看成是factor节点f_s向变量节点x传播的消息（message）



图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: sum-product algorithm

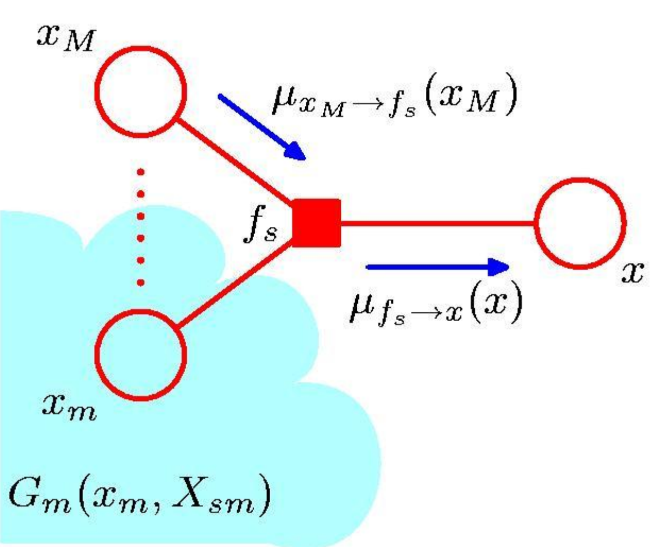
- $F_s(x, X_s) = f_s(x, X_s) \prod_{m \in ne(f_s) \setminus x} \hat{p}(x_m)$

$$\mu_{x_m \to f_s}(x_m) \equiv \hat{p}(x_m) = \sum_{X_{sm}} G_m(x_m, X_{sm})$$

- $\mu_{x_m \to f_s}(x_m)$ 可以看成是变量节点x_m向变量factor节点f_s传播的消息（message）
- $G_m(x_m, X_{sm})$内涵上等价于$F_s(x, X_s)$（除了f_s要排除）

$$G_m(x_m, X_{sm}) = \prod_{l \in ne(x_m) \setminus f_s} F_l(x_m, X_{ml})$$

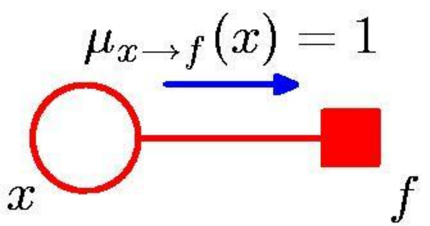
$\mu_{x_m \to f_s}(x_m) = \sum_{X_{sm}} \prod_{l \in ne(x_m) \setminus f_s} F_l(x_m, X_{ml}) = \prod_{l \in ne(x_m) \setminus f_s} \sum_{X_{ml}} F_l(x_m, X_{ml}) = \prod_{l \in ne(x_m) \setminus f_s} \mu_{f_l \to x_m}(x_m)$

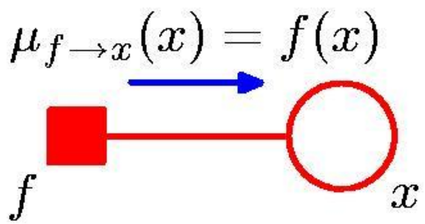


图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: sum-product algorithm

- 两条公式
  - $\mu_{f_s \to x}(x) = \sum_{X_s} f_s(x, X_s) \prod_{m \in ne(f_s) \backslash x} \mu_{x_m \to f_s}(x_m)$
  - $\mu_{x_m \to f_s}(x_m) = \prod_{l \in ne(x_m) \backslash f_s} \mu_{f_l \to x_m}(x_m)$
- 初始值





