Графические модели: ориентированное и неориентированное представление

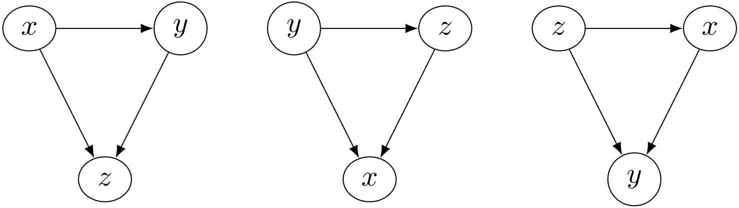
Александр Адуенко

17е марта 2026

- Фильтр Калмана.
- EM-алгоритм. Использование EM-алгоритма для отбора признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный EM-алгоритм и его использование для вывода в смеси моделей линейной регрессии.
- Ориентированные графические модели и их представление plate notation. Критерий условной независимости D-separation.

Идея: Представим совместное распределение переменных в виде графа.
Пример: $p(x,\, y,\, z) = p(x)p(y|x)p(z|x,\, y)$.

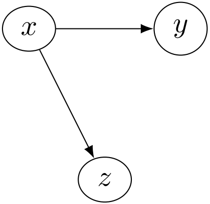
Графическая вероятностная модель $p(x,\, y,\, z)$



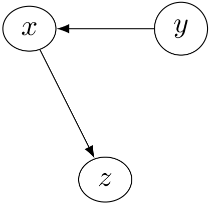
Вопрос 1: Чему соответствуют представления на средней и правой картинке?

$p(x_1,\, \ldots,\, x_K) = p(x_1)p(x_2|x_1) \cdot \ldots \cdot p(x_K|x_1,\, \ldots,\, x_{K-1})$.
Вопрос 2: Для каких распределений выполнено разложение выше?
Вопрос 3: Какое представление получается для $p(x_1,\, \ldots,\, x_K)$ при таком разложении?

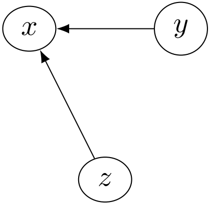
Идея: Представим совместное распределение переменных в виде графа.



Граф 1



Граф 2



Граф 3

Вопрос: Одинаковые ли совместные распределения соответсвуют графическим представлениям выше?

Граф 1: $p(x,\ y,\ z) = p(x)p(y|x)p(z|x)$;
Граф 2: $p(x,\ y,\ z) = p(y)p(x|y)p(z|x)$;
Граф 3: $p(x,\ y,\ z) = p(z)p(y)p(x|z,\ y)$.

Вероятностная модель генерации данных

- Веса моделей в смеси $\boldsymbol{\pi}$ получены из априорного распределения $p(\boldsymbol{\pi}|\mu)$;
- Векторы параметров моделей $\mathbf{w}_k$ получены из нормального распределения $p(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}),\ k = 1, \dots, K$;
- Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ выбрана модель f_{k_i}, которой он описывается, причем $p(k_i = k) = \pi_k$;
- Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ целевая переменная y_i определена в соответствии с моделью f_{k_i}: $y_i \sim \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_{k_i}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i,\ \sigma_{k_i}^2)$.

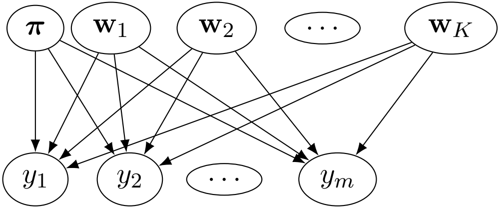
Совместное правдоподобие модели

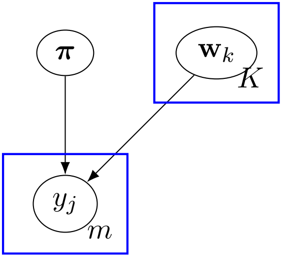
$$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}_1,\ \dots,\ \mathbf{w}_K,\ \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}_1,\ \dots,\ \mathbf{A}_K,\ \sigma_1^2,\ \dots,\ \sigma_K^2,\ \boldsymbol{\mu}) =$$
$$p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^{m} \left(\sum_{l=1}^{K} \pi_l \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_l^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i,\ \sigma_l^2) \right).$$

Введем матрицу скрытых переменных $\mathbf{Z} = \|z_{ik}\|$, где $z_{ik} = 1 \iff k_i = k$.

$$p(\mathbf{y},\ \mathbf{w}_1,\ \dots,\ \mathbf{w}_K,\ \boldsymbol{\pi},\ \mathbf{Z}|\mathbf{X},\ \mathbf{A}_1,\ \dots,\ \mathbf{A}_K,\ \sigma_1^2,\ \dots,\ \sigma_K^2,\ \boldsymbol{\mu}) =$$
$$p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{0},\ \mathbf{A}_k^{-1}) \prod_{i=1}^{m} \prod_{l=1}^{K} \left(\pi_l \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_l^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i,\ \sigma_l^2) \right)^{z_{il}}.$$

Граф 3: $p(x, y, z) = p(z)p(y)p(x|z, y)$.





