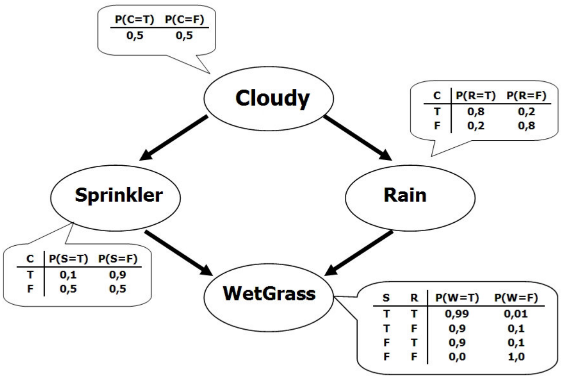
17. Probabilistički grafički modeli

Strojno učenje 1, UNIZG FER, ak. god. 2021./2022.

Jan Šnajder, natuknice s predavanja, v1.4

1 Uvod

- **Probabilistički grafički model (PGM)** – sažet zapis zajedničke distrib. pomoću grafa
- Čvorovi grafa su varijable, bridovi su zavisnosti između varijabli

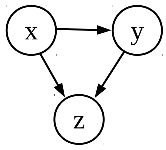


- Svrha: **probabilističko zaključivanje** (određivanje vrijednosti neopažanih varijabli)
- Tri aspekta PGM-a: (1) **reprezentacija**, (2) **zaključivanje** i (3) **učenje**
- Reprezentacija:
  - usmjereni aciklički graf ⇒ **Bayesove mreže**
  - neusmjereni graf ⇒ **Markovljeve mreže**
- Zaključivanje – određivanje vrijednosti nepažanih varijabli na temelju opažanih
- Učenje – procjena parametara ili učenje strukture mreže na temelju podatka
- Mi se fokusiramo na Bayesove mreže

2 Bayesove mreže: reprezentacija

- Usmjereni aciklički graf (*directed acyclic graph, DAG*)

- Bridovi povezuju varijablu koja uvjetuje s varijablom koja je uvjetovana
- Npr., $p(x, y, z) = p(x)p(y|x)p(z|x, y)$

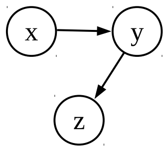


- Bez pretpostavki o uvjetnoj nezavisnosti:

$$\begin{aligned} p(x_1, \ldots, x_n) &= p(x_1)p(x_2|x_1)p(x_3|x_1, x_2) \cdots p(x_n|x_1, \ldots, x_{n-1}) \\ &= \prod_{k=1}^{n} p(x_k|x_1, \ldots, x_{k-1}) \end{aligned}$$

  $\Rightarrow$ pravilo lanca $\Leftrightarrow$ potpuno povezana Bayesova mreža

- Pretpostavke o uvjetnoj nezavisnosti uklanjaju bridove i pojednostavljuju mrežu
- Npr., ako $x \perp z | y$, onda $p(x, y, z) = p(x)p(y|x)p(z|y)$:



- Formalno, zajednička distribucija definirana Bayesovom mrežom je:

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^{n} p(x_k|\text{pa}(x_k))$$

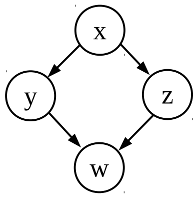
  gdje $\text{pa}(x_k)$ označava **čvorove roditelje** čvora x_k

- Čvorovi su poredani u **topološki uređaj** (roditelji dolaze prije djece)
- Svaki DAG ima barem jedan topološki uređaj
- **Uređajno Markovljevo svojstvo** (UMS): svaki čvor x_k ovisi samo o roditeljima:

$$x_k \perp \text{pred}(x_k) \backslash \text{pa}(x_k) \mid \text{pa}(x_k)$$

  gdje je $\text{pred}(x_k)$ skup prethodnika čvora x_k po topološkom uređaju

- Primjer: $p(x, y, z, w) = p(x)p(y|x)p(z|x)p(w|y, z)$



– Faktorizacija:

$$
\begin{aligned}
p(x)p(y|x)p(z|x)p(w|y,z) &= p(x,y)\underline{p(z|x)}p(w|y,z) \\
y \perp z | x \Rightarrow &\ p(x,y)\underline{p(z|x,y)}p(w|y,z) \\
&= p(x,y,z)\underline{p(w|y,z)} \\
x \perp w | y,z \Rightarrow &\ p(x,y,z)\underline{p(w|x,y,z)} \\
&= p(x,y,z,w)
\end{aligned}
$$

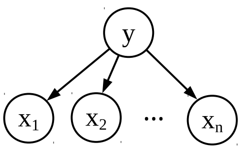
– Uvjetne nezavisnosti proizlaze iz UMS-a:

$$
\begin{aligned}
x_k \perp \mathrm{pred}(x_k) \backslash \mathrm{pa}(x_k) &\mid \mathrm{pa}(x_k) \\
y \perp \{x\} \backslash \{x\} &\mid \{x\} \\
z \perp \{x,y\} \backslash \{x\} &\mid \{x\} \ \ \Rightarrow y \perp z | x \\
w \perp \{x,y,z\} \backslash \{y,z\} &\mid \{x,y\} \ \ \Rightarrow x \perp w | y,z
\end{aligned}
$$

