



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Méréstechnika és Információs rendszerek Tanszék

Bayes-hálóok tanulása, oksági modellezés

Előadó: Dr. Hullám Gábor

Előadás anyaga: Dr. Antal Péter



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2



Bayes-tanulás

D adatok, H_1, H_2, \dots hipotézisek, ismeretlen X predikciója
- minden egyes H_i az X egy teljes eloszlását specifikálja

$$P(X) = \sum_i P(X | H_i) P(H_i)$$

$$P(X | D) = \sum_i P(X | D, H_i) P(H_i | D) = \sum_i P(X | H_i) P(H_i | D)$$

$$\blacktriangleright P(H_i | D) = \alpha \cdot P(D | H_i) \cdot P(H_i)$$

posterior

likelihood

prior


Teljes Bayes tanulás: $P(H_i | D)$ kiszámítása az összes H_i -re.

A legtöbb esetben kezelhetetlen, de nincs jobb módja az optimalis predikció készítésnek.



Teljes bayesi tanulás közelítése

$$P(X) = \sum_i P(X | H_i) P(H_i)$$

$$P(X | D) = \sum_i P(X | D, H_i) P(H_i | D) = \sum_i P(X | H_i) P(H_i | D)$$


A legelterjedtebb közelítés - a **legvalószínűbb hipotézis**: $\max P(H_i | D)$

$$P(H_{MAP} | D) \approx 1, \quad P(H_{más} | D) \approx 0$$

Maximum a posteriori (MAP) hipotézis melletti predikció:

$$P(X | D) \approx P(X | H_{MAP})$$

A probléma a H_{MAP} megtalálása.

MAP hipotézis:

$$\max(P(H_i | D) = \frac{P(D | H_i) P(H_i)}{P(D)})$$



MAP és ML tanulás

Maximálizálás: „probléma” az „*a priori*” valószínűség

$$P(H_i|D) = \frac{P(D|H_i) \cdot P(H_i)}{P(D)}$$

- „*a priori*” valószínűségeket rendelünk az egyes hipotézisekhez, összegük 1
 - bizonyos esetekben: **egyenletes** „*a priori*” eloszlás
 - =tudás hiánya, mert nincs belátásunk arra, melyik a jobb
- $$\max_i P(H_i | D) = \max_i P(D | H_i)$$
- ekkor csak a likelihood nagysága számít, ezért **maximum likelihood (ML)** hipotézisnek nevezzük a legnagyobb valószínűségű hipotézist.



Bayesian Model Averaging example

Suppose there are five kinds of bags of candies:

