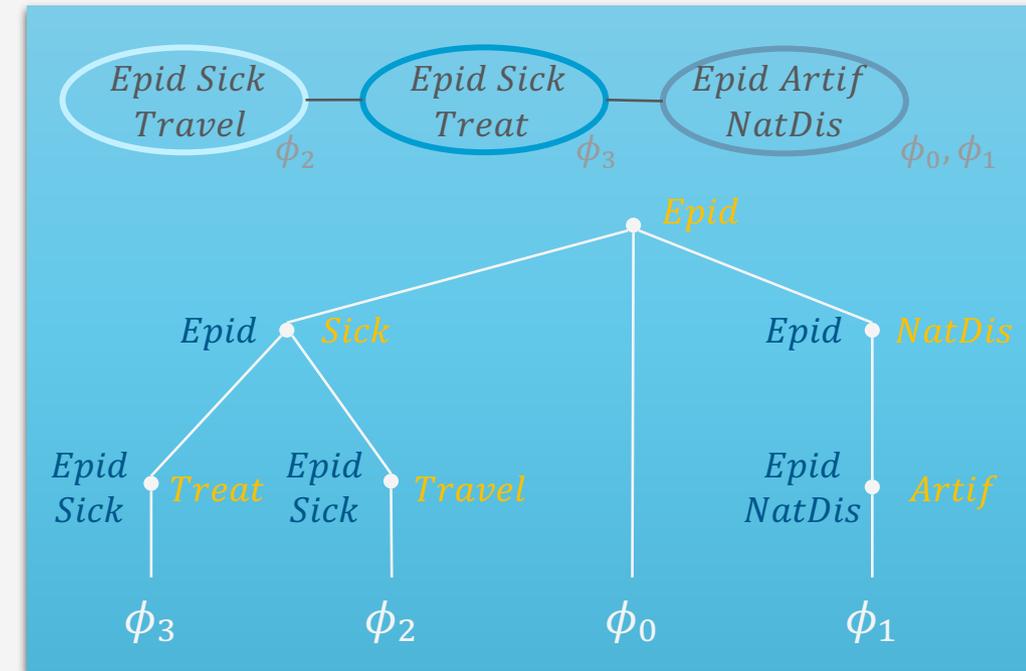


Exakte Inferenz in Episodischen PGMs

(c) Inferenzproblem Zustandsanfragen

Einführung in die
Künstliche Intelligenz



Inhalte

1. Künstliche Intelligenz & Agenten

- Agentenabstraktion, Rationalität
- Aufgabenumgebung

2. Episodische PGMs

- Gerichtetes Modell: Bayes Netze (BNs)
- Ungerichtete Modelle

3. Exakte Inferenz in episodischen PGMs

- Wahrscheinlichkeits- und Zustandsanfragen
- Direkt auf den Modellen, mittels Hilfsstrukturen

4. Approximative Inferenz in episodischen PGMs

- Wahrscheinlichkeitsanfragen
- Deterministische, stochastische Algorithmen

5. Lernalgorithmen für episodische PGMs

- Bei (nicht) vollständigen Daten, (un)bekannter Struktur

6. Sequentielle PGMs und Inferenz

- Dynamische BNs, Hidden-Markov-Modelle
- filtering / prediction / hindsight Anfragen, wahrscheinlichste Zustandssequenz
- Exakter, approximativer Algorithmus

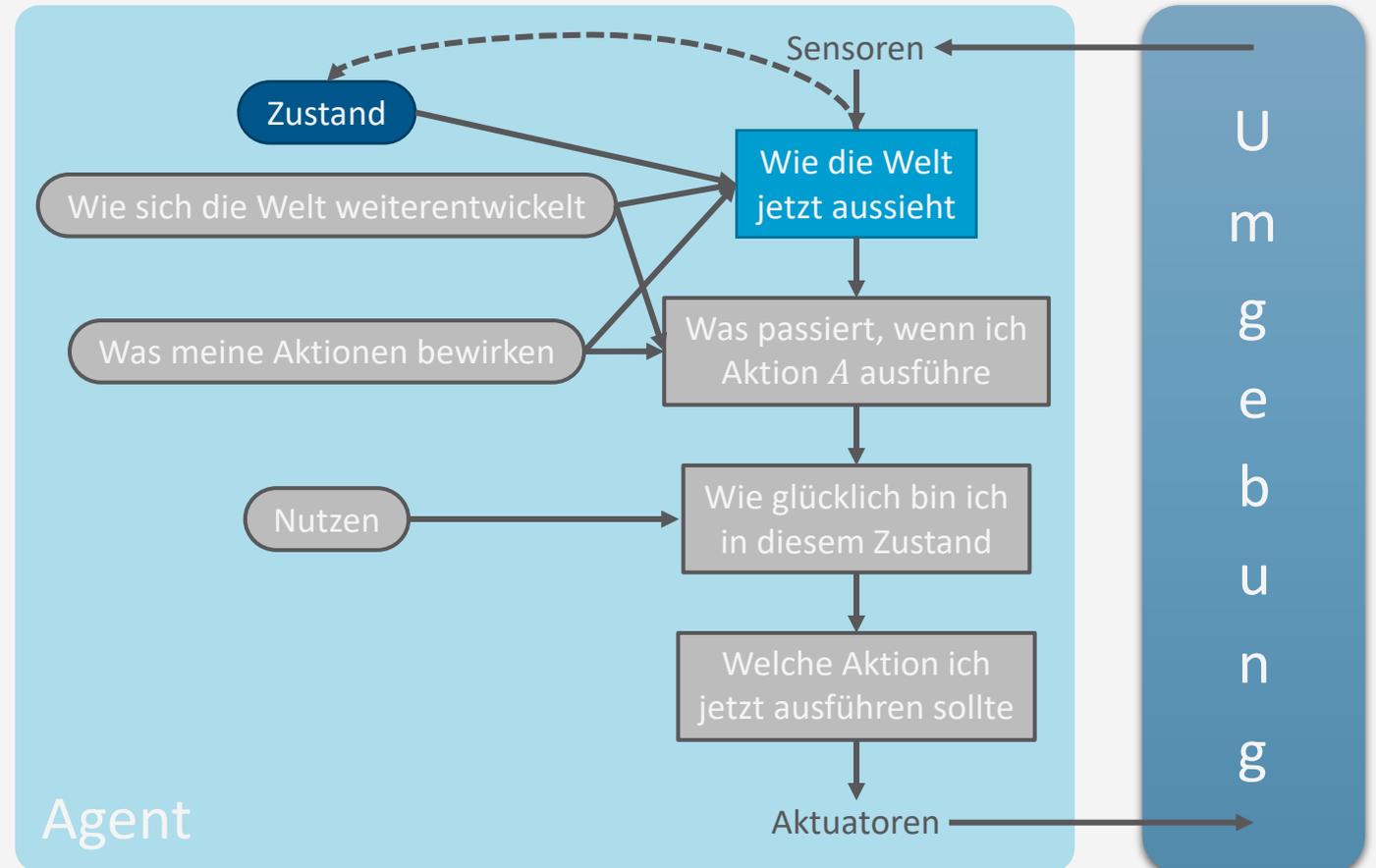
7. Entscheidungstheoretische PGMs

- Präferenzen, Nutzenprinzip
- PGMs mit Entscheidungs- und Nutzenknoten
- Berechnung der besten Aktion (Aktionssequenz)

8. Abschlussbetrachtungen

Einordnung der Vorlesung: *Modell- und nutzenbasierter Agent*

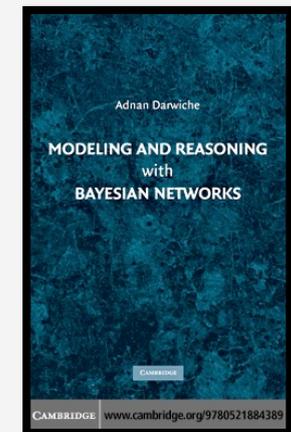
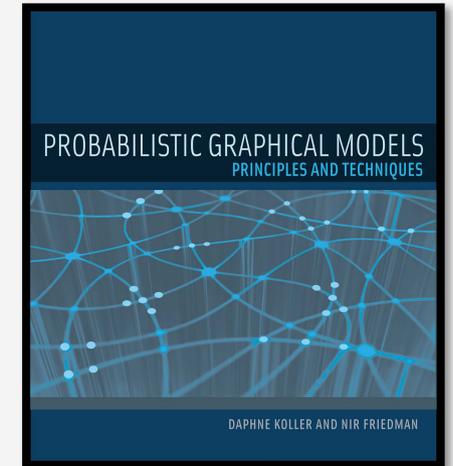
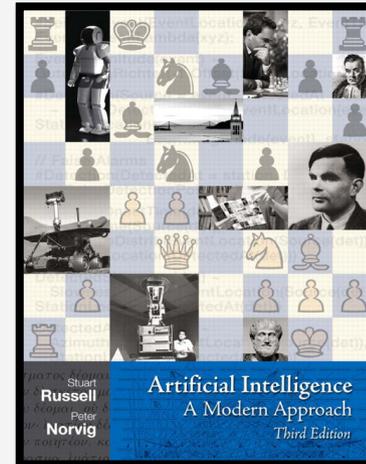
- Nachfolgende Themen der Vorlesung
 2. Episodische PGMs
 3. Exakte Inferenz in episodischen PGMs
 4. Approximative Inferenz in episodischen PGMs
 5. Lernalgorithmen für episodische PGMs
 6. Sequentielle PGMs und Inferenz
 7. Entscheidungstheoretische PGMs



Literaturhinweise

Inhalte dieses Themenblocks werden in den folgenden Kapiteln der Vorlesungsbücher behandelt

- AIMA(de)
 - Kap. 14.4: Exakte Inferenz in Bayes Netzen
- PGM
 - Kap. 9: Variableneliminierung
 - Kap. 10: Exakte Inferenz: Cliquen-Bäume
 - Kap. 13: MAP Inferenz
- Wer gerne ein anderes Buch ausprobieren möchte (Fokus auf BNs):
 - Adnan Darwiche, *Modelling and Reasoning with Bayesian Networks*, 2009.



Überblick: 3. Exakte Inferenz in episodischen PGMs

A. Einzelanfragen: Variableneliminierung (VE)

- Algorithmus, Operatoren für Wahrscheinlichkeitsanfragen
- Dekompositionsbäume, Komplexität

B. Multi-Anfragen: Junction Tree (Cliques-Bäume) Algorithmus (JT)

- Cliques, Junction Tree als Hilfsstruktur, Vorverarbeitung und Anfragebeantwortung
- Zusammenhang mit VE, Komplexität
- Geschichtsstunde: Pearl's Probability Propagation (PP) auf Polytree BNs

C. Inferenzproblem Zustandsanfragen

- Ausprägungen: Most probable explanation (MPE) / maximum a posteriori Anfragen (MAP)
- Semantik: Ausmaximieren statt aussummieren; max-out Operator in VE
- Auswirkungen auf die Komplexität

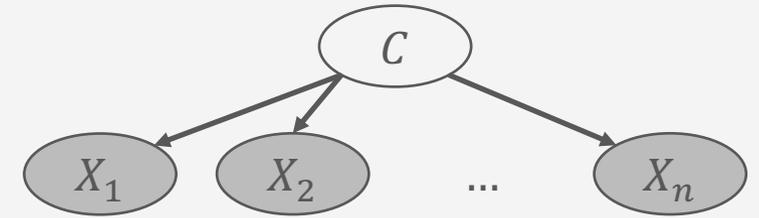
Most Probable Explanation (MPE)

Zustandsanfragen*

* Im Kontrast zu *Wahrscheinlichkeitsanfragen* (Anfragen zu marginalen und bedingten Wahrscheinlichkeitsverteilungen)

Anwendungen

- Naive Bayes Klassifizierer: $P(C | \mathbf{x})$
 - Nichts auszusummieren: $S = \{C\}, T = \text{rv}(\mathbf{x})$ und damit
$$U = R \setminus S \setminus T = \emptyset$$
- Eigentlich will man $\arg \max_{c \in \text{Val}(C)} P(C | \mathbf{x})$ haben
 - Zustandsanfrage gegeben Evidenz:
„Was ist der wahrscheinlichste Zustand der Zufallsvariablen, der die Evidenz hervorgerufen haben könnte?“
 - Variablen ausmaximieren anstatt aussummieren



Problemformulierung: Most Probable Explanation (MPE)