Вопрос 1: Как в представлении учитывается то, что смесь составлена из моделей линейной регрессии?

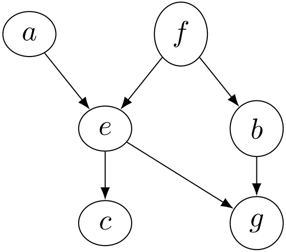
Вопрос 2: Как учесть, что $p(\boldsymbol{\pi}) = \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\mu})$?

Вопрос 3: Как указать наличие наблюдаемого признакового описания $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_m$ и гиперпараметров модели $\mathbf{A}$, $\boldsymbol{\sigma}^2$?

Вопрос 4: Зачем нам графическое представление вероятностных моделей?

Критерий условной независимости D-separation

Рассмотрим две группы переменных A, B и проверим их условную независимость при условии группы переменных C.
D-separation. Группы переменных A и B условно независимы, если все неориентированные пути из A в B блокированы C.

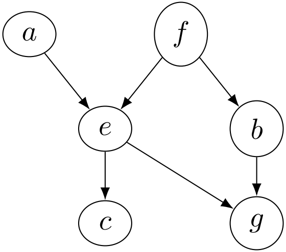


Путь из вершины a в вершину b называется блокированным набором вершин C, если выполнено хотя бы одно из условий

- Стрелки на пути встречаются перед-хвост или хвост-хвост в вершине $c \in C$;
- Стрелки на пути встречаются перед-перед в вершине x, такой, что $x \notin C$ и все ее ориентированные потомки $y \notin C$.

Пути из a **в** b**:** $a \to e \to g \leftarrow b$; $a \to e \leftarrow f \to b$.
Вопрос: Зависимы ли переменные a и b?

Условная независимость как фильтр



Условия условной независимости:

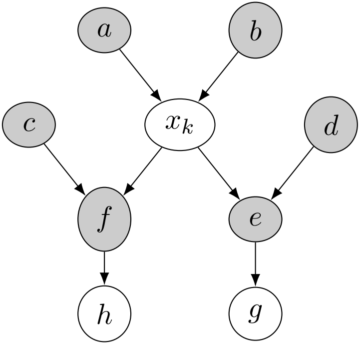
- $a \perp b | \emptyset$;
- $a \perp f | \emptyset$;
- $a \not\perp f | e$;
- $a \not\perp c | \emptyset$;
- $a \perp c | e$;

$\vdots$

-

Утверждение: Множество распределений, представимых ориентированным графом заданного вида, совпадает с множеством распределений, удовлетворяющим всем условиям условной независимости, им порожденным.

$$p(x_1,\,\ldots,\,x_K) = \prod_k p(x_k|Pa_k).$$



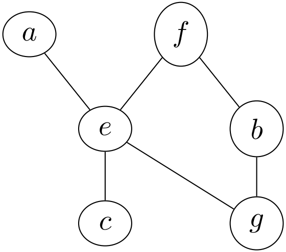
$$p(x_k|\mathbf{x}_{j\neq k}) = \frac{\prod_l p(x_l|Pa_l)}{\int \prod_l p(x_l|Pa_l)dx_k}.$$

$$p(x_1,\,\ldots,\,x_K) = p(a)p(b)p(x_k|a,b)p(c)p(d)$$
$$p(e|d,\,x_k)p(f|c,\,x_k)p(g|e)p(h|f).$$

$$p(x_k|\mathbf{x}_{j\neq i}) =$$
$$\frac{p(x_k|a,b)p(e|d,\,x_k)p(f|c,\,x_k)}{\int p(x_k|a,b)p(e|d,\,x_k)p(f|c,\,x_k)dx_k}.$$

Вопрос: От каких переменных действительно зависит $x_k|\mathbf{x}_{j\neq k}$?

Неориентированные графические модели $\equiv$ марковские случайные поля.



Идея: Определить критерий условной независимости в терминах разделимости, не d-разделимости.

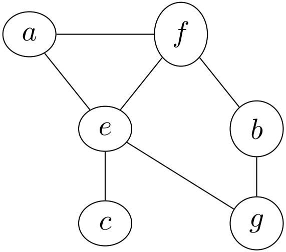
Вопрос: Независимы ли a и b

- Безусловно?
- При условии e?
- При условии f?
- При условии f, g?