图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: sum-product algorithm

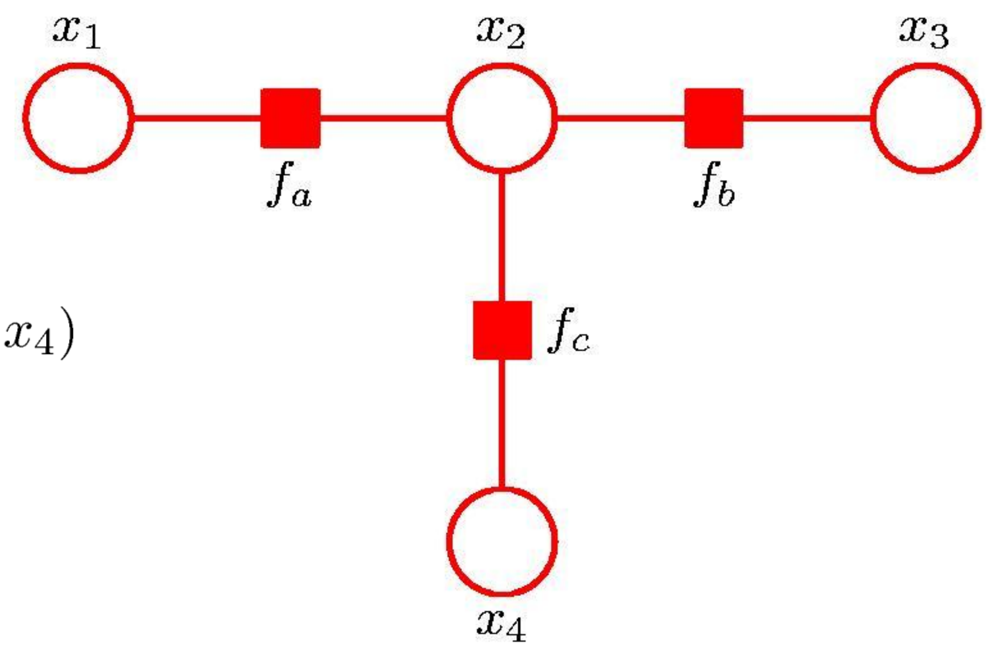
- 如果要计算很多的margins怎么办？
  - Pick an arbitrary node as root
  - Compute and propagate messages from the leaf nodes to the root, storing received messages at every node.
  - Compute and propagate messages from the root to the leaf nodes, storing received messages at every node.
  - Compute the product of received messages at each node for which the marginal is required, and normalize if necessary.

- NOTE：
  - SUM → Sum-Product，充分利用条件独立“化整为块”
  - The famous brief propagation is a special case of sum-product

图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: an example

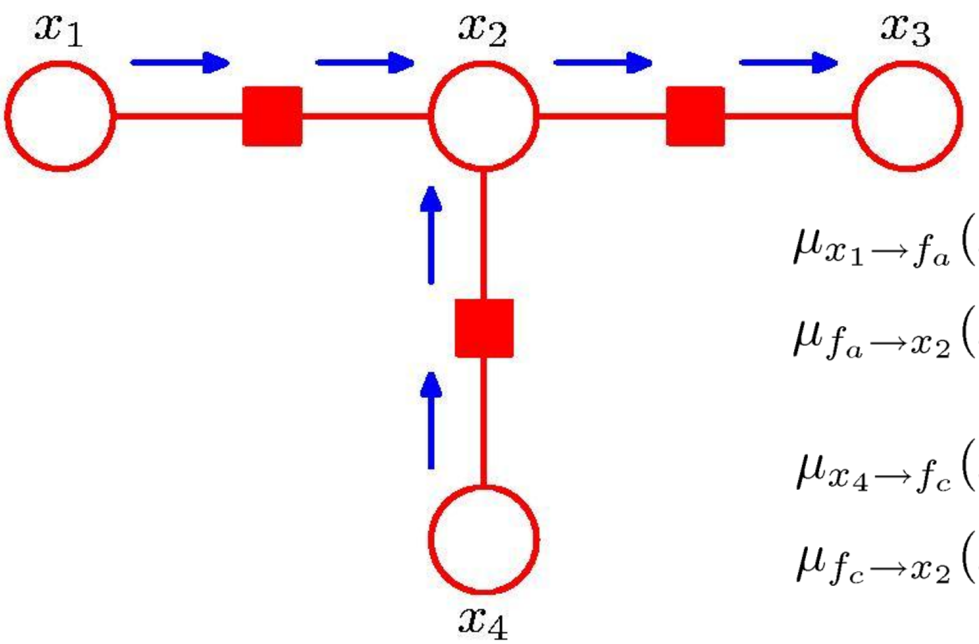
- Calculate $p(x_3)$



$$\widetilde{p}(\mathbf{x}) = f_a(x_1, x_2) f_b(x_2, x_3) f_c(x_2, x_4)$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: an example