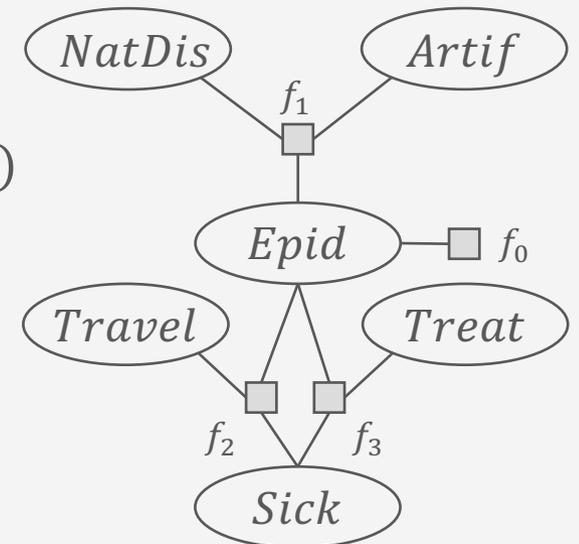
- Gegeben Evidenz, was ist der wahrscheinlichste Zustand der verbleibenden Zufallsvariablen?
 - *Zustandsanfragen* an den wahrscheinlichsten Zustand aller Zufallsvariablen ohne Evidenz
 - Wahrscheinlichste Erklärung (*most probable explanation*, **MPE**)
 - Formal betrachtet, gegeben ein Modell F mit der vollständigen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsverteilung P_F und Evidenz e :

$$MPE_F(e) = \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v \mid e) = \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v, e)$$
 - $V = \text{rv}(F) \setminus \text{rv}(e)$ die Zufallsvariablen in F ohne Evidenz
 - Im Vergleich zu „Wahrscheinlichkeitsanfragen“, wird \sum mit argmax als Eliminierungsoperation ersetzt
 - $MPE_F(e) = \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v \mid e) = \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} \frac{P(v, e)}{P(e)} = \frac{1}{P(e)} \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v, e) = \arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v, e)$
 - Maximierung invariant bezüglich positiver linearer Transformation ($\frac{1}{P(e)}$ lineare Transformation)

MPE: Semantik

- Gegeben die Semantik könnte man die vollständige gemeinsame Verteilung bauen, Evidenz absorbieren lassen und dann die Welt mit der höchsten Wahrscheinlichkeit wählen
- Beispiel: Gegeben $Sick = true$, was ist der wahrscheinlichste Zustand von $Epid, Travel, Treat, NatDis, Artif$?

$$\begin{aligned}
 &MPE(sick) \\
 &= \arg \max_{e, tr, tt, n, a} P(Epid = e, Travel = tl, Treat = tt, NatDis = n, Artif = a \mid sick)
 \end{aligned}$$



$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e, tr, tt, n, a} P(Epid = e, Travel = tl, Treat = tt, NatDis = n, Artif = a \mid sick)$$

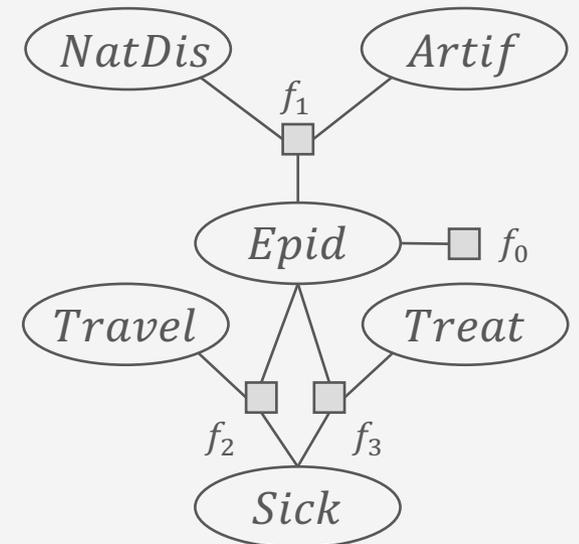
Epid	ϕ_0
false	50
true	1

Travel	Epid	Sick	ϕ_2
false	false	false	20
false	false	true	24
false	true	false	5
false	true	true	6
true	false	false	28
true	false	true	8
true	true	false	7
true	true	true	2

Epid	Sick	Treat	ϕ_3
false	false	false	5
false	false	true	1
false	true	false	3
false	true	true	2
true	false	false	5
true	false	true	4
true	true	false	1
true	true	true	7

Epid	NatDis	Artif	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1

Epid	Travel	Treat	Artif	NatDis	Sick	P
false	false	false	false	false	false	...
false	false	false	false	false	true	0.298
false	false	false	false	true	false	...
false	false	false	false	true	true	0.050
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮



$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e, tr, tt, n, a} P(Epid = e, Travel = tl, Treat = tt, NatDis = n, Artif = a \mid sick)$$

Epid	Travel	Treat	Artif	NatDis	P
false	false	false	false	false	0.298
false	false	false	false	true	0.050
false	false	false	true	false	0.074
false	false	false	true	true	0.025
false	false	true	false	false	0.199
false	false	true	false	true	0.033
false	false	true	true	false	0.050
false	false	true	true	true	0.017
false	true	false	false	false	0.099
false	true	false	false	true	0.017
false	true	false	true	false	0.025
false	true	false	true	true	0.008
false	true	true	false	false	0.066
false	true	true	false	true	0.011
false	true	true	true	false	0.017
false	true	true	true	true	0.006
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

max Wert in P



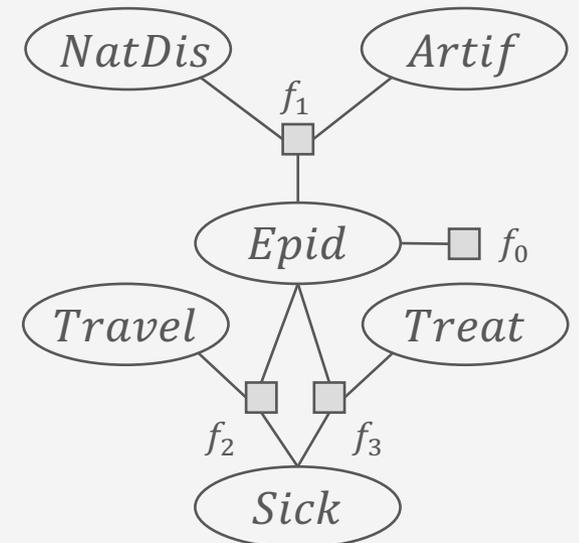
arg max Zuweisung
zum max Wert

Obere Hälfte der verbliebenen
Verteilung nach Absorption
von *sick*
(Untere Hälfte noch sehr viel
kleinere Werte)

Kombinatorische Explosion!

- Gleicher Aufwand wie bei
Wahrscheinlichkeitsanfragen: $O(r^n)$
- Ignoriert Wissen über Faktorisierung

Können wir nicht für MPE das gleiche machen,
wie wir es für Wahrscheinlichkeitsanfragen in
VE gemacht haben?



Maximierung und Summierung

Verhalten von Maximierung zu Summierung ähnlich:

- Kommutativ

- Summierung:

$$\sum_{s \in \text{Val}(S)} \sum_{r \in \text{Val}(R)} \phi(r, s, t) = \sum_{r \in \text{Val}(R)} \sum_{s \in \text{Val}(S)} \phi(r, s, t)$$

- Maximierung:

$$\max_{s \in \text{Val}(S)} \max_{r \in \text{Val}(R)} \phi(r, s, t) = \max_{r \in \text{Val}(R)} \max_{s \in \text{Val}(S)} \phi(r, s, t)$$

- Beispiel: $S = \text{NatDis}, R = \text{Artif}, t = \{\text{Epid}\}$

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1

Diagram showing summation of values for each *Artif* value:

- For *Artif* = false: 12 + 2 + 3 + 1 = 18
- For *Artif* = true: 7 + 4 + 5 + 1 = 17

Exakte Inferenz

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1

Diagram showing maximization of values for each *Artif* value:

- For *Artif* = false: max(12, 2, 3, 1) = 12
- For *Artif* = true: max(7, 4, 5, 1) = 7

Maximierung und Summierung

Verhalten von Maximierung zu Summierung ähnlich:

- „Ausklammern“ möglich ($\mathbf{r} \cap \mathbf{s} = \emptyset$)

- Summierung:

$$\sum_{\mathbf{r} \in \text{Val}(\mathbf{R})} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi'(\mathbf{s}) = \phi'(\mathbf{s}) \sum_{\mathbf{r} \in \text{Val}(\mathbf{R})} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$$

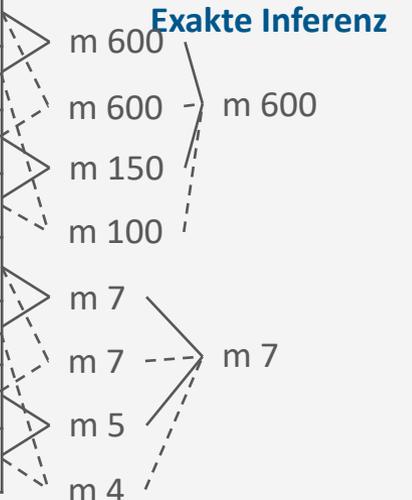
- Maximierung:

$$\max_{\mathbf{r} \in \text{Val}(\mathbf{R})} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi'(\mathbf{s}) = \phi'(\mathbf{s}) \max_{\mathbf{r} \in \text{Val}(\mathbf{R})} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{s})$$

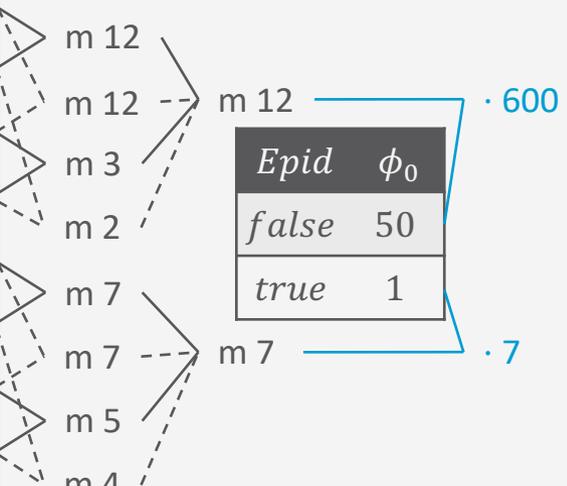
- Beispiel: $\mathbf{r} = \{\text{NatDis}, \text{Artif}\}, \mathbf{s} = \{\text{Epid}\}$

Beides für effiziente Inferenz im Stile von VE nutzen

Epid	NatDis	Artif	$\phi_1 \phi_0$
false	false	false	$12 \cdot 50 = 600$
false	false	true	$2 \cdot 50 = 100$
false	true	false	$3 \cdot 50 = 150$
false	true	true	$1 \cdot 50 = 50$
true	false	false	$7 \cdot 1 = 7$
true	false	true	$4 \cdot 1 = 4$
true	true	false	$5 \cdot 1 = 5$
true	true	true	$1 \cdot 1 = 1$



Epid	NatDis	Artif	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1



VE für MPE Anfragen: Beispiel

$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} P_R(E = e, N = n, A = a, sick, Tl = tl, Tt = tt)$$

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} \frac{1}{Z} \prod_{i=0}^3 \phi_i(R_i = r_i)$$

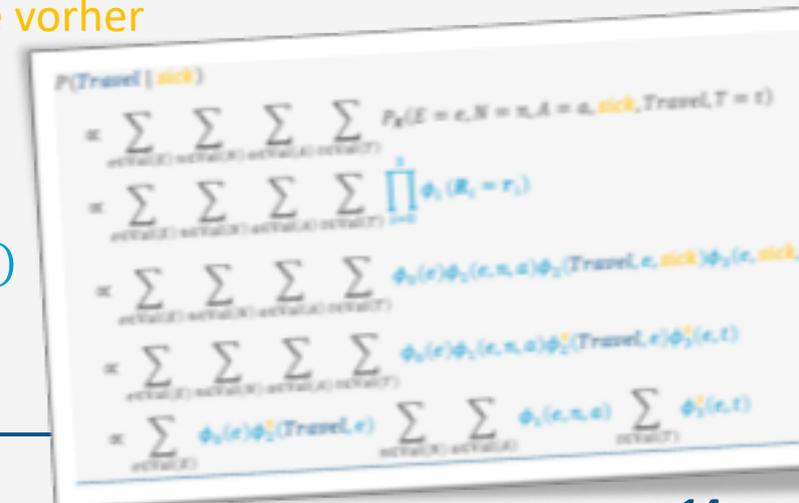
Lineare Transformation \rightarrow weglassen

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2(tl, e, sick) \phi_3(e, sick, tt)$$

Absorption wie vorher

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2^S(tl, e) \phi_3^S(e, tt)$$

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a) \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \phi_2^S(tl, e) \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} \phi_3^S(e, tt)$$