Вопрос: Что есть марковское «одеяло» для неориентированных графических моделей?

Замечание: Если x_i и x_j не соединены ребром, то они независимы при условии всех остальных переменных:
$p(x_i,\, x_j|\mathbf{x}_{\setminus\{i,\,j\}}) = p(x_i|\mathbf{x}_{\setminus\{i,\,j\}})p(x_j|\mathbf{x}_{\setminus\{i,\,j\}})$.

Замечание: Если x_i и x_j не соединены ребром, то они независимы при условии всех остальных переменных:
$p(x_i, x_j|\mathbf{x}_{\setminus\{i,j\}}) = p(x_i|\mathbf{x}_{\setminus\{i,j\}})p(x_j|\mathbf{x}_{\setminus\{i,j\}})$.



$$p(a, b, c, e, f, g) = \frac{1}{Z}\psi_{afe}(a, f, e)\psi_{ec}(e, c)\psi_{eg}(e, g)\psi_{bg}(b, g)\psi_{bf}(b, f).$$

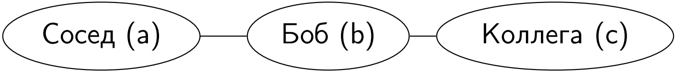
$$Z = \int \prod_i \psi_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i}).$$

Вопрос: Какими свойствами должны обладать $\psi_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i})$, чтобы задать корректное распределение?

Теорема (Hammersley-Clifford). Предположим, что все потенциалы строго положительны $\psi_C(\mathbf{x}_C) > 0 \, \forall \, \mathbf{x}_C$. Тогда факторизация по максимальным кликам графа задает то же множество распределений, что и набор условий условной независимости в терминах графовой разделимости.

Пример построения НГМ

Пусть моделируется заболеваемость простудой для трех человек: Боба, его соседа и коллеги.
Метка 0 соответствует тому, что человек здоров, а 1 – болезни.



$$p(a,\ b,\ c) = \frac{1}{Z}\psi_{ab}(a,\ b)\psi_{bc}(b,\ c),\ a,\ b,\ c \in \{0,\ 1\}.$$

$$\psi_{a,\,b}(a,\ b) = \begin{cases} 20,\ a = 0,\ b = 0, \\ 2,\ a = 1,\ b = 1, \\ 1,\ a = 0,\ b = 1, \\ 1,\ a = 1,\ b = 0. \end{cases},\ \psi_{b,\,c}(b,\ c) = \begin{cases} 5,\ b = 0,\ c = 0, \\ 0.7,\ b = 1,\ c = 1, \\ 5,\ b = 0,\ c = 1, \\ 0.1,\ b = 1,\ c = 0. \end{cases}$$

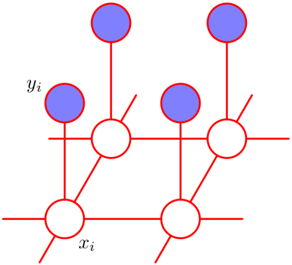
Задание потенциала через энергию

Идея: $\psi_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i}) = \exp(-E_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i}))$.

Тогда $\log p(\mathbf{x}) \propto -E(\mathbf{x}) = -\sum_i E_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i})$.

Пример: Пусть имеется бинарное изображение $\mathbf{y}$, $y_i \in \{-1, 1\}$, которое зашумлено. Требуется восстановить исходное изображение $\mathbf{x}$.

$$E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h \sum_i x_i - \beta \sum_{(i, j) \in \varepsilon} x_i x_j - \eta \sum_i x_i y_i.$$



Графическая модель $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ [Bishop, 2006]

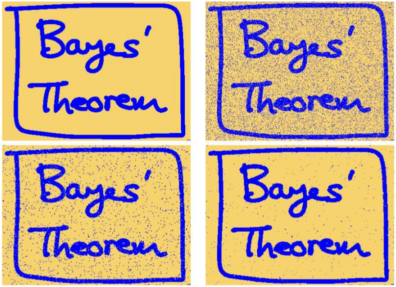
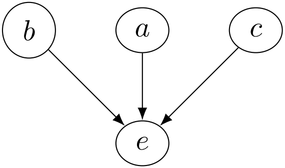


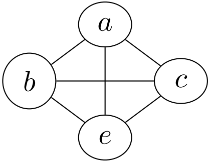
Иллюстрация шумоподавления [Bishop, 2006]

Связь между ориентированными и неориентированными моделями

Вопрос: Можно ли по ориентированной модели построить соответствующую ей неориентированную и наоборот?