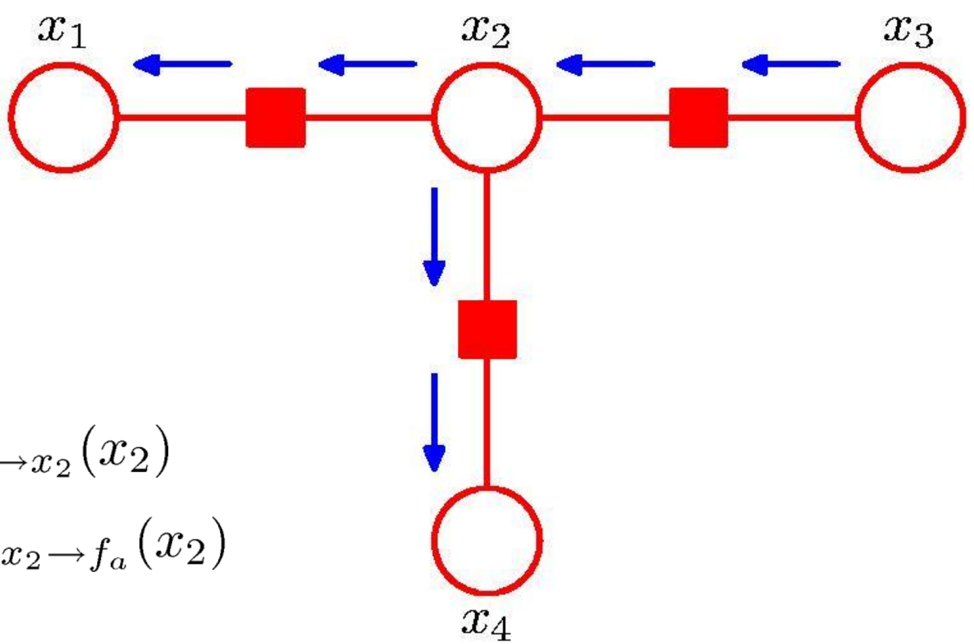


$$
\begin{aligned}
\mu_{x_1 \to f_a}(x_1) &= 1 \\
\mu_{f_a \to x_2}(x_2) &= \sum_{x_1} f_a(x_1, x_2) \\
\mu_{x_4 \to f_c}(x_4) &= 1 \\
\mu_{f_c \to x_2}(x_2) &= \sum_{x_4} f_c(x_2, x_4) \\
\mu_{x_2 \to f_b}(x_2) &= \mu_{f_a \to x_2}(x_2)\mu_{f_c \to x_2}(x_2) \\
\mu_{f_b \to x_3}(x_3) &= \sum_{x_2} f_b(x_2, x_3)\mu_{x_2 \to f_b}(x_2)
\end{aligned}
$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: an example