Handwritten derivation showing the simplification of the MPE query:

$$\begin{aligned}
 P(\text{Travel} | sick) &= \sum_{e \in \text{Val}(E)} \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \sum_{tl \in \text{Val}(Tl)} \sum_{tt \in \text{Val}(Tt)} P_R(E=e, N=n, A=a, sick, \text{Travel}, T=tl) \\
 &= \sum_{e \in \text{Val}(E)} \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \sum_{tl \in \text{Val}(Tl)} \prod_{i=0}^3 \phi_i(R_i = r_i) \\
 &= \sum_{e \in \text{Val}(E)} \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \sum_{tl \in \text{Val}(Tl)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2(\text{Travel}, e, sick) \phi_3(e, sick, tt) \\
 &= \sum_{e \in \text{Val}(E)} \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \sum_{tl \in \text{Val}(Tl)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2^S(\text{Travel}, e) \phi_3^S(e, tt) \\
 &= \sum_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \phi_2^S(\text{Travel}, e) \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a) \sum_{tt \in \text{Val}(Tt)} \phi_3^S(e, tt)
 \end{aligned}$$

VE für MPE Anfragen: Beispiel

$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e \in Val(E)} \arg \max_{n \in Val(N)} \arg \max_{a \in Val(A)} \arg \max_{tl \in Val(Tl)} \arg \max_{tt \in Val(Tt)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2(tl, e, sick) \phi_3(e, sick,$$

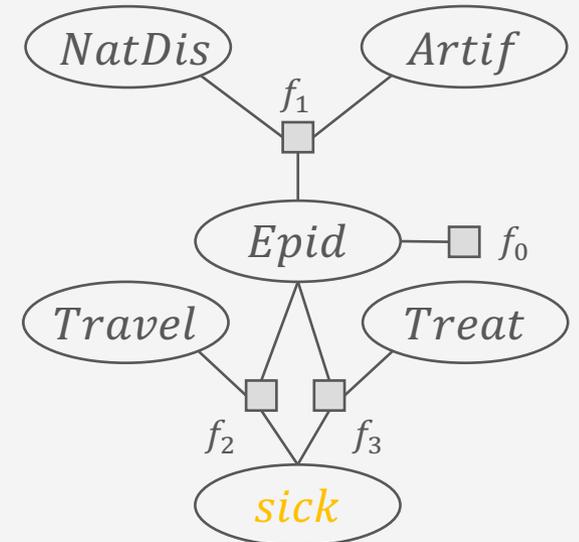
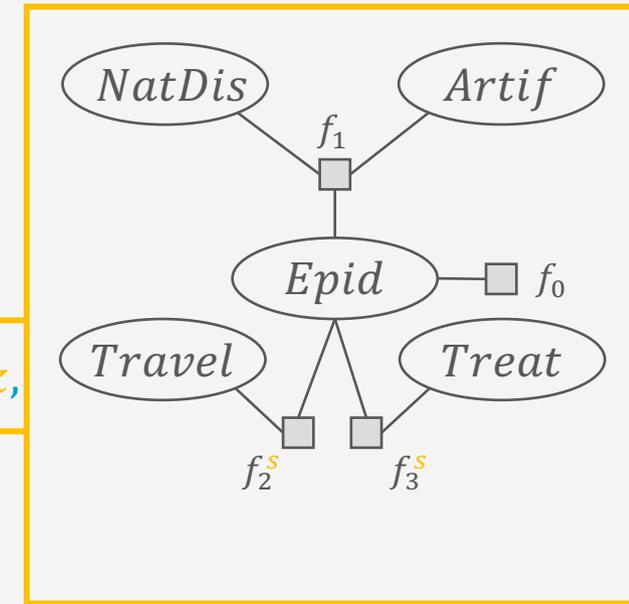
- Absorbieren von *sick* in f_2, f_3 wie vorher

Epid	Sick	Treat	ϕ_3
false	false	false	5
false	false	true	1
false	true	false	3
false	true	true	2
true	false	false	5
true	false	true	4
true	true	false	1
true	true	true	7

Epid	Treat	ϕ_3^S
false	false	3
false	true	2
true	false	1
true	true	7

Travel	Epid	Sick	ϕ_2
false	false	false	20
false	false	true	24
false	true	false	5
false	true	true	6
true	false	false	28
true	false	true	8
true	true	false	7
true	true	true	2

Travel	Epid	ϕ_2^S
false	false	24
false	true	6
true	false	8
true	true	2



VE für MPE Anfragen: Beispiel

$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e \in Val(E)} \phi_0(e) \arg \max_{n \in Val(N)} \arg \max_{a \in Val(A)} \phi_1(e, n, a) \arg \max_{tl \in Val(Tl)} \phi_2^S(tl, e) \arg \max_{tt \in Val(Tt)} \phi_3^S(e, tt)$$

$$= \arg \max_{e \in Val(E)} \phi_0(e) \phi_3^{S'}(e) \arg \max_{n \in Val(N)} \arg \max_{a \in Val(A)} \phi_1(e, n, a) \arg \max_{tl \in Val(Tl)} \phi_2^S(tl, e)$$

- *Treat* ausmaximieren:

- Wähle die argmax Zuweisung von *Treat* für jede mögliche Welt von *Epid*

- *Epid* = *false*

- Maximaler Wert: 3
- Zuweisung merken: *Treat* = *false*

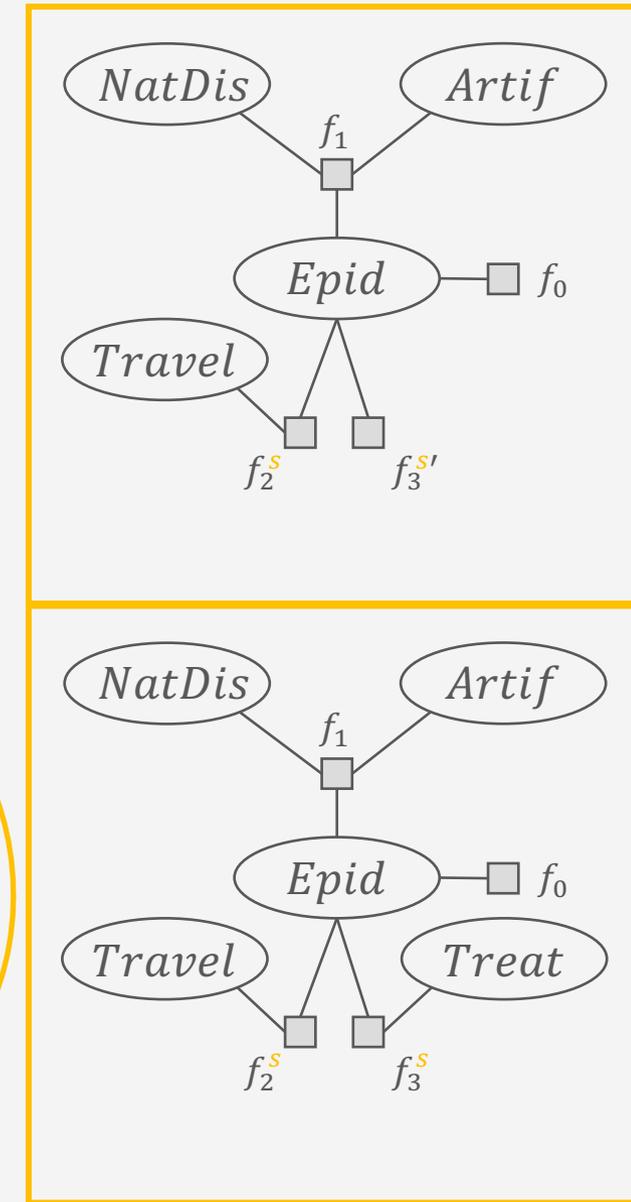
- *Epid* = *true*

- Maximaler Wert: 7
- Zuweisung merken: *Treat* = *true*

- Verbleibender Faktor: $f_3^{S'} = \phi_3^{S'}(Epid)$

<i>Epid</i>	<i>Treat</i>	ϕ_3^S
false	false	3
false	true	2
true	false	1
true	true	7

<i>Epid</i>	$\phi_3^{S'}$
false	3
true	7



VE für MPE Anfragen: Beispiel

MPE(*sick*)

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \phi_3^S(e) \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a) \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \phi_2^{S'}(tl, e)$$

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \phi_3^{S'}(e) \phi_2^{S'}(e) \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a)$$

- *Travel* ausmaximieren:

- Wähle die argmax Zuweisung von *Travel* für jede mögliche Welt von *Epid*

- *Epid* = *false*

- Maximaler Wert: 24
- Zuweisung merken: *Travel* = *false*

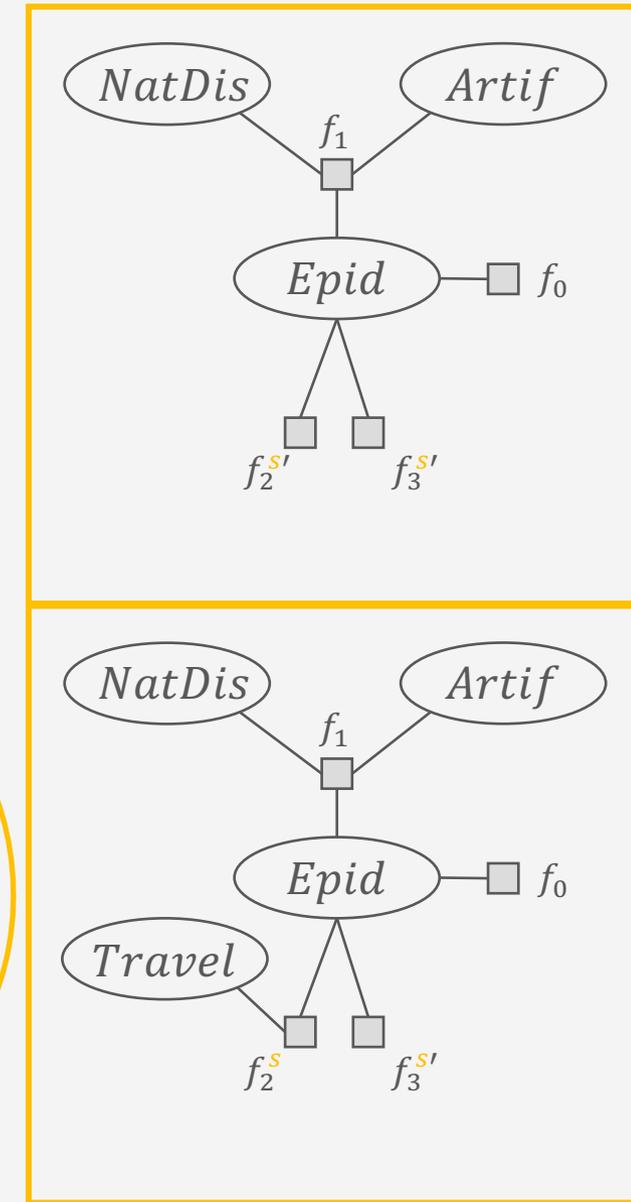
- *Epid* = *true*

- Maximaler Wert: 6
- Zuweisung merken: *Travel* = *false*

- Verbleibender Faktor: $f_2^{S'} = \phi_2^{S'}(\text{Epid})$

<i>Epid</i>	<i>Travel</i>	ϕ_2^S
false	false	24
false	true	8
true	false	6
true	true	2

<i>Epid</i>	$\phi_2^{S'}$
false	24
true	6



VE für MPE Anfragen: Beispiel

MPE(*sick*)

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \phi_3^{S'}(e) \phi_2^{S'}(e) \arg \max_{n \in \text{Val}(N)} \arg \max_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a)$$

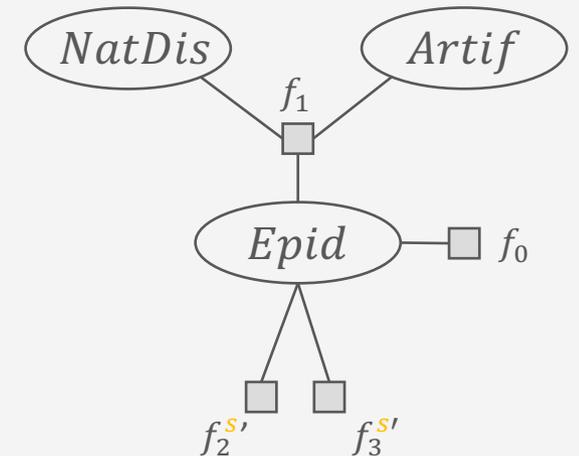
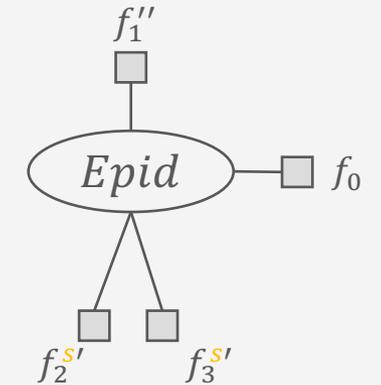
$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \phi_3^{S'}(e) \phi_2^{S'}(e) \phi_1''(e)$$