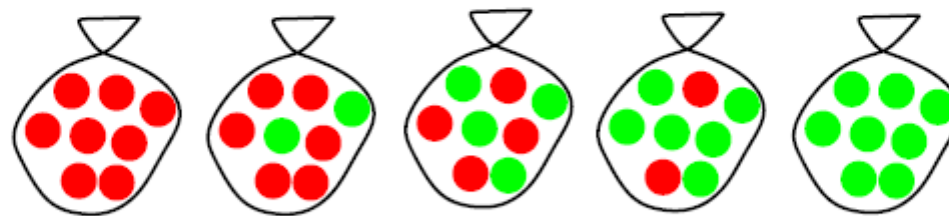
10% are h_1 : 100% cherry candies

20% are h_2 : 75% cherry candies + 25% lime candies

40% are h_3 : 50% cherry candies + 50% lime candies

20% are h_4 : 25% cherry candies + 75% lime candies

10% are h_5 : 100% lime candies

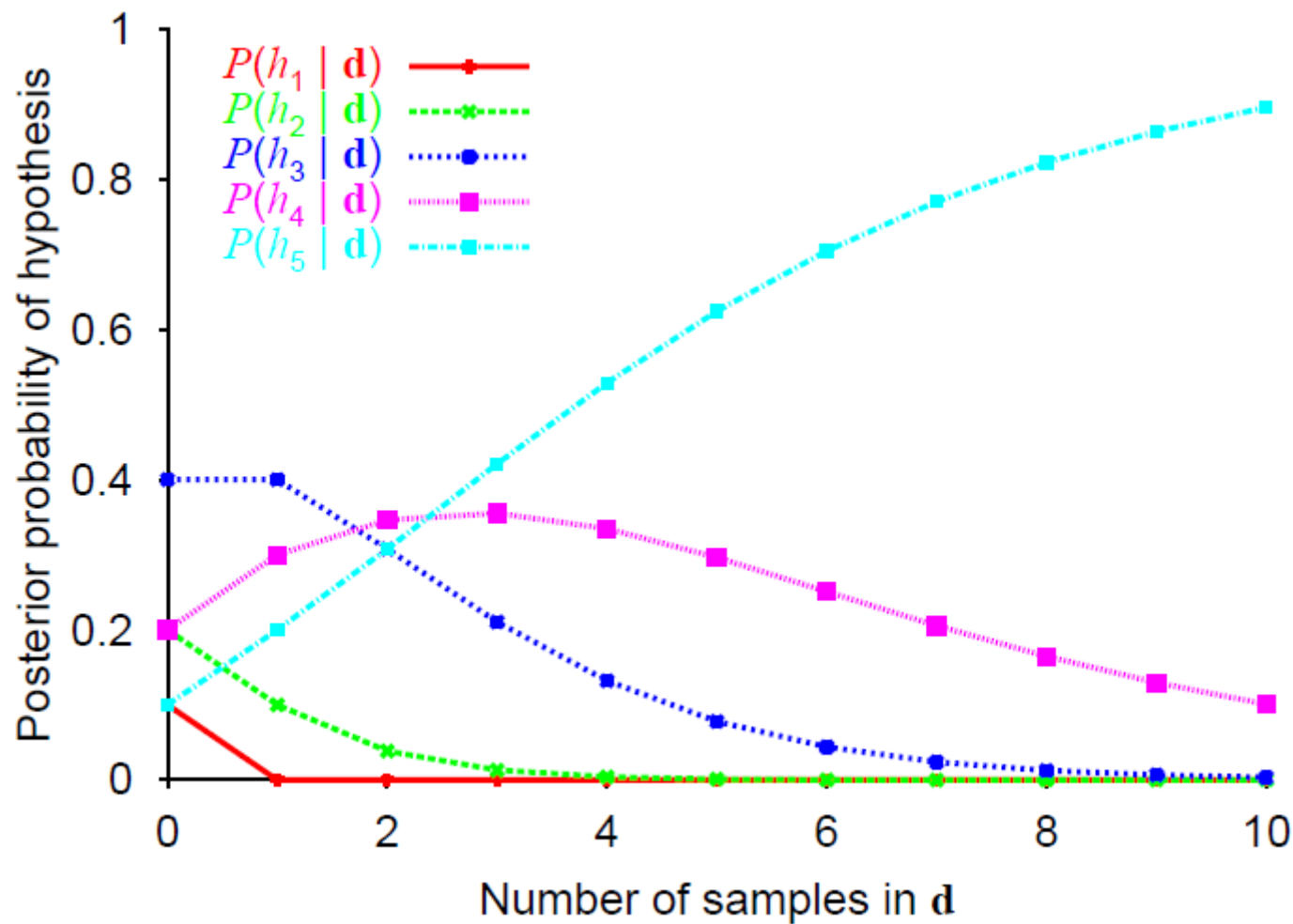


Then we observe candies drawn from some bag: ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●

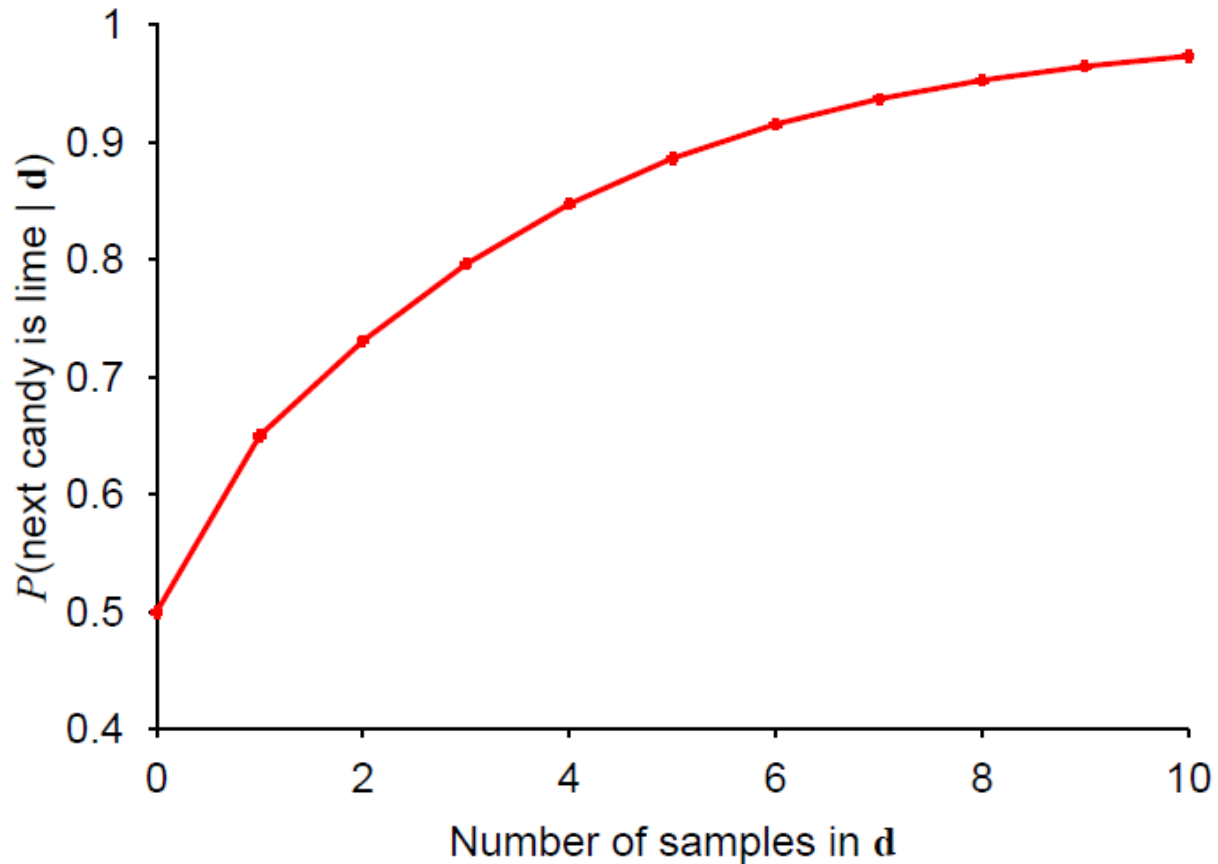
What kind of bag is it? What flavour will the next candy be?