- 反向传播

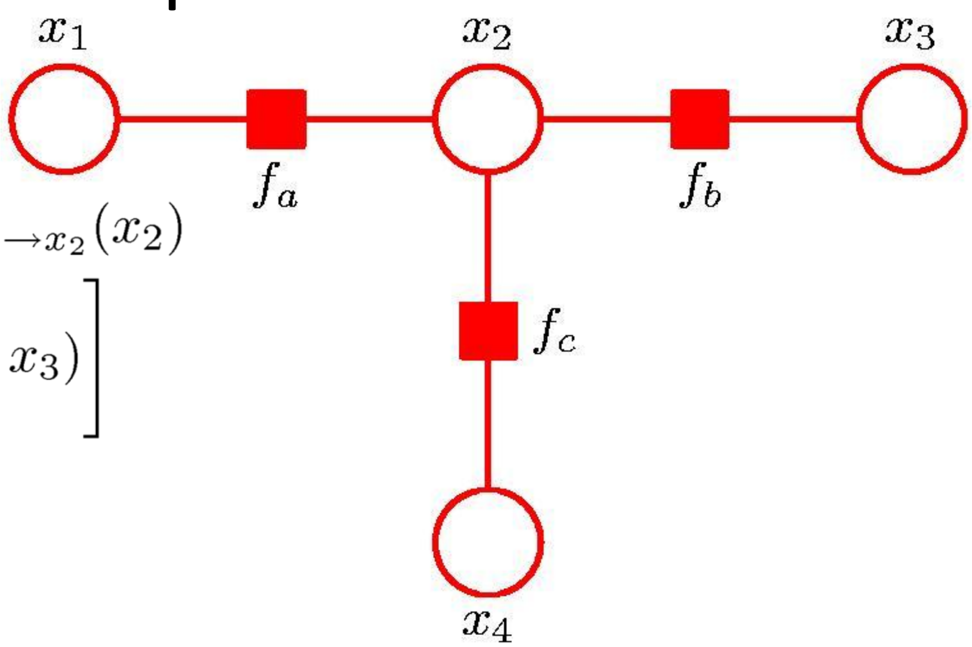


$$
\begin{aligned}
\mu_{x_3 \to f_b}(x_3) &= 1 \\
\mu_{f_b \to x_2}(x_2) &= \sum_{x_3} f_b(x_2, x_3) \\
\mu_{x_2 \to f_a}(x_2) &= \mu_{f_b \to x_2}(x_2)\mu_{f_c \to x_2}(x_2) \\
\mu_{f_a \to x_1}(x_1) &= \sum_{x_2} f_a(x_1, x_2)\mu_{x_2 \to f_a}(x_2) \\
\mu_{x_2 \to f_c}(x_2) &= \mu_{f_a \to x_2}(x_2)\mu_{f_b \to x_2}(x_2) \\
\mu_{f_c \to x_4}(x_4) &= \sum_{x_2} f_c(x_2, x_4)\mu_{x_2 \to f_c}(x_2)
\end{aligned}
$$

图的推理（inference on a graph）

Inference on a tree: an example

- Verification on x_2



$$
\begin{aligned}
\widetilde{p}(x_2) &= \mu_{f_a \to x_2}(x_2)\mu_{f_b \to x_2}(x_2)\mu_{f_c \to x_2}(x_2) \\
&= \left[\sum_{x_1} f_a(x_1, x_2)\right]\left[\sum_{x_3} f_b(x_2, x_3)\right] \\
&\quad \left[\sum_{x_4} f_c(x_2, x_4)\right] \\
&= \sum_{x_1}\sum_{x_3}\sum_{x_4} f_a(x_1, x_2) f_b(x_2, x_3) f_c(x_2, x_4) \\
&= \sum_{x_1}\sum_{x_3}\sum_{x_4} \widetilde{p}(\mathbf{x})
\end{aligned}
$$

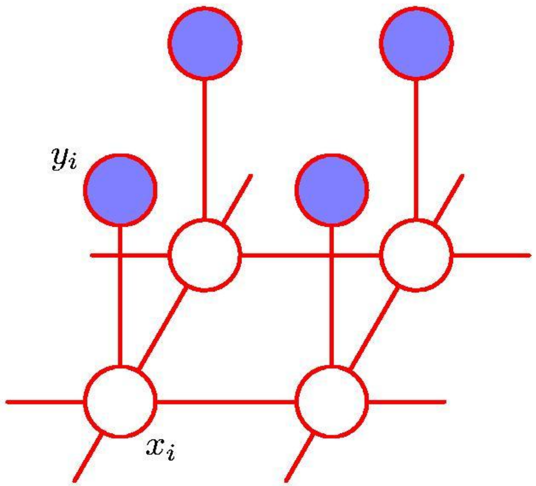
图的推理（inference on a graph）

- Exact inference (on chain and tree)
  - Max-Sum algorithm: find the value $x^{\max}$ that maximises $p(x)$; the value of $p(x^{\max})$.
- Inference on general graph
  - Much more difficult than on Chain and Tree, (Inference on MRF as an example)
  - Loopy brief propagation
  - Variational Bayesian
  - MCMC(Markov Chain Monte Carlo)

图的推理（inference on a graph）

Inference on graph: MRF

- 用于解决处理视觉中的pixel labeling问题，MRF的结构一般设置为为Ising模型，也即grid（网格结构），即一个clique对应于一条边，二阶能量函数
- x为隐藏变量，y为观察变量，inference为给定观察值y，x取什么值使得后验$p(x|y)$（用$p(x,y)$）最大
- x的取值范围为标签集合l
  - Label需要指定
  - 前面的去噪模型标签为$l = \{-1,1\}$
- 能量函数也即potential需要设计
  - label l尽可能和y吻合
  - 邻域间（clique）的label l平滑



图的推理（inference on a graph）

Inference on graph: MRF

- 给定$l = \{1,2,\dots k\}$，$|V| = n$，那么问题的复杂度为$O(k^n)$
- 常用的方法
  - ICM（iterated conditional modes）：梯度法的一种，结果较为粗糙
  - Graph cuts：要求能量函数为submodular函数，两类问题可在P复杂度得到全局最优
  - Loopy brief propagation：有时候结果很差，理论上没有保障
  - Relaxation方法：近几年得到发展，优势在于对能量函数形式没有任何要求