- *Artif*, *NatDis* (in zwei Schritten) ausmaximieren:
 - Wähle die argmax Zuweisung von *Artif*, *NatDis* nacheinander; es bleibt für jede mögliche Welt von *Epid*
 - *Epid* = *false*
 - Maximaler Wert: 12
 - Zuweisungen merken: *Artif* = *false*, *NatDis* = *false*
 - *Epid* = *true*
 - Maximaler Wert: 7
 - Zuweisungen merken: *Artif* = *false*, *NatDis* = *false*
 - Verbleibender Faktor: $f_1'' = \phi_1''(\text{Epid})$

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	12
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>true</i>	2
<i>false</i>	<i>true</i>	<i>false</i>	3
<i>false</i>	<i>true</i>	<i>true</i>	1
<i>true</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	7
<i>true</i>	<i>false</i>	<i>true</i>	4
<i>true</i>	<i>true</i>	<i>false</i>	5
<i>true</i>	<i>true</i>	<i>true</i>	1

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	ϕ_1'
<i>false</i>	<i>false</i>	12
<i>false</i>	<i>true</i>	3
<i>true</i>	<i>false</i>	7
<i>true</i>	<i>true</i>	5

<i>Epid</i>	ϕ_1''
<i>false</i>	12
<i>true</i>	7



VE für MPE Anfragen: Beispiel

$MPE(sick)$

$$= \arg \max_{e \in Val(E)} \phi_0(e) \phi_3^{S'}(e) \phi_2^{S'}(e) \phi_1''(e)$$

$$= \arg \max_{e \in Val(E)} \phi(e)$$

$$= \phi'()$$

- Faktormultiplikation
 - Wie vorher
- *Epid* ausmaximieren:
 - Wähle die argmax Zuweisung von *Epid*
 - Maximaler Wert: 43200
 - Zuweisung merken: *Epid* = *false*
 - Verbleibender Faktor: $f' = \phi'()$

<i>Epid</i>	ϕ_0	<i>Epid</i>	$\phi_3^{S'}$	<i>Epid</i>	$\phi_2^{S'}$	<i>Epid</i>	ϕ_1''
false	50	false	3	false	24	false	12
true	1	true	7	true	6	true	7

<i>Epid</i>	ϕ
false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$
true	$1 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 7 = 294$

ϕ'
43200

f'



f



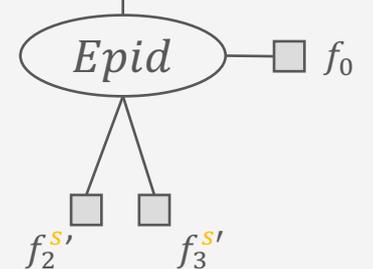
Epid

f_1''



Epid f_0

$f_2^{S'}$ $f_3^{S'}$



Zuweisungen der Zufallsvariablen merken

- Im Faktor mitführen, bei Multiplikation vereinigen

Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	$\phi_0 \cdot \phi_1'' \cdot \phi_2^{S'} \cdot \phi_3^{S'} = \phi$
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$
true	true	true	false	false	$1 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 7 = 294$

Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	ϕ'
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$



Epid	Travel	Treat	Artif	NatDis	P
false	false	false	false	false	0.298
false	false	false	false	true	0.050
false	false	false	true	false	0.074
false	false	false	true	true	0.025

max Wert in P
arg max Zuweisung zum max Wert

Epid	Treat	ϕ_3^S
false	false	3
false	true	2
true	false	1
true	true	7

Epid	Travel	ϕ_2^S
false	false	24
false	true	8
true	false	6
true	true	2

Epid	NatDis	Artif	ϕ_1'
false	false	false	12
false	true	false	3
true	false	false	7
true	true	false	5

Epid	ϕ_0
false	50
true	1

Epid	Treat	$\phi_3^{S'}$
false	false	3
true	true	7

Epid	Travel	$\phi_2^{S'}$
false	false	24
true	false	6

Epid	NatDis	Artif	ϕ_1''
false	false	false	12
true	false	false	7

ϕ

Epid	NatDis	Artif	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1

Zuweisungen der Zufallsvariablen merken

- Im Faktor mitführen, bei Multiplikation vereinigen

Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	$\phi_0 \cdot \phi_1'' \cdot \phi_2^{S'} \cdot \phi_3^{S'} = \phi$
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$
true	true	true	false	false	$1 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 7 = 293$

Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	ϕ
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$



Epid	Travel	Treat	Artif	NatDis	P
false	false	false	false	false	0.298
false	false	false	false	true	0.050
false	false	false	true	false	0.074
false	false	false	true	true	0.025

- MPE Zuweisungen $MPE_F(\mathbf{e})$ stehen am Ende der Inferenz direkt im Faktor
 - Zuweisungen, die man nicht mehr braucht, weil eine andere Zuweisung $\arg \max$ ist, werden fallengelassen
- Aber: Faktorgröße bleibt abhängig von allen Zufallsvariablen $rv(F) \setminus rv(\mathbf{e})$
 - Immerhin nur noch *linear* in der Anzahl der ausmaximierten Variablen
 - Exponentiell in der Anzahl der noch auszumaximierenden Variablen
 - Aufwand nimmt also im Laufe der Zeit ab

VE für MPE Anfragen

- MPE: Zwei Aufgaben in einem:
Maximierung durchführen ($\arg \max$) und Zuweisung bzw. Zustand speichern ($\arg \max$)
- $\arg \max$: In VE, ersetze Aussummierung mit Ausmaximierung
 - Rest bleibt gleich (inklusive Suche nach Eliminierungsreihenfolge bzw. Heuristik)
 - In VE Operatormenge, ersetze Operator sum–out mit Operator max–out
 - Gleiche Eingaben
 - Gleiche Vorbedingungen
 - Äquivalente Nachbedingung
 - Vergleichbare Spezifizierung der Ausgabe
- $\arg \max$: Erweiterte Faktordefinition um Zuweisungen zu merken
 - Anpassung der Operatoren an die erweiterte Faktordefinition

Zuweisungen der Zufallsvariablen merken

- Erweiterter Faktor $f := \phi(\mathbf{R})$
 - Potentialfunktion $\phi : \text{Val}(\mathbf{R}) \rightarrow (\mathbf{U}, \mathbb{R}^{0,+})$
 - $\text{rv}(f) = \mathbf{R}$, $\text{mrv}(f) = \mathbf{U}$
 - Abbildung von der Domäne von \mathbf{R} in die Menge der positiven reellen Zahlen und die Domäne von \mathbf{U}
 - Im Rahmen von VE
 - \mathbf{R} : Variablen, die noch zu eliminieren sind
 - \mathbf{U} : Variablen, die schon eliminiert wurden
 - Zur einfacheren Referenzierung der Elemente des abgebildeten Tupels: bei Abbildung $\mathbf{r} \mapsto (\mathbf{u}, x)$:
 - $\phi^A(\mathbf{r})$ gibt Zuweisung (Assignment) \mathbf{u} zurück
 - $\phi^P(\mathbf{r})$ gibt Potential x zurück
 - Beispiel: $\mathbf{R} = \{\text{Epid}\}$, $\mathbf{U} = \{\text{Travel}\}$
 - $\text{rv}(f) = \{\text{Epid}\}$
 - $\text{mrv}(f) = \{\text{Travel}\}$

<i>Epid</i>	<i>Travel</i>	ϕ
<i>false</i>	<i>false</i>	24
<i>true</i>	<i>false</i>	6

$$\phi^A(\neg \text{epid}) = \text{false}$$

$$\phi^P(\neg \text{epid}) = 24$$

$$\phi^A(\text{epid}) = \text{false}$$

$$\phi^P(\text{epid}) = 6$$

Zuweisungen der Zufallsvariablen merken

- Operatordefinitionen anpassen
 - ABSORB: Unberührt von den Änderungen
 - In VE, $U = \emptyset$, wenn ABSORB genutzt wird
 - MULTIPLY: Änderungen nötig
 - f_1, f_2 bilden auf U_1, U_2 ab \rightarrow Ausgabefaktor erweitern um Vereinigung von U_1, U_2
 - U_1, U_2 dürfen keine Variablen teilen \rightarrow neue Vorbedingung
 - Ansonsten wäre es möglich, dass f_1, f_2 einer Variable $U, U \in U_1 \wedge U \in U_2$ zwei unterschiedliche Werte zuweisen: $\phi_1(\mathbf{r}_1) = (x, u), \phi_2(\mathbf{r}_2) = (y, u'), u \neq u'$
 - In VE, U_1, U_2 schon ausmaximiert unter Vorbedingung, dass U_1, U_2 jeweils nur in einem Faktor vorkamen (Vorläufer von f_1 , respektive f_2)
 $\rightarrow U_1 \cap U_2 = \emptyset$ und Vorbedingung im Rahmen von VE erfüllt
- SUM-OUT: Für MPE nicht genutzt

Epid	Travel	ϕ_1
false	false	24
true	false	6

Epid	Travel	ϕ_2
false	true	4
true	false	13



Multiplikation von Faktoren: Formale Definition

- Operator: MULTIPLY
 - Inputs:
 - Faktor $f_1 = \phi_1(R_1, \dots, R_n) \in F$ mit Zufallsvariablen \mathbf{U}_1 in der Zielmenge
 - Faktor $f_2 = \phi_2(S_1, \dots, S_m) \in F$ mit Zufallsvariablen \mathbf{U}_2 in der Zielmenge
 - Vorbedingung: $\mathbf{U}_1 \cap \mathbf{U}_2 = \emptyset$
 - Output: Faktor $\phi(T_1, \dots, T_k)$
 - $\{(T_1, \dots, T_k)\} = \{(R_1, \dots, R_n)\} \bowtie \{(S_1, \dots, S_m)\}$ (geordnete Vereinigung)
 - Für alle möglichen Werte t_1, \dots, t_k von T_1, \dots, T_k , i.e., $t_1, \dots, t_k \in \text{Val}(T_1, \dots, T_k)$, mit
 - $r_1, \dots, r_n = \pi_{R_1, \dots, R_n}(t_1, \dots, t_k)$, $s_1, \dots, s_m = \pi_{S_1, \dots, S_m}(t_1, \dots, t_k)$ (Auswahl passend der Argumente)

$$\phi(t_1, \dots, t_k) = \left(\phi_1^A(r_1, \dots, r_n) \cup \phi_2^A(s_1, \dots, s_m), \phi_1^P(r_1, \dots, r_n) \cdot \phi_2^P(s_1, \dots, s_m) \right)$$

- Nachbedingung: $F \sim F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \text{MULTIPLY}(f_1, f_2)$

Ausmaximieren von Zufallsvariablen: Formale Definition

- Operator: **MAX-OUT**
 - Inputs:
 - Faktor $f = \phi(R_1, \dots, R_n) \in F$
 - Variable $R \in \{R_1, \dots, R_n\}$ an Position i zum Ausmaximieren
 - Vorbedingung: $\forall f' \in F \setminus \{f\}: R \notin \text{rv}(f')$
 - Output: Faktor $\phi'(R_1, \dots, R_{i-1}, R_{i+1}, \dots, R_n)$
 - Für alle möglichen Werte $r_1, \dots, r_{i-1}, r_{i+1}, \dots, r_n$ von $R_1, \dots, R_{i-1}, R_{i+1}, \dots, R_n$
 - i.e., $r_1, \dots, r_{i-1}, r_{i+1}, \dots, r_n \in \text{Val}(R_1, \dots, R_{i-1}, R_{i+1}, \dots, R_n)$
 - mit $r^* = \arg \max_{r \in \text{Val}(R)} \phi^P(r_1, \dots, r_{i-1}, r, r_{i+1}, \dots, r_n)$

$$\phi'(r_1, \dots, r_{i-1}, r_{i+1}, \dots, r_n) = (\phi^A(r_1, \dots, r_{i-1}, r^*, r_{i+1}, \dots, r_n) \cup r^*, \phi^P(r_1, \dots, r_{i-1}, r^*, r_{i+1}, \dots, r_n))$$

- Nachbedingung: $\max_{r \in \text{Val}(R)} P_F \equiv P_{F \setminus \{f\} \cup \text{MAX-OUT}(f, R)}$

VE Algorithmus für MPE-Anfragen mit Eliminationsreihenfolge

MPE-VE($F, \{\phi_t(T_t)\}_{t=1}^m, \mathcal{U}$)

for $t = 1, \dots, m$ **do**

Evidenz behandeln

while $\exists f \in F : T_t \in \text{rv}(f)$ **do**

▸ Absorbieren $\phi_t(T_t)$ in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{ABSORB}(f, T, \phi_t(T))\}$

for $i = 1, \dots, \text{len}(\mathcal{U})$ **do**

Nichtanfrage-Variablen eliminieren

while $\exists f_1, f_2 \in F : U_i \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