3 Primjeri Bayesovih mreža

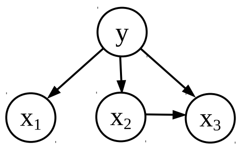
- **Naivan Bayesov klasifikator**:

$$P(\mathbf{x}, y) = P(y) \prod_{i=1}^{n} P(x_i|y)$$



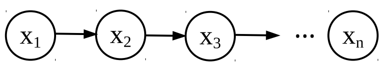
- Polunaivan Bayesov klasifikator. Npr.:

$$P(x_1, x_2, x_3, y) = P(x_1|y)\underline{P(x_2, x_3|y)}P(y) = P(x_1|y)\underline{P(x_2|y)P(x_3|x_2, y)}P(y)$$



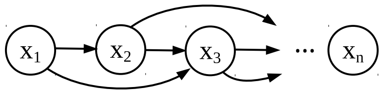
- Markovljev model prvog reda – za modeliranje slijednih podataka (npr., tekst):

$$p(\mathbf{x}) = p(x_1) \prod_{k=2}^{n} p(x_k|x_{k-1})$$



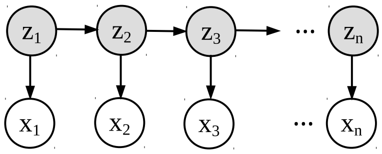
- Markovljev model drugog reda – modelira dulje zavisnosti:

$$p(\mathbf{x}) = p(x_1)p(x_2|x_1) \prod_{k=3}^{n} p(x_k|x_{k-1}x_{k-2})$$



- Problem: eksplicitno modeliranje duljih zavisnosti povećava složenost modela
- **Skriveni Markovljev model** (*Hidden Markov Model, HMM*):

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = p(z_1)p(x_1|z_1) \prod_{k=2}^{n} p(z_k|z_{k-1})p(x_k|z_k)$$



$\Rightarrow$ indirektno modelira dulje zavisnosti preko skrivenih varijabli $\mathbf{z}$

4 D-separacija

- Ispitivanje uvjetne nezavisnosti dviju varijabli uz zadane druge varijable
- **D-separacija**: analiziramo povezanost staze u grafu između dva čvora
- Tri pravila: račvanje, lanac, sraz
- (1) **Račvanje**: $x \leftarrow z \rightarrow y$

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

  - UMS: $y \perp x | z \Leftrightarrow x \perp y | z$

  $\Rightarrow$ ako je varijabla z opažena, onda su čvorovi odvojeni, inače su povezani
- (2) **Lanac**: $x \rightarrow z \rightarrow y$

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

  - UMS: $y \perp x | z \Leftrightarrow x \perp y | z$

  $\Rightarrow$ ako je varijabla z opažena, onda su čvorovi odvojeni, inače su povezani
- (3) **Sraz**: $x \rightarrow z \leftarrow y$

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

  - UMS: $y \perp x | \emptyset$

  $\Rightarrow$ ako je varijabla z **neopažena**, onda su čvorovi odvojeni, inače su povezani
- Kod sraza varijable x i y se "natječu" za objašnjavanje (uzorkovanje) varijable z
- **Efekt objašnjavanja** (*explaining away*): opažanje x i z smanjuje vjerojatnost za y:

$$p(x|z) \neq p(x|y, z) \;\; \Leftrightarrow \;\; x \not\perp y | z$$

- Primjer 1: Bacanje dva novčića ($x, y \in \{0, 1\}$) i opažanje njihove sume ($z = x + y$)
- Primjer 2: x – mononukleoza, y – upala grla, z – visoka temperatura

D-separacija čvorova

Raspolažemo skupom varijabli E koje su opažene.

Za **stazu** P od čvora x do čvora y kažemo da je **d-odvojena (d-separated)** akko vrijedi **barem jedno** od sljedećeg:

- P sadrži **lanac** $x \rightarrow z \rightarrow y$ ili $x \leftarrow z \leftarrow y$ i $z \in E$
- P sadrži **račvanje** $x \leftarrow z \rightarrow y$ i $z \in E$
- P sadrži **sraz** $x \rightarrow z \leftarrow y$ i varijabla z **nije** u E i nijedan sljedbenik od z nije u E

Za **par čvorova** x i y kažemo da su čvorovi x i y d-separirani za dani E ako su **sve staze** između ta dva čvora d-separirane za dani E.

Čvorovi x i y su d-separirani za dani E **akko** su uvjetno nezavisni za dani E.

- Implementacija: algoritam **Bayesove kuglice** (*Bayes-Ball*)