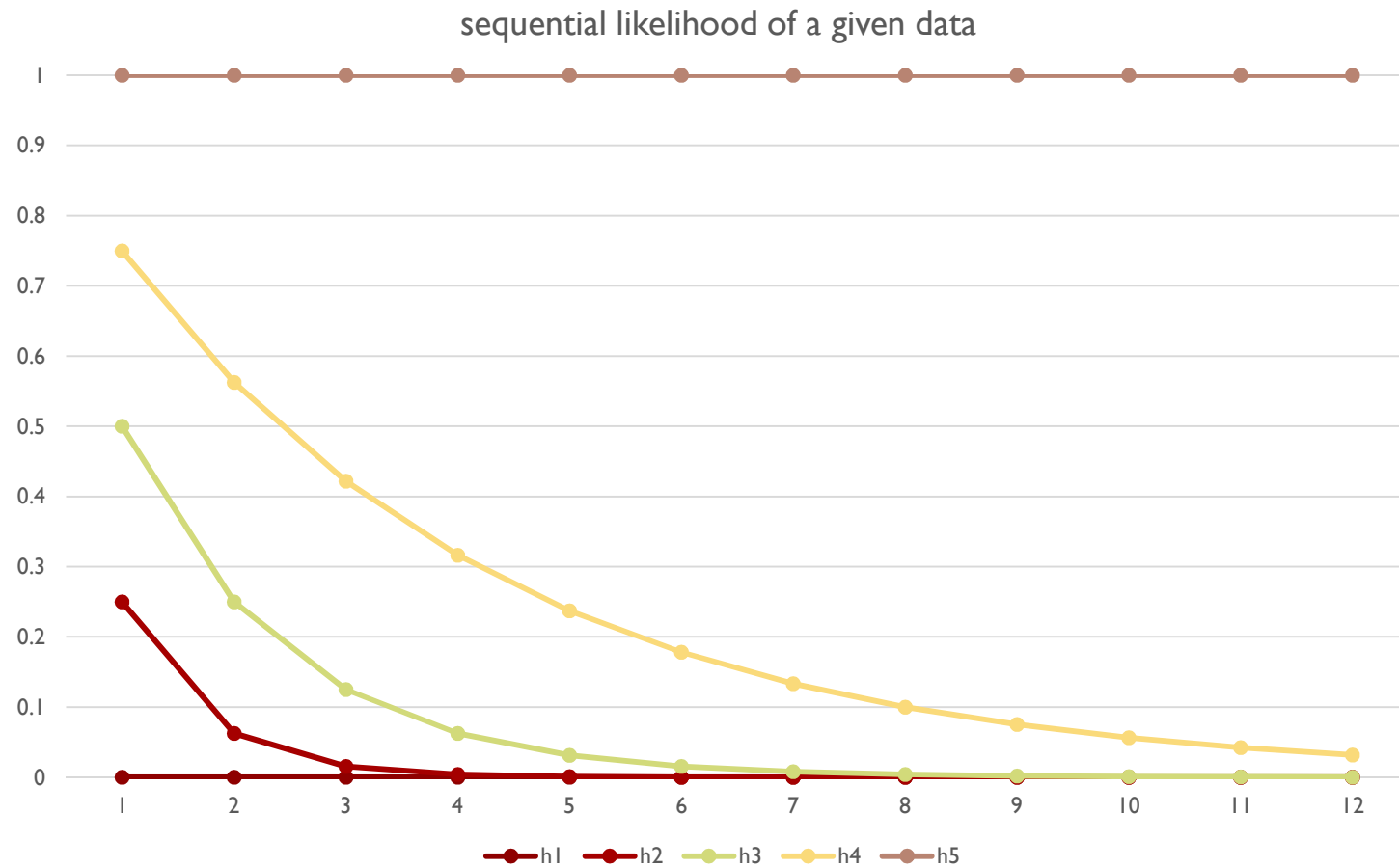
Az egyes modellek predikciójának a posteriori valószínűsége