▸ Maximiere U_i aus F aus

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{MAX-OUT}(f, U_i)\}$

while $\exists f_1, f_2 \in F$ **do**

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F , bis $|F| = 1$

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

Kombinieren

return f

MPE-VE

MPE-VE Algorithmus mit Online-Heuristik h

MPE-VE($F, \{\phi_t(T_t)\}_{t=1}^m, h$)

for $t = 1, \dots, m$ **do**

Evidenz behandeln

while $\exists f \in F : T_t \in \text{rv}(f)$ **do**

 ▸ Absorbieren $\phi_t(T_t)$ in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{ABSORB}(f, T, \phi_t(T))\}$

while $\text{rv}(F) \neq \emptyset$ **do**

Nichtanfrage-Variablen eliminieren

$U \leftarrow \arg \min_R h(F)$

 ▸ Wähle nächstes U zur Eliminierung

while $\exists f_1, f_2 \in F : U \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

 ▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{MAX-OUT}(f, U)\}$

 ▸ Maximiere U aus F aus

while $\exists f_1, f_2 \in F$ **do**

 ▸ Multipliziere f_1, f_2 in F , bis $|F| = 1$

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

Kombinieren

return f

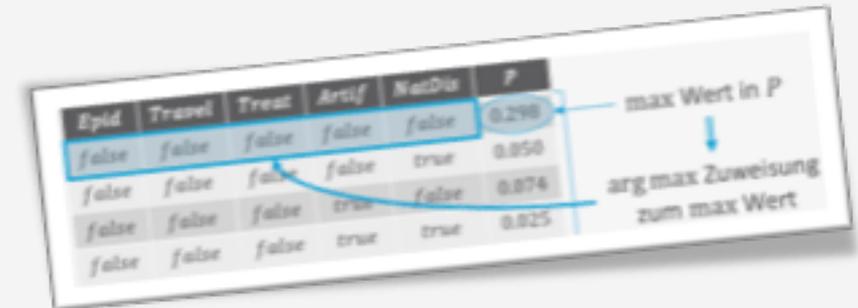
MPE-VE

Normalisierung und MPE

- Bei Faktorgraphen steht am Ende ein Potential im leeren Faktor, $\phi^P() = x$
- Im Beispiel:

<i>Epid</i>	<i>Treat</i>	<i>Travel</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$

- Um die **MPE Wahrscheinlichkeit** zum MPE zu erhalten, müsste man x normalisieren
- Dafür Berechnung der **Normalisierungskonstante notwendig** → eigener VE-Aufruf dafür
- Je nach Definition vom MPE:
 - $\arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v | e)$: $P(e)$ berechnen
 - $\arg \max_{v \in \text{Val}(V)} P(v, e)$: $P()$ berechnen
 - Beispiel: $P(e) = 145088$
 - MPE Wahrscheinlichkeit: $P(v | e) = \frac{43200}{145088} = 0.298$

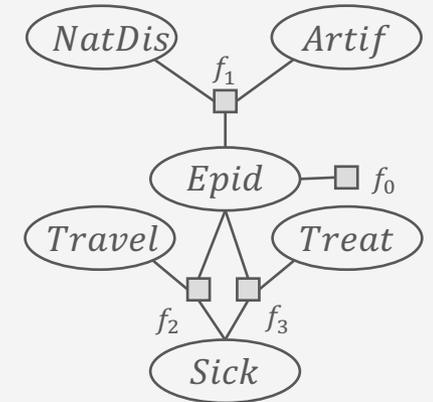


<i>Epid</i>	<i>Travel</i>	<i>Treat</i>	<i>Artif</i>	<i>NatDis</i>	P
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	0.298
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>true</i>	0.050
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>true</i>	<i>false</i>	0.074
<i>false</i>	<i>false</i>	<i>false</i>	<i>true</i>	<i>true</i>	0.025

max Wert in P
↓
arg max Zuweisung zum max Wert

JT für MPE Anfragen

- Dtrees für MPE Anfragen sind gleich den Dtrees für Wahrscheinlichkeitsanfragen → Jtree unabhängig vom Anfragetyp
- Evidenzbehandlung in VE unverändert
- Damit Schritte 1 + 2 wie vorher:
 - Jtree z.B. mittels Dtrees bauen
 - Evidenz eingeben
- Beispiel: Modell F wie abgebildet, Evidenz *sick*
 - Jtree für F bauen
 - Evidenz *sick* behandeln



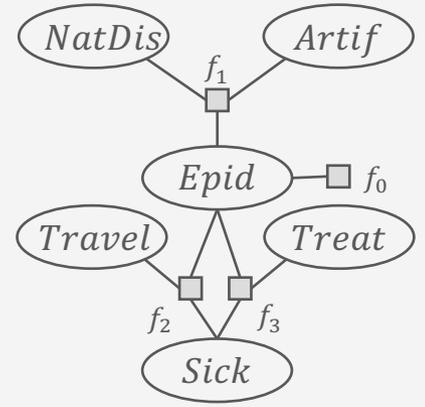
Evidenz: *sick*



JT für MPE Anfragen

- Nachrichtenversand
 - Nur **eine** Phase (von der Peripherie zum Zentrum)
 - Nur gegeben **Bedingung 1** Nachrichten versenden:
Wenn Cluster C_i alle Nachrichten bis auf die von Nachbar C_j erhalten hat, sendet C_i die Nachricht m_{ij} an C_j .

Sieht jetzt schon jemand, warum nur eine Phase?



Evidenz: sick

- Berechnung der Nachrichten mittels **MPE-VE**
 - Aber: Cluster nicht vollständig ausmaximieren, sondern nur bis runter auf S_{ij} , und keine Kombination am Ende

$$m_{ij} = \text{MPE-VE-JT} \left(F_i \cup \bigcup_{C_k \in \text{Nb}(C_i), k \neq j} m_{ki}, S_{ij}, h \right)$$



- S_{ij} als Eingabe nötig (nicht \emptyset wie sonst beim MPE)

MPE-VE für Nachrichtenversand in JT: Mit Separator als Eingabe, ohne Evidenz, ohne Kombination

MPE-VE-JT(F, S, h)

while $rv(F) \setminus S \neq \emptyset$ **do**

$U \leftarrow \arg \min_R h(F)$

while $\exists f_1, f_2 \in F : U \in rv(f_1) \wedge rv(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{MAX-OUT}(f, U)\}$

return F

Nichtseparator-Variablen eliminieren

▸ Wähle nächstes U zur Eliminierung

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

▸ Summiere U aus F aus

JT für MPE-Anfragen: Beispiel (Forts.)

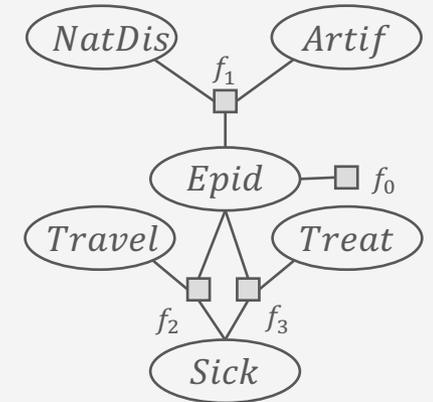
- Nachrichten senden
 - C_1 : Bedingung 1 gilt mit Nachbar C_2
 - Berechnung: $m_{12} = \text{MPE-VE-JT}(\{f_0, f_1\}, \{Epid\}, .)$
 - $m_{12} = \{\phi_0(Epid), \phi_1''(Epid)\}$

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1
false	false	false	12
false	false	true	2
false	true	false	3
false	true	true	1
true	false	false	7
true	false	true	4
true	true	false	5
true	true	true	1

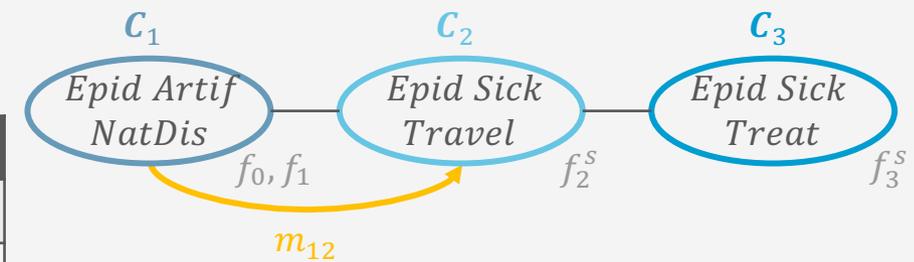
<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1'
false	false	false	12
false	true	false	3
true	false	false	7
true	true	false	5

<i>Epid</i>	ϕ_0
false	50
true	1

<i>Epid</i>	<i>NatDis</i>	<i>Artif</i>	ϕ_1''
false	false	false	12
true	false	false	7



Evidenz: *sick*

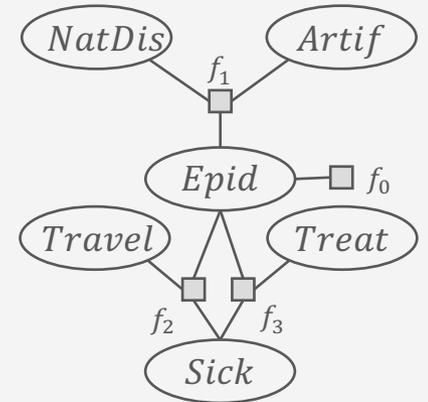


JT für MPE-Anfragen: Beispiel (Forts.)

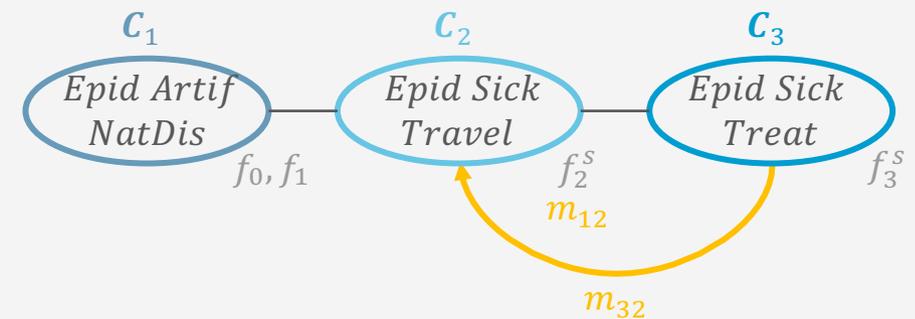
- Nachrichten senden
 - \mathcal{C}_1 : Bedingung 1 gilt mit Nachbar \mathcal{C}_2
 - Berechnung: $m_{12} = \text{MPE-VE-JT}(\{f_0, f_1\}, \{Epid\}, .)$
 - $m_{12} = \{\phi_0(Epid), \phi_1''(Epid)\}$
 - \mathcal{C}_3 : Bedingung 1 gilt mit Nachbar \mathcal{C}_2
 - Berechnung: $m_{32} = \text{MPE-VE-JT}(\{f_3^S\}, \{Epid\}, .)$
 - $m_{32} = \{\phi_3^S(Epid)\}$

<i>Epid</i>	<i>Treat</i>	ϕ_3^S
false	false	3
false	true	2
true	false	1
true	true	7

<i>Epid</i>	<i>Treat</i>	$\phi_3^{S'}$
false	false	3
true	true	7



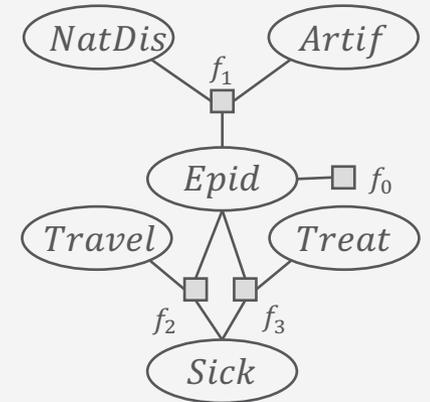
Evidenz: *sick*



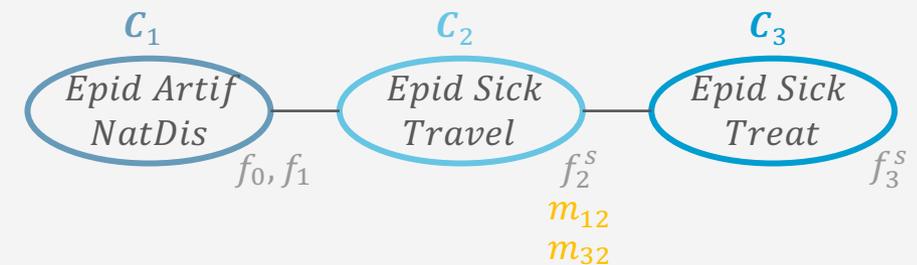
JT für MPE-Anfragen

- Anfrage in Schritt 4: MPE fertig berechnen
 - Maximiere die verbleibenden Variablen an dem Knoten aus, bei dem **Bedingung 2** des Nachrichtenversands zuerst getriggert wird:
 - Wenn Cluster C_i die letzte fehlende Nachricht von Nachbar C_j erhält, sendet C_i Nachrichten m_{ik} an alle anderen Nachbarn C_k
 - Anschließend MPE ausgeben
 - Aufruf an MPE-VE (nicht MPE-VE-JT, da wir ja das vollständige MPE am Ende ausgeben wollen):

$$\text{MPE-VE} \left(F_i \cup \bigcup_{C_k \in \text{Nb}(C_i)} m_{ki}, \emptyset, \cdot \right)$$



Evidenz: sick



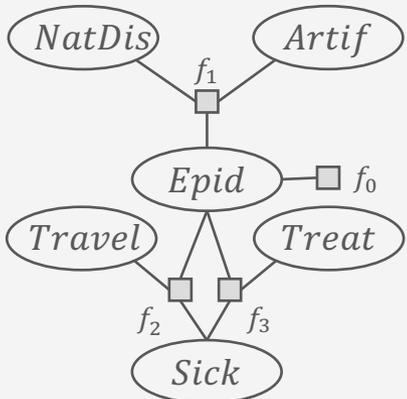
JT für MPE-Anfragen: Beispiel (Forts.)