$$p(a,\ b,\ c,\ e) = p(a)p(b)p(c)p(e|a,\ b,\ c).$$



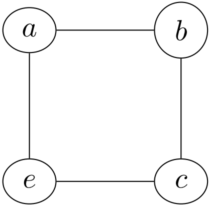
$$p(a,\ b,\ c,\ e) = \psi(a,\ b,\ c,\ e).$$

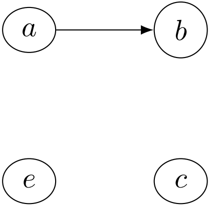
Конверсия из ориентированного в неориентированный граф:

- Соединяем ребрами попарно всех родителей каждой вершины («moralization»);
- Удаляем ориентацию на ребрах и получаем неориентированный граф;
- Для каждой клики задаем потенциал $\psi_{C_i}(\mathbf{x}_{C_i}) = 1$;
- Для каждого условного распределения, умножаем на него потенциал той клики, к которой относятся все переменные из него.

Из неориентированной модели к ориентированной

Вопрос: Верно ли, что ориентированная модель позволяет всегда «более аккуратно» задать зависимости, не потеряв условных независимостей между переменными?





$p(a,\ b,\ c,\ e) = \psi_1(a,\ b)\psi_2(b,\ c)\psi_3(c,\ e)\psi_4(e,\ a).$
Свойства зависимости и независимости переменных:

- $a \not\perp c|\emptyset$;
- $a \perp c|b,\ e$;
- $b \perp e|a,\ c$;
- $\vdots$

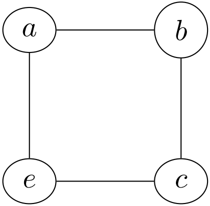
$p(a,\ b,\ c,\ e) = \psi_1(a,\ b)\psi_2(b,\ c)\psi_3(c,\ e)\psi_4(e,\ a)$.

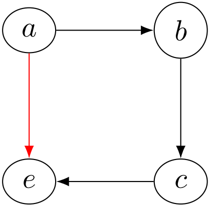
Свойства зависимости и независимости переменных:

- $a \not\perp c|\emptyset$;
- $a \perp c|b,\ e$;
- $b \perp e|a,\ c$;
- $\vdots$

Вопрос: Могли ли мы ориентировать ребро $(b,\ c)$ иначе и выполнить условие $a \perp c|b,\ e$?

Из неориентированной модели к ориентированной 3





$p(a,\, b,\, c,\, e) = \psi_1(a,\, b)\psi_2(b,\, c)\psi_3(c,\, e)\psi_4(e,\, a).$

Свойства зависимости и независимости переменных:

- $a \not\perp c | \emptyset$;
- $a \perp c | b,\, e$;
- $b \perp e | a,\, c$;
- $\vdots$

Вопрос: Соответствует ли граф справа правдоподобию? Нет ли дополнительной условной независимости?

Слева: $p(a,\ b,\ c,\ e) = \psi_1(a,\ b)\psi_2(b,\ c)\psi_3(c,\ e)\psi_4(e,\ a)$.
Свойства зависимости и независимости переменных:
$a \perp c|b,\ e,\ b \perp e|a,\ c,\ \ldots$

Справа: $p(a,\ b,\ c,\ e) = p(a)p(b|a)p(c|b,\ a)p(e|a,\ c)$.
Замечание 1: Без ребра из а в с, была дополнительная условная независимость $a \perp c \mid b$.
Вопрос 1: Почему нельзя было бы провести вместо $a \to c$ ребра $c \to a,\ e \to b$?
Вопрос 2: Помогло ли бы ребро $b \to e$ убрать $a \perp c \mid b$?
Вопрос: Какую условную независимость мы потеряли?

Литература

1. Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 381-394.
2. Goodfellow, Ian, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. Deep learning. MIT press, 2016. Pp. 549-576.
3. Koller, Daphne, and Nir Friedman. Probabilistic graphical models: principles and techniques. MIT press, 2009.
4. Bacchus, Fahiem, and Adam J. Grove. "Graphical models for preference and utility."arXiv preprint arXiv:1302.4928 (2013).
5. Mor, Bhavya, Sunita Garhwal, and Ajay Kumar. "A systematic review of hidden markov models and their applications."Archives of computational methods in engineering 28.3 (2021): 1429-1448.
6. Pearl, Judea. Probabilistic reasoning in intelligent systems: networks of plausible inference. Morgan kaufmann, 1988.
7. Pearl, Judea. "Graphical models for probabilistic and causal reasoning."Quantified representation of uncertainty and imprecision (1998): 367-389.