图推理（inference on a graph）

Inference on MRF：另一个角度

- $E = E_d + \lambda E_s = \sum_i d_i\,(l_i, y_i) + \beta \sum_{\{i,j\}\in C} V_{ij}\,(l_i, l_j)$
- $d_i(l_i, y_i)$称为数据项（似然），表示x_i取l_i时与y_i之间的误差，describing how well label l_i agrees with the data at site i
- $V_{ij}(l_i, l_j)$称为平滑项（先验），表示相邻的节点分别取l_i, l_j时的惩罚项，describing how well the vertex i with label l_i agrees with the vertex j with label l_j
- 可以改写为

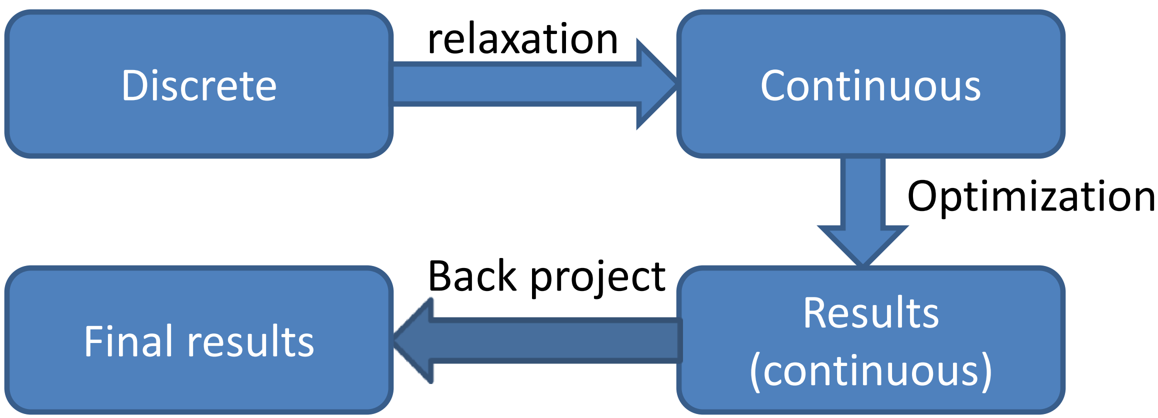
$$E(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{d}^T\boldsymbol{a} + \lambda\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{a}$$

  - $\boldsymbol{a}$是一个$kn \times 1$的待求解向量，可以理解为由矩阵$\boldsymbol{A} \in R^{k\times n}$“拉直”为一向量得到，且$\boldsymbol{A}$的元素只能取值0或1，且每一列有且只有一个1，代表每个像素只能有一个label
  - $\boldsymbol{d}$是一个$kn \times 1$数据误差的向量，与$\boldsymbol{a}$类似，可以理解为矩阵$\boldsymbol{D} \in R^{k\times n}$“拉直”为一向量得到，$\boldsymbol{D}_{ia}$表示第$i$个节点取第$a$个label时的数据误差
  - $\boldsymbol{V}$是一个$kn \times kn$对称的平滑惩罚矩阵，$\boldsymbol{V}_{ia,jb}$表示第i个节点取第a个label和第j个节点取第b个label之间的平滑惩罚

图推理（inference on a graph）

Inference on MRF： relaxation方法

- 一个典型的离散组合优化（combinatorial optimization）NP难问题
- 松弛法（relaxation）
  - POINT: Continuous optimization is usually easier to be approximated than its discrete counterpart
  - A general procedure of relaxation approaches



图推理（inference on a graph）

Inference on MRF： relaxation方法

- Relaxation:
  - 将问题的离散可行域放松为连续可行域，转换成一个连续优化问题
  - 一般为找到问题的凸松弛函数（困难！）
- Optimization
  - 不同的松弛方式需要不同的优化框架，如求特征向量、条件优化等
- Back-projection
  - 将连续解映射回离散解，利用直接投影、Graduated Assignment等确定性退火等方法（困难！）