- Anfrage in Schritt 4: MPE fertig berechnen
 - C_2 : Bedingung 2 wird getriggert \rightarrow Maximiere *Travel*, *Epid* aus F_2, m_{12}, m_{32} aus
 - Berechnung: $f = \text{MPE-VE}(\{f_2^S, f_0, f_1'', f_3^{S'}\}, \emptyset, .)$

Epid	Travel	Treat	Artif	NatDis	P
false	false	false	false	false	0.298
false	false	false	false	true	0.050
false	false	false	true	false	0.074
false	false	false	true	true	0.025

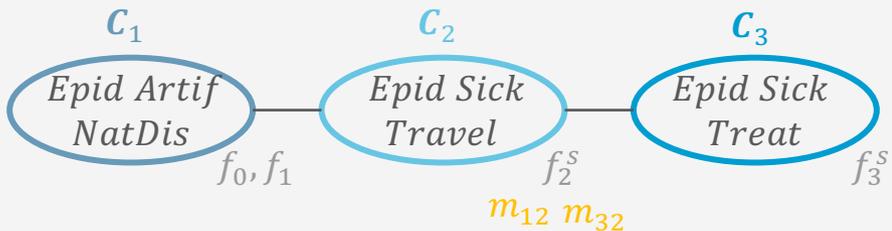
max Wert in P
 \downarrow
arg max Zuweisung zum max Wert

Epid	Travel	ϕ_2^S
false	false	24
false	true	8
true	false	6
true	true	2



Evidenz: sick

Epid	ϕ_0	Epid	NatDis	Artif	ϕ_1''	Epid	Treat	$\phi_3^{S'}$	Epid	Travel	$\phi_2^{S'}$
false	50	false	false	false	12	false	false	3	false	false	24
true	1	true	false	false	7	true	true	7	true	false	6



Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	$\phi_0 \cdot \phi_1'' \cdot \phi_2^{S'} \cdot \phi_3^{S'} = \phi$
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$
true	true	true	false	false	$1 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 7 = 294$

Epid	Treat	Travel	NatDis	Artif	ϕ
false	false	false	false	false	$50 \cdot 3 \cdot 24 \cdot 12 = 43200$

MPE-JT

- JT besteht eigentlich immer noch konzeptionell aus vier Schritten
 1. Jtree J für das Eingabemodell F bauen
 2. Evidenz e in J eingeben
 3. Nachrichten in J schicken (*message passing*)
 4. MPE-Anfragen fertig beantworten
- Schritt 1 und 2 wie vorher definiert
- Schritt 3 und 4 angepasst
 - Algorithmisch einfacher in einem Schritt aufzuschreiben

Für jedes $f_e = \phi_e(E) \in \{\phi_e(E)\}_{e \in E}$ JT Schritt 2

- Für jedes $C_i \in V$
 - Wenn $E \in C_i$, dann für jedes $f \in F_i$ mit $E \in \text{rv}(f)$
 - $F_i \leftarrow F_i \setminus \{f\} \cup \text{Absorb}(f, E, f_e)$

1. Dtree bauen

- Eliminationsreihenfolge suchen und Dtree bauen (bottom up)
- Modell mittels Heuristik partitionieren (top down) → Hinweis: *Hypergraph Partitioning*

2. Cluster im Dtree über Cutset und Kontext bestimmen

3. Nicht-minimalen Jtree als Kopie des Dtrees mit ungerichteten Kanten und Clustern als Knoten bauen, Faktoren als lokale Modelle übernehmen

4. Jtree minimieren

- Cluster, die Untermengen von benachbarten Clustern sind, vereinigen, inklusive lokalen Modellen JT Schritt 1

Algorithmische Übersicht: Schritt 3 + 4 für MPE

- Gegeben eine Heuristik h
- Während es ein Cluster C_i gibt, welches noch nicht Nachrichten an alle Nachbarn verschickt hat, i.e., $\sum_{j \in \text{Nb}(C_i)} 1 \mid m_{ij} \text{ gesendet} \leq |\text{Nb}(C_i)|$,
 - Wenn Bedingung 1 mit Nachbar C_j gilt
 - Berechne Nachricht m_{ij} : $m_{ij} \leftarrow \text{MPE-VE-JT}(F_i \cup_{C_k \in \text{Nb}(C_i)} m_{ki}, S_{ij}, h)$
 - Sende m_{ij} an C_j
 - Wenn Bedingung 2 gilt
 - Berechne MPE fertig: $f \leftarrow \text{MPE-VE}(F_i \cup_{C_k \in \text{Nb}(C_i)} m_{ki}, \emptyset, h)$
 - **Return** f (oder abspeichern)

MPE-JT Schritt 3 + 4

Letztlich rechnet MPE-JT genau das gleich wie MPE-VE, nur das durch den Jtree eine gewisse Eliminierungsreihenfolge schon vorgegeben ist, so dass der Suchraum der Eliminierungen für die Nachrichten kleiner ist.

Laufzeitkomplexität

- Dtree-Repräsentation einer MPE-VE Rechnung gleich der Dtree-Repräsentation einer VE-Rechnung
 - Innere Knoten repräsentieren immer noch Eliminierung, nur jetzt mittels Ausmaximierung
 - Worst-case Größe der Zwischenergebnisse gegeben durch Baumweite w
 - Anzahl der Eliminierungen gedeckelt durch Anzahl der Zufallsvariablen n , die gleich der Anzahl an inneren Knoten n_T im Dtree sind

→ Ergebnisse zur Laufzeitkomplexität für Wahrscheinlichkeitsanfragen mittels VE, JT gelten auch für MPE Anfragen mittels MPE-VE, MPE-JT

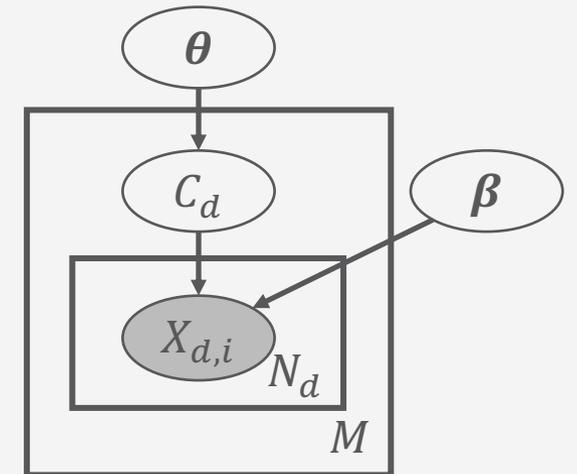
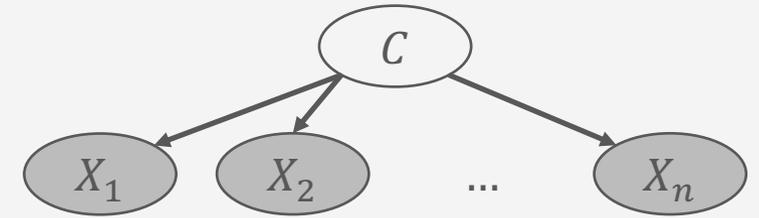
$$T^{VE} \in O(n_T \cdot r^w)$$

$$T^{JT} \in O(n_J \cdot r^w)$$

- Nur eine MPE Anfrage pro Evidenzmenge möglich, daher $m = 1$
- Nachrichtenverstand: nur eine Nachricht pro Kante → keine Auswirkung auf Komplexität

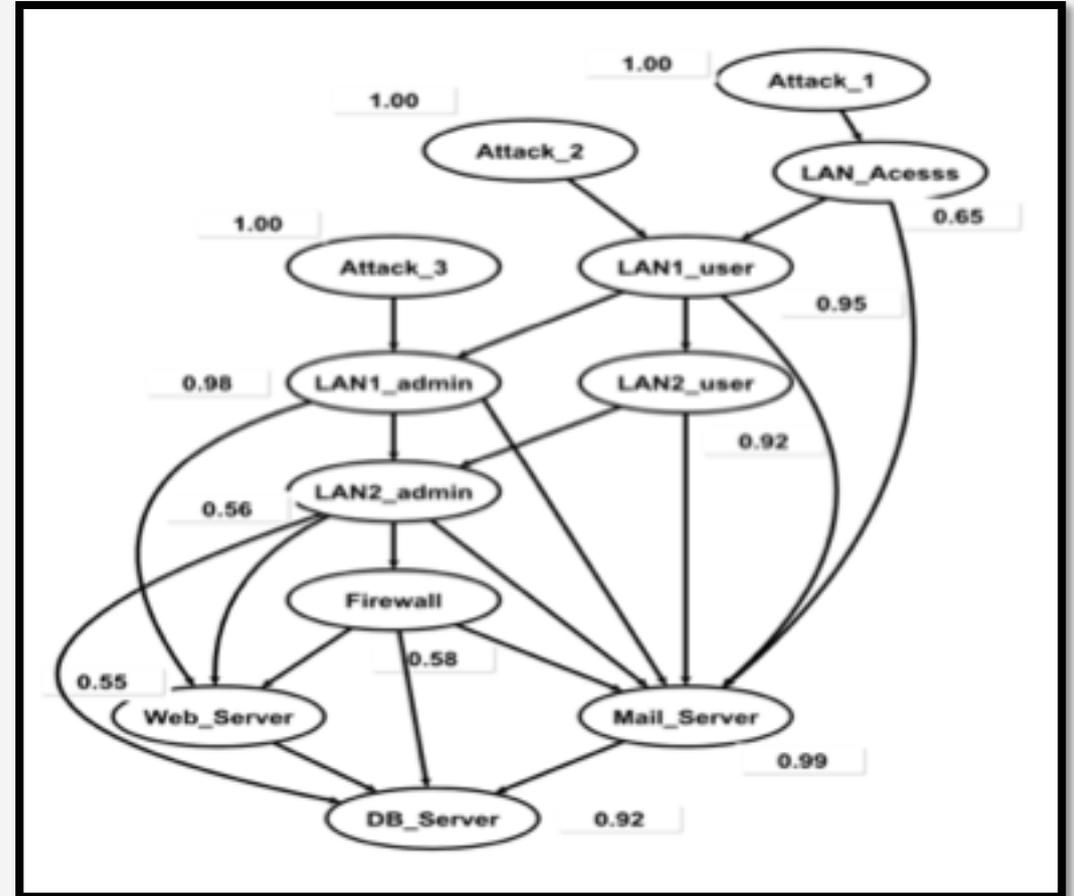
Anwendungen

- Naive Bayes Klassifizierer: $P(C | \mathbf{x})$
 - Nichts auszusummieren: $S = \{C\}, T = \text{rv}(\mathbf{x})$ und damit $U = R \setminus S \setminus T = \emptyset$
- Eigentlich will man $\arg \max_{c \in \text{Val}(C)} P(C | \mathbf{x})$ haben
 - Zustandsanfrage gegeben Evidenz:
„Was ist der wahrscheinlichste Zustand der Zufallsvariablen, der die Evidenz hervorgerufen haben könnte?“
- **Diagnosesystem**: Welche Diagnose / Krankheit hat die Symptome X_i verursacht?
- **Mixture of Unigrams**: Welches Topic hat die Worte $X_{d,i}, i \in \{1, \dots, N_d\}$ hervorgerufen?