A bayesi módon átlagolt modell predikciójának *a posteriori* valószínűsége



Maximum likelihood model selection



Struktúranulás

- ▶ Irányított aciklikus gráfok n csomópontra: DAG(n)
- ▶ Csomópontok/változók sorrendezése: \prec
- ▶ Szülői halmazok száma: Π
- ▶ Kardinalitás (számosság):

$$f(n) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+1} 2^{i(n-1)} f(n-i) \text{ with } f(0) = 1$$

n	DAG(n)	G \prec	G \prec ^{\pi ≤4}	G \prec ^{\pi ≤2}	\prec	\pi \prec	\pi \prec ≤ 4	\pi \prec ≤ 2
5	2.9e+004	1e+003	1e+003	6.2e+002	1.2e+002	30	30	24
6	3.8e+006	3.3e+004	3.2e+004	9.9e+003	7.2e+002	62	61	40
7	1.1e+009	2.1e+006	1.8e+006	2.2e+005	5e+003	1.3e+002	1.2e+002	62
8	7.8e+011	2.7e+008	1.8e+008	6.3e+006	4e+004	2.5e+002	2.2e+002	91
9	1.2e+015	6.9e+010	2.9e+010	2.3e+008	3.6e+005	5.1e+002	3.8e+002	1.3e+002
10	4.2e+018	3.5e+013	7.5e+012	1.1e+010	3.6e+006	1e+003	6.4e+002	1.7e+002
15	2.4e+041	4.1e+031	2.1e+027	3.1e+019	1.3e+012	3.3e+004	4.9e+003	5.7e+002
35	2.1e+213	1.3e+179	1.8e+109	8.5e+068	1e+040	3.4e+010	3.8e+005	7.2e+003



Bayes-háló struktúratanulása NP-nehéz

- ▶ **Tétel:** Legyen V a változók egy halmaza, melynek együttes valószínűségeloszlása $p(V)$. Tegyük fel, hogy létezik egy orákulum, amely $O(1)$ időben megválaszolja, hogy egy függetlenségi állítás igaz p -ben.
- ▶ Legyen $0 < k \leq |V|$ és $s = \frac{1}{2}n(n - 1) - \frac{1}{2}k(k - 1)$
- ▶ Ekkor annak eldöntése az orákulum segítségével, hogy létezik-e vagy sem egy olyan nem minimális Bayes-háló, ami reprezentálja p -t kisebb vagy egyenlő, mint s éllel, NP-nehéz

= *Megfelelő Bayes-háló megtalálása a megfigyelési adatokhoz NP-nehéz*



Bayes-háló struktúratanulása NP-nehéz

- ▶ **Tétel:** Legyen V a változók egy halmaza D_N a teljes adathalmaz $S(G, D_N)$ egy pontszámfüggvény (scoring function) és c egy valós szám.
- ▶ Ekkor annak eldöntése, hogy létezik-e egy V változók felett definiált G_0 Bayes-háló, amelynél minden csomópont legfeljebb $l < k$ szülővel rendelkezik, úgy hogy $c \leq S(G_0, D_N)$, az NP-nehéz