图推理（inference on a graph）

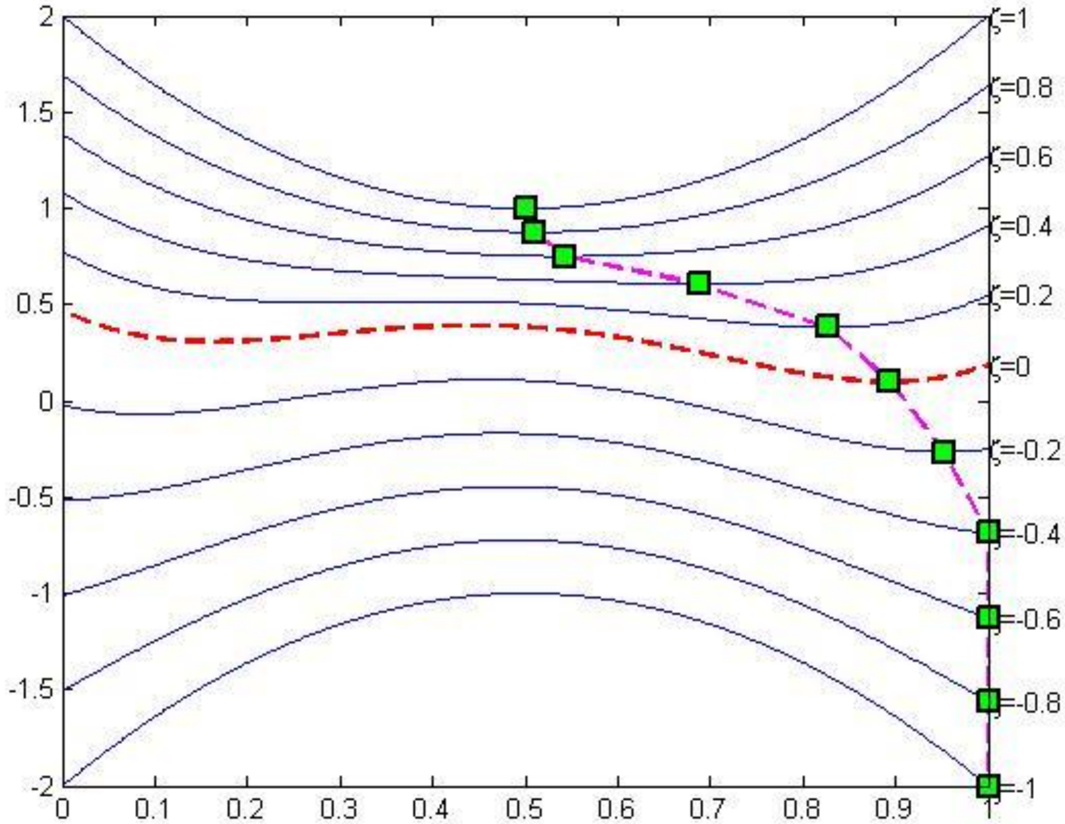
Inference on MRF：relaxation方法

- 渐非凸渐凹化过程 – GNCCP（Graduated NonConvexity and Concavity Procedure）[Liu et al. 2014]
  - 给定一个组合图优化问题，凸、凹松弛函数都可以自主构建，完全彻底解决了凸凹松弛过程的难题

$$F_\zeta(\mathbf{X}) = \begin{cases} (1-\zeta)F(\mathbf{X}) + \zeta \mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{X} & \text{if } 1 \geq \zeta \geq 0, \\ (1+\zeta)F(\mathbf{X}) + \zeta \mathrm{tr}\mathbf{X}^\top\mathbf{X} & \text{if } 0 > \zeta \geq -1, \end{cases}, \mathbf{X} \in \Omega.$$

图推理（inference on a graph）

- GNCCP收敛示意图：凸凹松弛函数隐性自动实现



图推理（inference on a graph）

- GNCCP based MRF MAP algorithm

Algorithm 3.1: GNCCP MAP ALGORITHM()

$\zeta \leftarrow -1, \mathbf{x} \leftarrow \mathbf{1}/m$
repeat
  repeat
    $\mathbf{y} = \arg\max_{\mathbf{y}} \nabla F_{\zeta}(\mathbf{x})^{\top}\mathbf{y}$, s.t. $\mathbf{y} \in \Omega$
    $\alpha = \arg\max_{\alpha} F_{\zeta}(\mathbf{x} + \alpha(\mathbf{y} - \mathbf{x}))$, s.t. $0 \leq \alpha \leq 1$
    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \alpha(\mathbf{y} - \mathbf{x})$
  until converged
  $\zeta \leftarrow \zeta + d\zeta$
until $\zeta > 1 \vee \mathbf{x} \in \Pi$
return $(\mathbf{x})$

图推理（inference on a graph）

GNCCP算法解释

- 内循环采用Frank-Wolfe算法
- 线性指派步骤由匈牙利算法实现（一对一情况）或者直接计算每一列的最大值实现（一对多情况）
- 线性搜索可以解析实现或者利用backtracking算法实现
- 算法中的梯度为

$$\nabla F_{\zeta}(X) = \begin{cases} (1-\zeta)\nabla F(X) + \zeta X & \text{if } 1 \geq \zeta \geq 0, \\ (1+\zeta)\nabla F(X) + \zeta X & \text{if } 0 > \zeta \geq -1. \end{cases}$$