Anwendungen

- Bayesian Attack Graphs:
Weitere Anfragemöglichkeiten
- Neben Wahrscheinlichkeitsanfragen:
 $P(A_1), P(A_2), P(A_3), P(L_{ac}), P(L_{1u}), P(L_{2u}),$
 $P(L_{1a}), P(L_{2a}), P(F), P(S_w), P(S_m), P(S_{db})$
- MPE Anfragen:
 - Evidenz: Server S_w, S_m, S_{db} kompromittiert, s
 - $MPE(s)$ um den wahrscheinlichsten Zustand des restlichen Systems zu erhalten
 - Zustand der restlichen Komponenten
 - Ursachenforschung



Zwischenzusammenfassung

- Zustandsanfrage: Most probable explanation (MPE)
 - Gegeben Evidenz, wahrscheinlichster Zustand der verbleibenden Zufallsvariablen
 - Eliminierung mittels Maximierung
- Änderungen zu bisheriger Inferenz
 - MPE-VE
 - Erweiterter Faktor um Zuweisungen zu speichern
 - MULTIPY: vereinigt zusätzlich existierende Zuweisungen (keine Überschneidung in diesen)
 - MAX-OUT: maximiert eine gegebene Variable aus einem Faktor aus (wie SUM-OUT)
 - MPE-JT
 - Schritt 3 + 4 fusionieren zu einer Nachrichten-Phase, in der Nicht-Separatoren ausmaximiert werden und am Ende am zentralen Cluster die verbliebenen Variablen ausmaximiert werden
- Keine Auswirkung auf Komplexität in Bezug auf Baumweite und Anzahl Eliminierungen

Maximum A posteriori Zuweisung (MAP)

Allgemeine Zustandsanfragen

Wahrscheinlichste Zuweisung

- *Zustandsanfrage* fragt nach der wahrscheinlichsten Zuweisung an eine Untermenge von Zufallsvariablen ohne Evidenz: Maximum a posteriori Zuweisung (**MAP**)
 - **Verallgemeinerung** von MPE
 - Formal betrachtet, gegeben ein Modell F mit der vollständigen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsverteilung P_F , Evidenz e und eine Menge von Anfragevariablen S :

$$MAP_F(\mathbf{U} \mid \mathbf{e}) = \arg \max_{\mathbf{u} \in \text{Val}(\mathbf{U})} \sum_{\mathbf{v} \in \text{Val}(\mathbf{V})} P(\mathbf{u}, \mathbf{v} \mid \mathbf{e}) = \arg \max_{\mathbf{u} \in \text{Val}(\mathbf{U})} \sum_{\mathbf{v} \in \text{Val}(\mathbf{V})} P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{e})$$

- $\mathbf{V} = \text{rv}(F) \setminus \text{rv}(\mathbf{e}) \setminus \mathbf{U}$ die verbleibenden Zufallsvariablen
- Wenn $\mathbf{U} = \text{rv}(F) \setminus \text{rv}(\mathbf{e})$, i.e., $\mathbf{V} = \emptyset$, dann $MAP_F(\mathbf{U} \mid \mathbf{e}) = MPE_F(\mathbf{e})$

Wahrscheinlichste Zuweisung

- Problem mit der MAP-Anfrage

$$MAP_F(\mathbf{U} \mid \mathbf{e}) = \arg \max_{\mathbf{u} \in Val(\mathbf{U})} \sum_{\mathbf{v} \in Val(\mathbf{V})} P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{e})$$

- Enthält Summierung und Maximierung, welche **nicht kommutativ** sind:

- Beispiel: Maximierung von R , Summierung von S in Faktor $\phi(t, s, r)$:

$$\max_{s \in Val(S)} \sum_{r \in Val(R)} \phi(t, s, r) \neq \sum_{r \in Val(R)} \max_{s \in Val(S)} \phi(t, s, r)$$

- Siehe rechts
- Verhalten zudem möglicherweise **nicht eindeutig** bei $\sum_{r \in Val(R)} \max_{s \in Val(S)} \phi(t, r, s)$ (max vor \sum)

T	S	R	ϕ_{nc}		
false	false	false	12	+ 14	Exakte Inferenz m 14, false
false	false	true	2		
false	true	false	3	+ 4	
false	true	true	1		
true	false	false	7	+ 11	m 11, false
true	false	true	4		
true	true	false	8	+ 9	
true	true	true	1		

T	S	R	ϕ_{nc}		
false	false	false	12	m 12, true	+ 14, false
false	false	true	2		
false	true	false	3	m 2, true	
false	true	true	1		
true	false	false	7	m 8, true	+ 12, true/false?
true	false	true	4		
true	true	false	8	m 4, false	
true	true	true	1		

Wahrscheinlichste Zuweisung

- Für ein korrektes Ergebnis muss man
 - ❖ zuerst V aussummieren und
 - ❖ erst dann U ausmaximieren
- Kann die Baumweite vergrößern im Vergleich zu MPE- und Wahrscheinlichkeitsanfragen
 - Grund: Eliminierungsfolge eingeschränkt durch Vorgabe, dass V vor U
 - Bedingte Unabhängigkeiten ermöglichen Verschränkungen, aber nur bis zu einem gewissen Grad

T	S	R	ϕ_{nc}		
false	false	false	12	+ 14	Exakte Inferenz m 14, false
false	false	true	2		
false	true	false	3	+ 4	
false	true	true	1		
true	false	false	7	+ 11	m 11, false
true	false	true	4		
true	true	false	8	+ 9	
true	true	true	1		

T	S	R	ϕ_{nc}		
false	false	false	12	m 12, true	+ 14, false
false	false	true	2		
false	true	false	3	m 2, true	
false	true	true	1		
true	false	false	7	m 8, true	+ 12, true/false?
true	false	true	4		
true	true	false	8	m 4, false	
true	true	true	1		

Beispiel

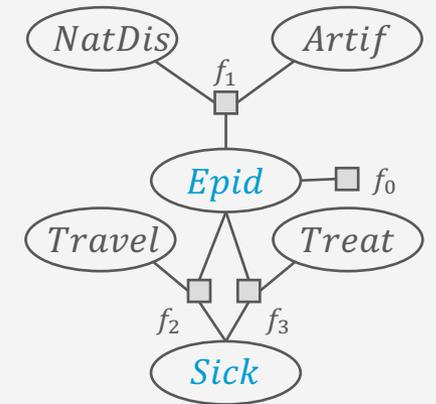
- MAP-Anfrage mit **gleicher** Baumweite

$$MAP_F(\text{Epid}, \text{Sick})$$

$$= \arg \max_{e, s \in \text{Val}(E, S)} \sum_{n, a, tl, tt \in \text{Val}(N, A, Tl, Tt)} P(e, n, a, s, tl, tt)$$

$$= \arg \max_{e, s \in \text{Val}(E, S)} \sum_{n, a, tl, tt \in \text{Val}(N, A, Tl, Tt)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, m) \phi_2(tl, e, s) \phi_3(e, s, tt)$$

$$= \arg \max_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a) \arg \max_{s \in \text{Val}(S)} \sum_{tl \in \text{Val}(Tl)} \phi_2(tl, e, s) \sum_{tt \in \text{Val}(Tt)} \phi_3(e, s, tt)$$



Beispiel

- MAP-Anfrage mit **vergrößerter** Baumweite

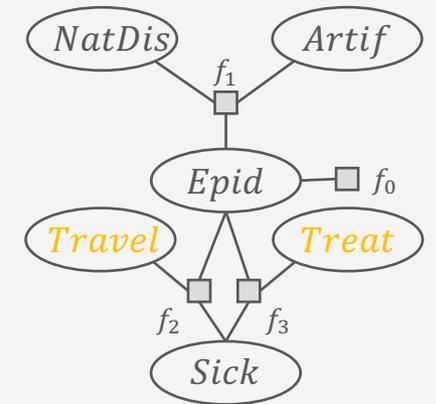


$$MAP_F(\textit{Travel}, \textit{Treat})$$

$$= \arg \max_{tl, tt \in \text{Val}(Tl, Tt)} \sum_{e, s, n, a \in \text{Val}(E, S, N, A)} P(e, n, a, s, tl, tt)$$

$$= \arg \max_{tl, tt \in \text{Val}(Tl, Tt)} \sum_{e, s, n, a \in \text{Val}(E, S, N, A)} \phi_0(e) \phi_1(e, n, a) \phi_2(tl, e, s) \phi_3(e, s, tt)$$

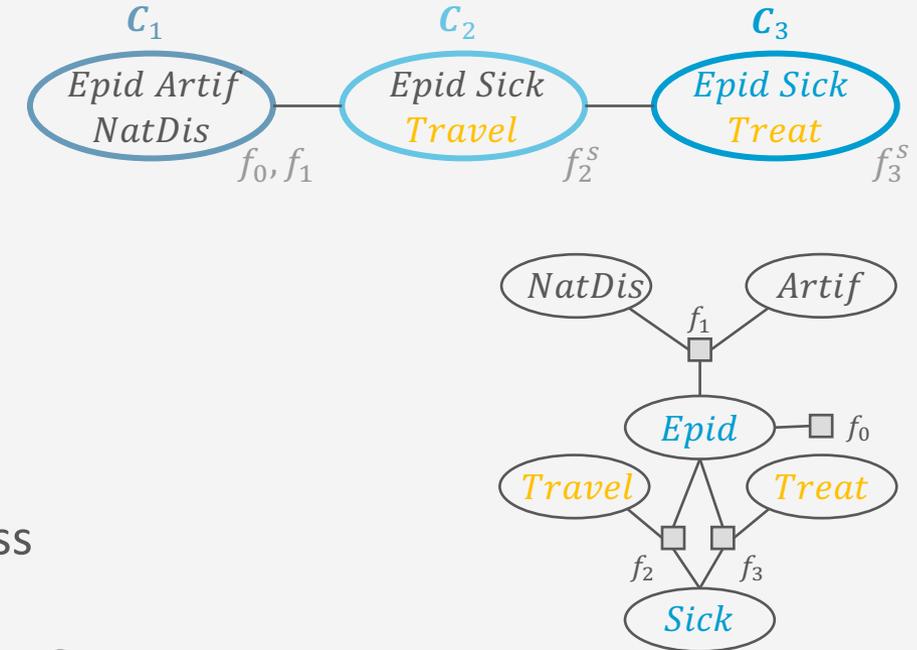
$$= \arg \max_{tl \in \text{Val}(Tl)} \arg \max_{tt \in \text{Val}(Tt)} \sum_{e \in \text{Val}(E)} \phi_0(e) \sum_{n \in \text{Val}(N)} \sum_{a \in \text{Val}(A)} \phi_1(e, n, a) \sum_{s \in \text{Val}(S)} \phi_2(tl, e, s) \phi_3(e, s, tt)$$



Beschränkte MAP-Anfragen

- **Beschränkte** MAP-Anfragen $MAP_F(\mathbf{U} \mid \mathbf{e})$ an ein Modell F mit Jtree J :
 - Baumweite steigt nicht im Vergleich zu MPE- und Wahrscheinlichkeitsanfragen, wenn \mathbf{U} mindestens die Separatoren des Subgraphs J' enthält, in dem \mathbf{U} in J vorkommt
 - Eliminierungsfolge nicht durcheinander bringen
 - Formal: Es muss für Subgraph $J' \subseteq J : \mathbf{U} \subseteq \text{rv}(J')$ gelten, dass

$$\forall \{i, j\} \in J' : S_{ij} \subseteq \mathbf{U}$$
 - *Bemerkung 1:* J' enthält ein Cluster $C_i \rightarrow$ keine Separatoren, $\mathbf{U} \subseteq C_i$
 - *Bemerkung 2:* $\text{rv}(J') = \mathbf{U} \rightarrow$ Separatoren immer enthalten
 - *Bemerkung 3:* $J' = J \wedge \text{rv}(J') = \mathbf{U} \rightarrow$ MPE-Anfrage
- Dann gelten auch die Komplexitätsresultate: $O(n \cdot r^w)$



Beschränkte MAP-Anfragen

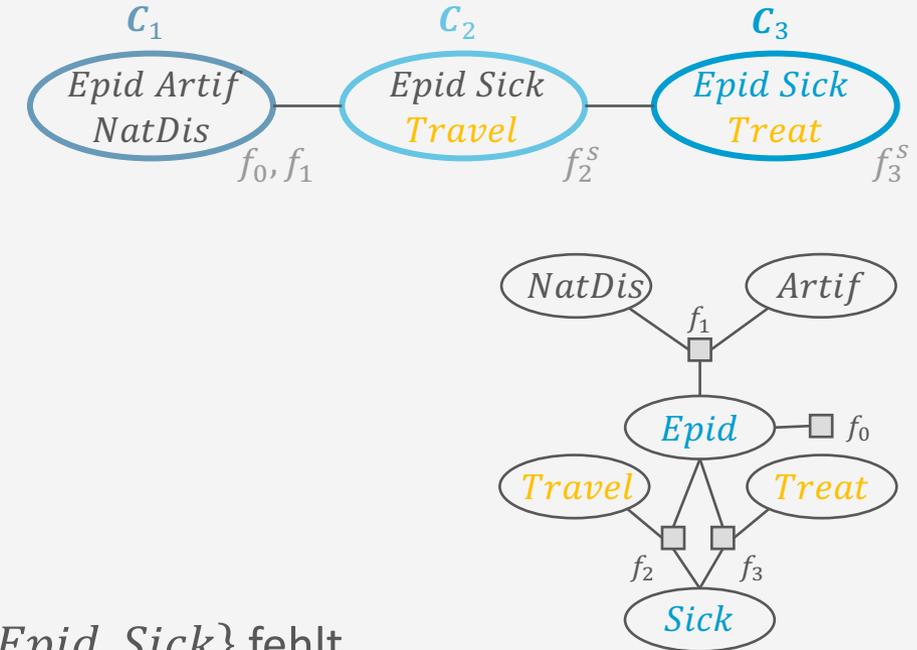
Baumweite steigt nicht, wenn U mindestens die Separatoren des Subgraphs J' enthält, in dem U in J vorkommt:

$$\forall \{i, j\} \in J' : S_{ij} \subseteq U, J' \subseteq J : U \subseteq \text{rv}(J')$$