= A legjobb illeszkedési pontszámú Bayes-háló megtalálása NP-nehéz



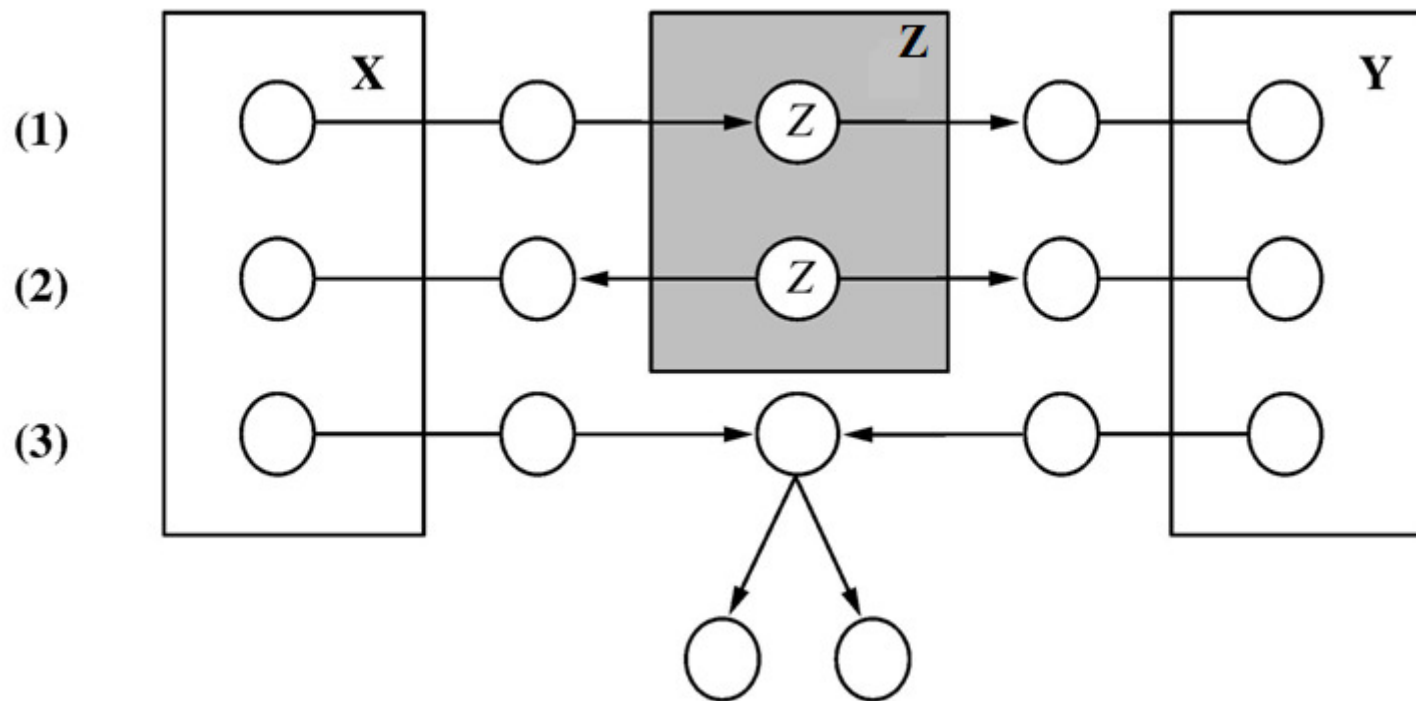
Bayes-háló - függőségek

- ▶ **Bayes-háló** = feltételes függetlenségek (függőségek) térképe
- ▶ A kérdés: egy adott struktúrából milyen feltételes függetlenségeket/függőségeket lehet kiolvasni?
- ▶ A válasz: **d-szeparációs szabályok** szerint
 - ▶ Directed separation ~ d-eltválasztás



Bayes-háló: D-szeparáció

- ▶ Jelölje $I_G(X, Y|Z)$ hogy X d-szeparált Y -től feltéve Z -t a G irányított gráfban.



D-szeparáció – globális Markov-feltétel

Definition 7 A distribution $P(X_1, \dots, X_n)$ obeys the global Markov condition w.r.t. DAG G , if

$$\forall X, Y, Z \subseteq U \ (X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_G \Rightarrow (X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_P, \quad (9)$$

where $(X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_G$ denotes that X and Y are d -separated by Z , that is if every path p between a node in X and a node in Y is blocked by Z as follows

1. either path p contains a node n in Z with non-converging arrows (i.e. $\rightarrow n \rightarrow$ or $\leftarrow n \rightarrow$),
2. or path p contains a node n not in Z with converging arrows (i.e. $\rightarrow n \leftarrow$) and none of its descendants of n is in Z .



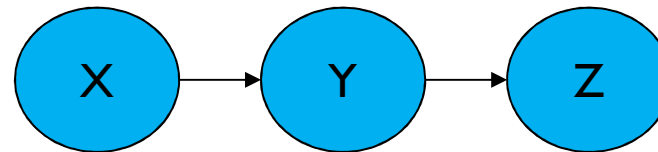
Feltételes függetlenségi modell

- ▶ A P eloszlás M függetlenségi térképe (modellje) az érvényes feltételes függetlenségeket jelölő tripletek halmaza:

$$M_P = \{I_{P,1}(X_1, Y_1 | Z_1), \dots, I_{P,k}(X_k, Y_k | Z_k)\}$$

- ▶ Ha $P(X, Y, Z)$ egy **Markov-lánc**, akkor

$$M_P = \{D(X, Y), D(Y, Z), I(X, Z | Y), \text{ és } D(X, Z)^*\},$$



- ▶ ahol $D(\dots) = \neg I(\dots)$

*normális esetben $D(X, Z)$, kivételesen lehet $I(X, Z)$

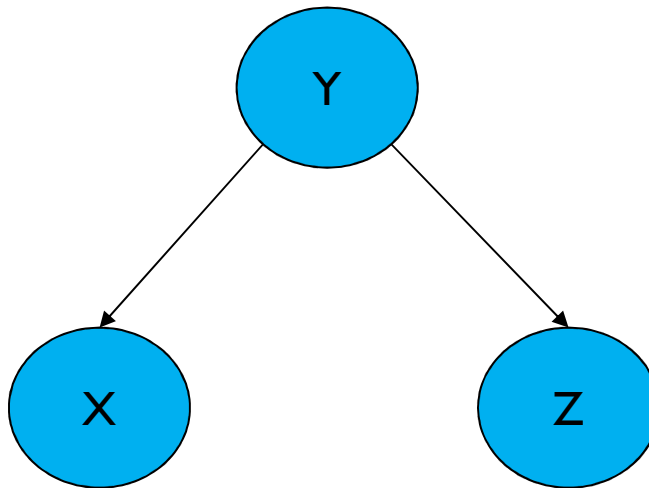


Feltételes függetlenségi modell - NBN

- ▶ Ha $P(X,Y,Z)$ egy **naiv Bayes-háló (NBN)**, akkor
 $M_P = \{D(X,Y), D(Y,Z), I(X,Z|Y), \text{ és } D(X,Z)^*\}$,

- ▶ ahol $D(\dots) = \neg I(\dots)$

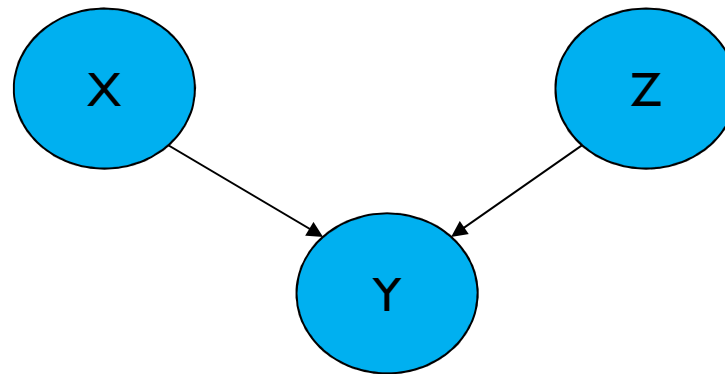
*normális esetben $D(X,Z)$, kivételesen lehet $I(X,Z)$



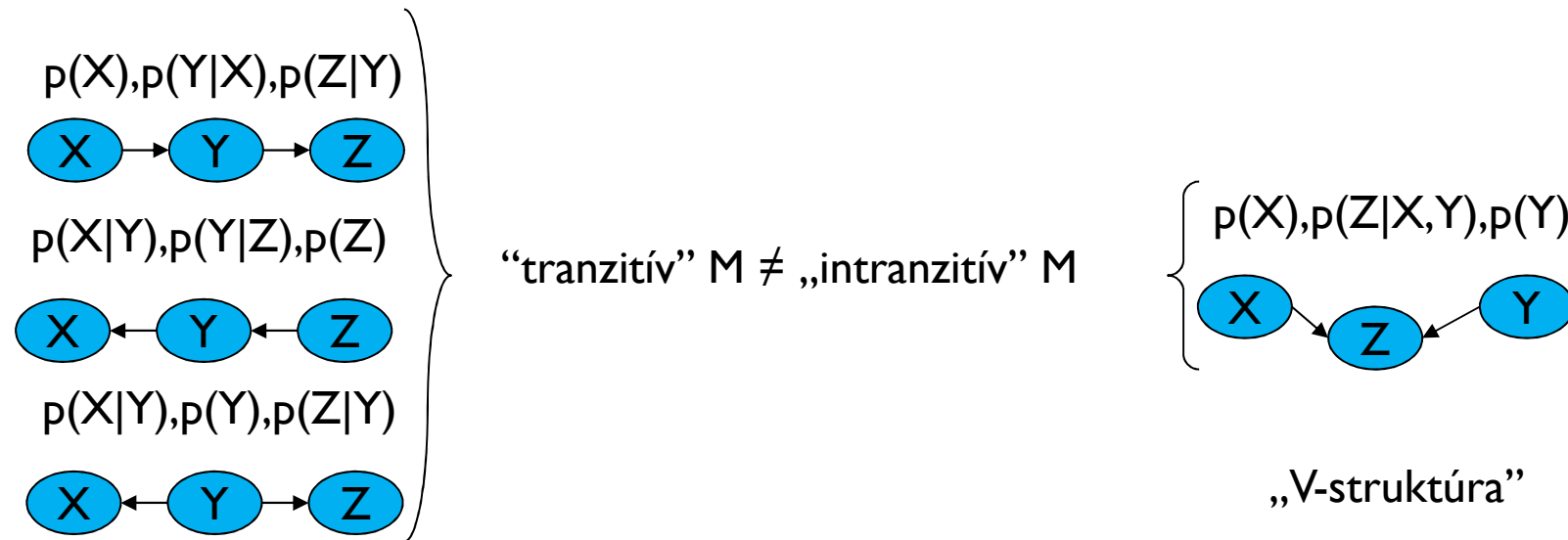
Feltételes függetlenségi modell – V-struktúra