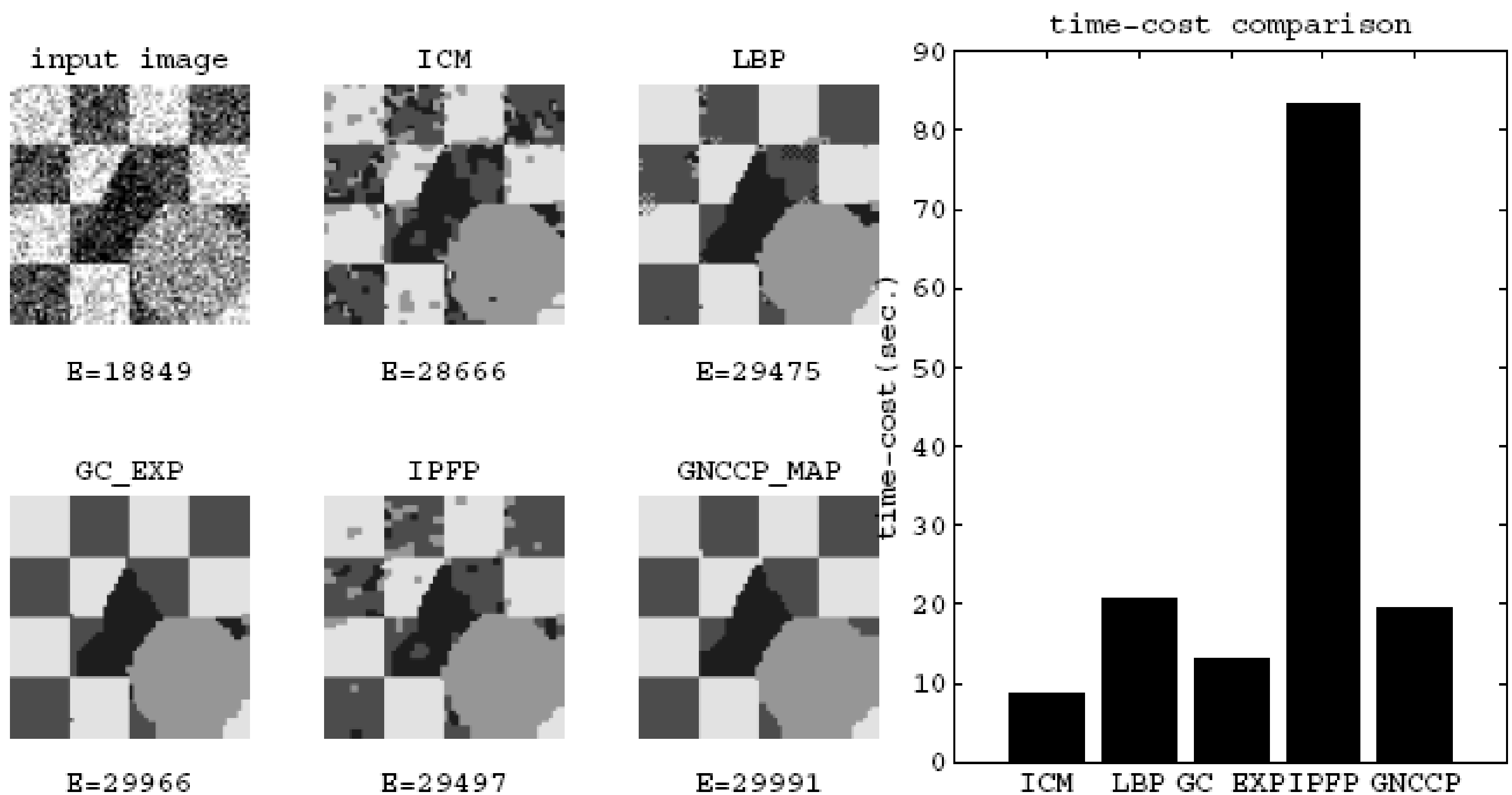
- 算法唯一要求的就是求原函数的梯度！！

GNCCP特点

- 模型特点：
  - 一种确定性的退火过程（deterministic annealing）
    - 简单来说，它的搜索方向是确定的
    - 更快的收敛性（相对随机退火）
  - 由于引入凹松弛函数，CCRP从定义上和原问题完全等价
    - 求凹松弛函数的极小点等价于求原离散问题的极小点
    - 可能是文献中首个和原离散问题完全等价的松弛法框架
- 性能特点
  - 简单易用：只需要求导数
  - 复杂度低： $\mathcal{O}(|E|k^2)$
  - 精度高：在图割和LBP适用的前提下精度相当
  - 适用范围广：适用于任意的势场函数和任意的图结构