- ▶ Ha $P(X,Y,Z)$ egy **V-struktúra**, akkor

$$M_P = \{D(X,Y), D(Y,Z), I(X,Z), \text{ és } D(X,Z|Y)\},$$



Feltételes függőségeket / függetlenségeket kódoló tripletetek



$$M_p = \{D(X, Z), D(Z, Y), D(X, Y), I(X, Y|Z)\}$$

Gyakran: a jelenlegi állapot (tudás) ismerete a jövőbeli állapotokat feltételesen függetlenné teszi a korábbiaktól



Függetlenségek reprezentálása

D-separation provides a sound and complete, computationally efficient algorithm to read off an (in)dependency model consisting the independencies that are valid in all distributions Markov relative to G , that is $\forall X, Y, Z \subseteq V$

$$(X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_G \Leftrightarrow ((X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_P \text{ in all } P \text{ Markov relative to } G). \quad (10)$$



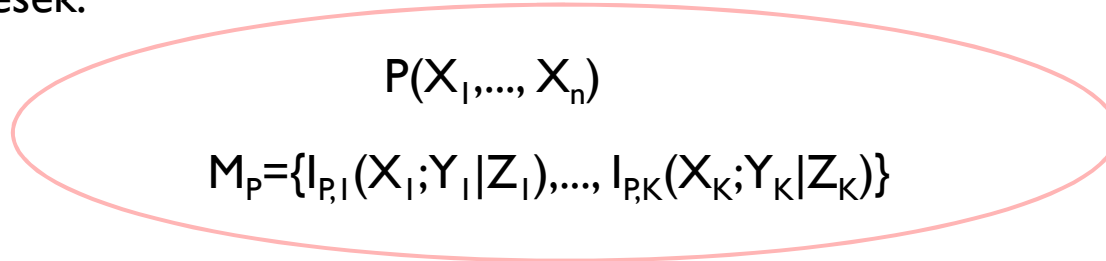
Oksági modellek megfigyelési ekvivalenciája

Oksági modellek:



J.Pearl:
~„3D objects”

Passzív megfigyelések:



„2D projection”

- Különböző oksági modelleknek lehet ugyanaz a függetlenségi térképe
- Jellemzően az oksági modelleket nem lehet tökéletesen megtanulni/meghatározni kizárólag passzív megfigyelési adatokból
- Ezek egy része **megfigyelés-ekvivalens**



Markov-lánc, mint oksági modell

Oksági modell:



$P(X_1, \dots)$
 $M_P = \{I(X_{i+1}, X_{i-1} | X_i)\}$
„elsőrendű Markov-tulajdonság”

Időbeliség meghatározható?



Megfigyelési ekvivalencia – V-struktúrák

Definition 11 *Two DAGs G_1, G_2 are observationally equivalent, if they imply the same set of independence relations (i.e. $(X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_{G_1} \Leftrightarrow (X \perp\!\!\!\perp Y|Z)_{G_2}$).*

The implied equivalence classes may contain $n!$ number of DAGs (e.g. all the full networks representing no independencies) or just 1.

Theorem 2 *Two DAGs G_1, G_2 are observationally equivalent, iff they have the same skeleton (i.e. the same edges without directions) and the same set of v-structures (i.e. two converging arrows without an arrow between their tails).*

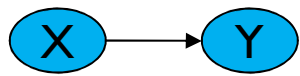
Definition 12 *The essential graph representing observationally equivalent DAGs is a partially oriented DAG (PDAG), that represents the identically oriented edges called compelled edges of the observationally equivalent DAGs (i.e. in the equivalence class), such a way that in the common skeleton only the compelled edges are directed (the others are undirected representing inconclusiveness).*



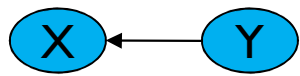
Reichenbach közös ok elve

Reichenbach's Common Cause Principle:

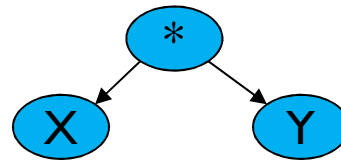
A korreláció X és Y esemény között azt jelenti, hogy vagy X okozza Y -t, vagy Y okozza X -et, vagy X és Y -nak közös oka van.