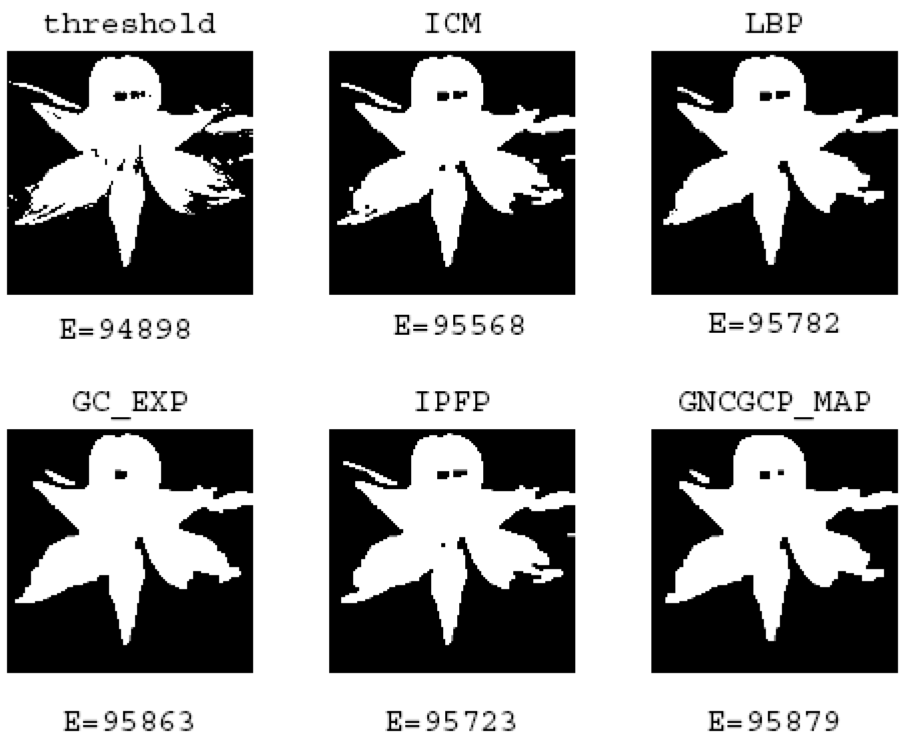
实验对比– GNCCP-EM

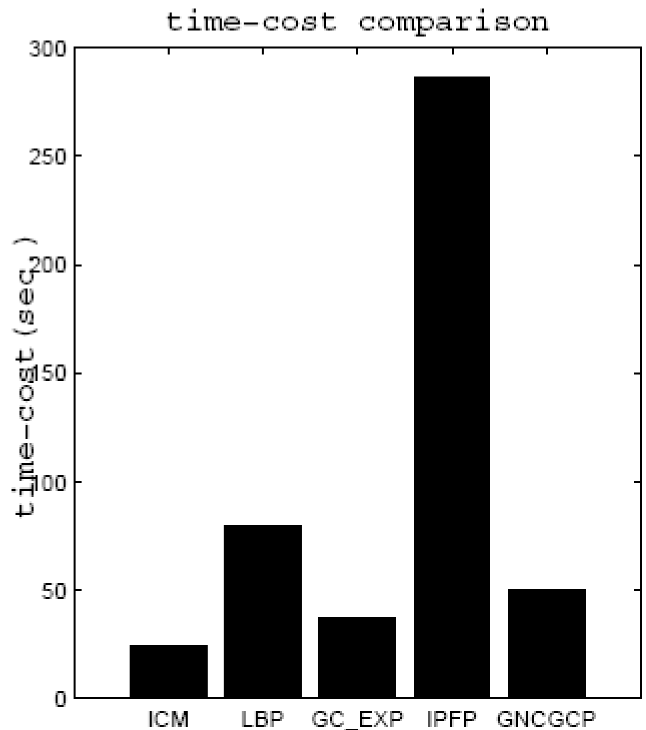
- 图像分割



实验对比– GNCCP-EM

- 图像分割





The END, Thanks!