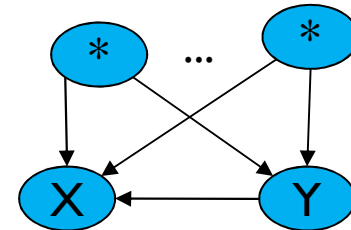
X okozza Y -t



Y okozza X -et

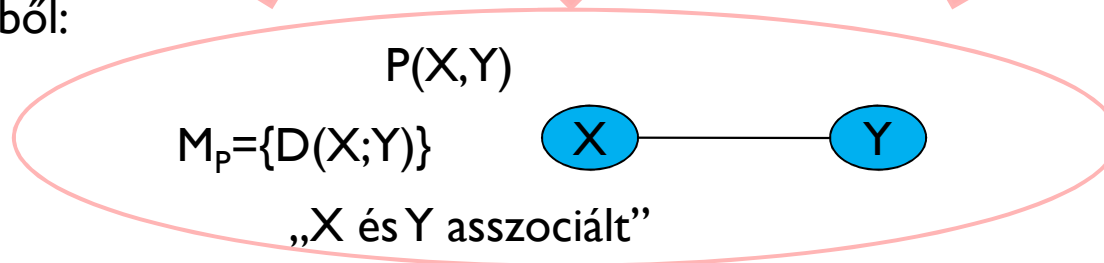


Van egy közös ok
(pure confounding)



Egy ok-okozati kapcsolatot
„zavarnak” más hatások

Passzív megfigyelésekből:



Kényszeralapú Bayes-háló tanulás

The Inductive Causation algorithm (assuming a stable distribution P):

1. *Skeleton*: Construct an undirected graph (skeleton), such that variables $X, Y \in V$ are connected with an edge iff $\forall S(X \perp\!\!\!\perp Y|S)_P$, where $S \subseteq V \setminus \{X, Y\}$.
2. *v-structures*: Orient $X \rightarrow Z \leftarrow Y$ iff X, Y are nonadjacent, Z is a common neighbour and $\neg \exists S$ that $(X \perp\!\!\!\perp Y|S)_P$, where $S \subseteq V \setminus \{X, Y\}$ and $Z \in S$.
3. *propagation*: Orient undirected edges without creating new v-structures and directed cycle.

Theorem

The following four rules are necessary and sufficient.

R_1 if $(a \neq c) \wedge (a \rightarrow b) \wedge (b - c)$, then $b \rightarrow c$

R_2 if $(a \rightarrow c \rightarrow b) \wedge (a - b)$, then $a \rightarrow b$

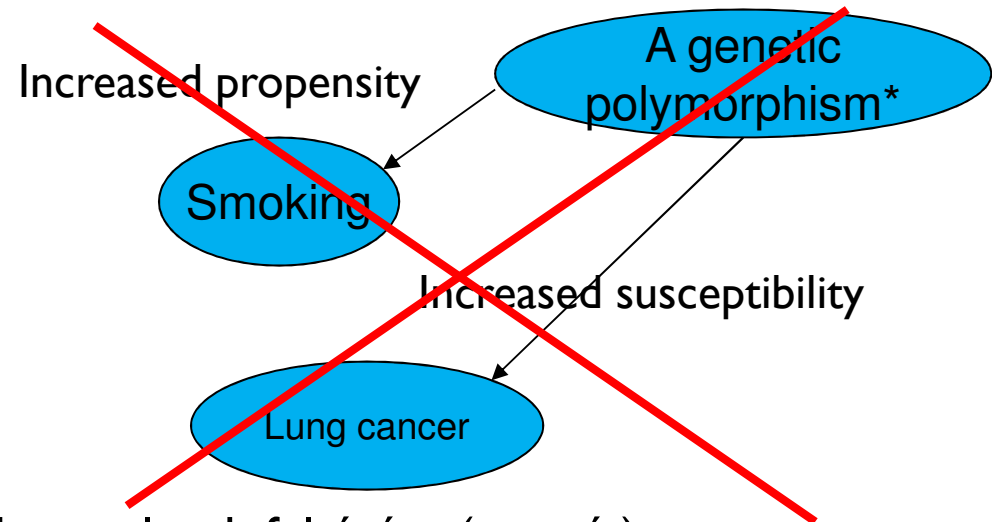
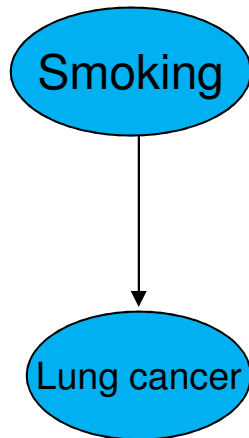
R_3 if $(a - b) \wedge (a - c \rightarrow b) \wedge (a - d \rightarrow b) \wedge (c \neq d)$, then $a \rightarrow b$

R_4 if $(a - b) \wedge (a - c \rightarrow d) \wedge (c \rightarrow d \rightarrow b) \wedge (c \neq b) \wedge (a - d)$, then $a \rightarrow b$



Lokális oksági felfedezés (LCD)

- ▶ Lehet-e oksági kapcsolatokat tanulni megfigyelési adatokból zavaró változók jelenlétében?



- Automatizált, „tabula rasa” oksági kapcsolatok feltárása (passzív) megfigyelésekből lehetséges, vagyis zavaró változók kizárhatók