- Bemerkung 1: J' enthält ein Cluster $C_i \rightarrow$ keine Separatoren, $U \subseteq C_i$
- Bemerkung 2: $\text{rv}(J') = U \rightarrow$ Separatoren immer enthalten

Beispiele:

- $MAP_F(\text{Epid}, \text{Sick})$
 - Teil eines Clusters, $J' = (C_2, \emptyset), \{\text{Epid}, \text{Sick}\} \subseteq C_2$
- $MAP_F(\text{Treat}, \text{Travel})$
 - Enthält nicht alle Separatoren, $J' = (\{C_2, C_3\}, \{\{2,3\}\}) : S_{23} = \{\text{Epid}, \text{Sick}\}$ fehlt
- $MAP_F(\text{Epid}, \text{Sick}, \text{Treat}, \text{Travel})$
 - Alle Variablen des Subgraphs $\{C_2, C_3\}$
- $MAP_F(\text{Epid}, \text{Travel}, \text{NatDis}, \text{Artif})$
 - Enthält alle Separatoren, $J' = (\{C_1, C_2\}, \{\{1,2\}\}) : S_{12} = \{\text{Epid}\}$ enthalten



- Nur eine Eliminationsreihenfolge bauen (dazu notieren, ob $\arg \max, \sum$)

VE Algorithmus für MAP-Anfragen mit Eliminationsreihenfolgen

MAP-VE($F, \{\phi_t(T_t)\}_{t=1}^m, \mathcal{V}, \mathcal{U}$)

for $t = 1, \dots, m$ **do**

Evidenz behandeln

while $\exists f \in F : T_t \in \text{rv}(f)$ **do**

▸ Absorbieren $\phi_t(T_t)$ in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{ABSORB}(f, T, \phi_t(T))\}$

for $i = 1, \dots, \text{len}(\mathcal{V})$ **do**

Nichtanfrage-Variablen eliminieren

while $\exists f_1, f_2 \in F : V_i \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{SUM-OUT}(f, V_i)\}$

▸ Summiere V_i aus F aus

for $i = 1, \dots, \text{len}(\mathcal{U})$ **do**

Anfrage-Variablen eliminieren

while $\exists f_1, f_2 \in F : U_i \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{MAX-OUT}(f, U_i)\}$

▸ Maximiere U_i aus F aus

while $\exists f_1, f_2 \in F$ **do**

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F , bis $|F| = 1$

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

Kombinieren

return f

MAP-VE

MAP-VE Algorithmus mit Online-Heuristik h

MAP-VE($F, U, \{\phi_t(T_t)\}_{t=1}^m, h$)

for $t = 1, \dots, m$ **do**

while $\exists f \in F : T_t \in \text{rv}(f)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{ABSORB}(f, T, \phi_t(T))\}$

Evidenz behandeln

▸ Absorbieren $\phi_t(T_t)$ in F

while $\text{rv}(F) \setminus U \neq \emptyset$ **do**

$V \leftarrow \arg \min_R h(F)$

while $\exists f_1, f_2 \in F : V \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{SUM-OUT}(f, V)\}$

Nichtanfrage-Variablen eliminieren

▸ Wähle nächstes V zur Eliminierung

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

▸ Maximiere V aus F aus

while $\text{rv}(F) \neq \emptyset$ **do**

$U \leftarrow \arg \min_R h(F)$

while $\exists f_1, f_2 \in F : U \in \text{rv}(f_1) \wedge \text{rv}(f_2)$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

$F \leftarrow F \setminus \{f\} \cup \{\text{MAX-OUT}(f, U)\}$

Anfrage-Variablen eliminieren

▸ Wähle nächstes U zur Eliminierung

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F

▸ Maximiere U_i aus F aus

while $\exists f_1, f_2 \in F$ **do**

$F \leftarrow F \setminus \{f_1, f_2\} \cup \{\text{MULTIPLY}(f_1, f_2)\}$

▸ Multipliziere f_1, f_2 in F , bis $|F| = 1$

Kombinieren

return f

MAP-VE

JT für eine Menge von MAP-Anfragen: Algorithmus

MAP-JT($F, \{U_i\}_{i=1}^n, e$)

Baue Jtree J für F

Behandle Evidenz e in J

Versende Nachrichten in J mittels **VE-JT**

▸ Nichtseparatoren aussummieren

for jede MAP-Anfrage mit Anfragevariablen U_i **do**

Finde Subgraph J' , so dass $U_i \subseteq \text{rv}(J')$

$F' \leftarrow \bigcup_{i \in J'} F_i \cup \bigcup_{k \in J \wedge k \notin J'} m_{ki}$

$f \leftarrow \text{MAP-VE}(F', U_i, \emptyset)$

f ausgeben oder speichern

if $U_i = \text{rv}(J')$ **then**

Nutze MPE-LJT: Schritt 3 + 4 auf J'

MAP-JT

- Alles außerhalb J' muss aussummiert werden, daher VE-JT für Nachrichten
- Innerhalb J' muss der Rest $\text{rv}(J') \setminus U_i$ aussummiert und dann U_i ausmaximiert werden

Approximative MAP-Anfragenbeantwortung

- MAP Anfrage $MAP_G(\mathbf{U}_{|C'} | \mathbf{e})$ approximativ beantworten

$$MAP_F(\mathbf{U} | \mathbf{e}) = \arg \max_{u \in Val(\mathbf{U})} \sum_{v \in Val(\mathbf{V})} P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{e})$$

- Ersetze **sum** mit **max**

$$\widetilde{MAP}_F(\mathbf{U} | \mathbf{e}) = \arg \max_{u \in Val(\mathbf{U})} \max_{v \in Val(\mathbf{V})} P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{e}) = \pi_U(MPE_F(\mathbf{e}))$$

- Operationen für \mathbf{U} und \mathbf{V} sind wieder kommutativ
- Berechnet eine MPE-Anfrage und projiziert das Ergebnis auf die Anfragevariablen der MAP-Anfrage
- Liefert eine untere Schranke für das MAP Potential am Ende

A	B	ϕ	\sum_B	$\arg\max_A$
<i>false</i>	<i>false</i>	1	6	
<i>false</i>	<i>true</i>	3 ⁵	4	
<i>true</i>	<i>false</i>	3	7	$A = true$
<i>true</i>	<i>true</i>	4		

 $MAP_\phi(A)$

A	B	ϕ	\max_B	$\arg\max_A$
<i>false</i>	<i>false</i>	1	5	$A = false$
<i>false</i>	<i>true</i>	3 ⁵	3	
<i>true</i>	<i>false</i>	3	4	$A = true$
<i>true</i>	<i>true</i>	4		

 $\widetilde{MAP}_\phi(A)$

Kann dieselbe MAP-Zuweisung liefern, muss aber nicht sein

Kombinierter JT für alle Anfragetypen

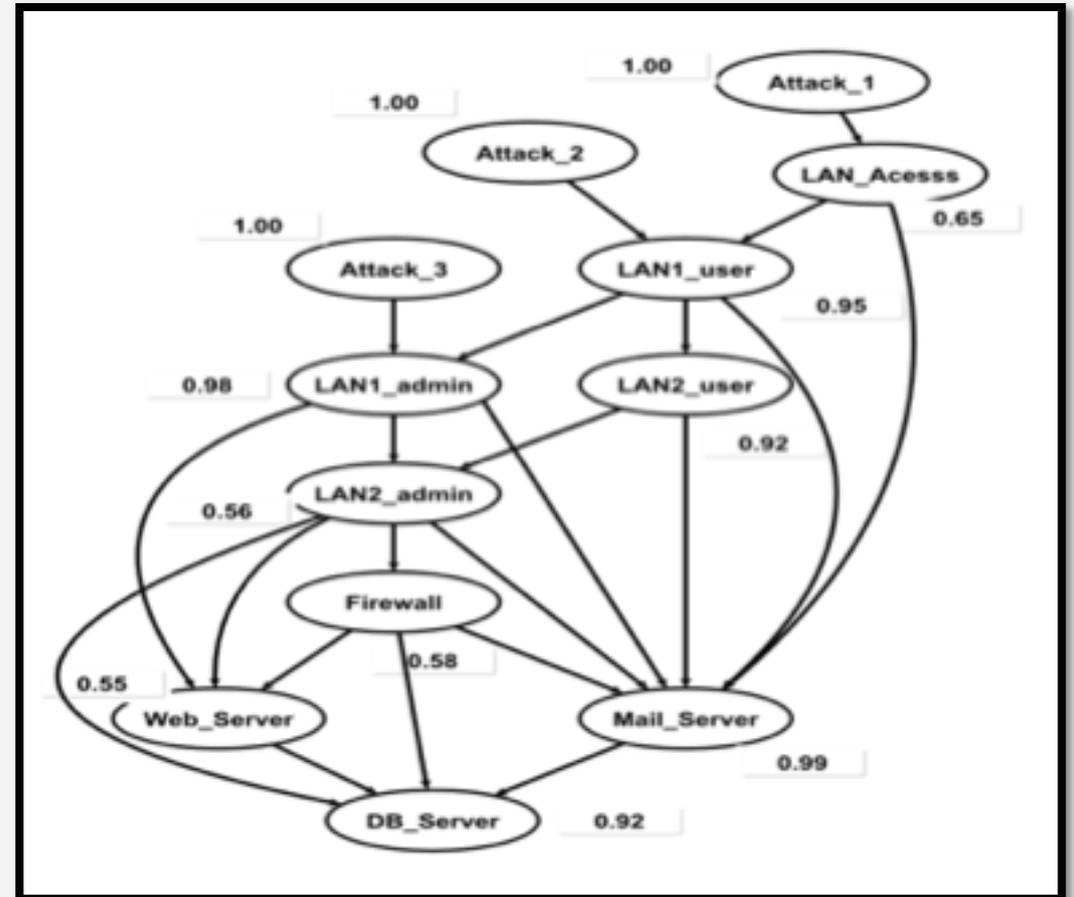
- Gegeben Anfragen der verschiedenen Typen
 - Typen:
 - MPE
 - MAP
 - Wahrscheinlichkeit
 - Anfrage zu einer (bedingten) Wahrscheinlichkeit (-sverteilung)
- Auf einer Evidenzmenge
- Jtree so viel wie möglich wiederbenutzen

```

ComJT( $F, \{Q_i\}_{i=1}^n, e$ )
  Baue Jtree  $J$  für  $F$ 
  Behandle Evidenz  $e$  in  $J$ 
  Versende Nachrichten in  $J$  mittels VE-JT
  for jede Anfrage mit Anfragevariablen  $Q_i$  und Typ  $\tau$  do
    if  $\tau = \text{MPE}$  then
      Mache Schritt 3+4 aus MPE-JT in  $J$ 
    else
      Finde Subgraph  $J'$ , so dass  $Q_i \subseteq \text{rv}(J')$ 
      if  $\tau = \text{MAP}, Q_i = \text{rv}(J')$  then
        Mache Schritt 3+4 aus MPE-JT in  $J'$ 
      else
         $F' \leftarrow \bigcup_{i \in J'} F_i \cup \bigcup_{k \in J \wedge k \notin J'} m_{ki}$ 
        if  $\tau = \text{MAP}$  then
          MAP-VE( $F', Q_i, \emptyset$ )
        else
          VE( $F', Q_i, \emptyset$ )
  
```

Anwendungen

- Bayesian Attack Graphs: Anfragemöglichkeiten
 - Wahrscheinlichkeitsanfragen:
 $P(A_1), P(A_2), P(A_3), P(L_{ac}), P(L_{1u}), P(L_{2u}), P(L_{1a}), P(L_{2a}), P(F), P(S_w), P(S_m), P(S_{db})$
 - MPE Anfragen:
 - Evidenz: Server S_w, S_m, S_{db} kompromittiert, s
 - $MPE(s)$ um den wahrscheinlichsten Zustand des restlichen Systems zu erhalten
 - MAP Anfragen
 - Evidenz: A_1, L_{ac} (Wissen um einen Angriff)
 - $MAP(S_w, S_m, S_{db})$ um den wahrscheinlichsten Zustand der Server zu erhalten



Zwischenzusammenfassung

- Generelle Zustandsanfragen: Maximum a posteriori Anfragen (MAP)
 - Generalisierung von MPE
- Maximiere Anfragevariablen aus, nachdem Nichtanfragevariablen aussummiert wurden
 - Wenn Anfragevariablen = alle Variablen ohne Evidenz, dann MAP = MPE
- Problem \sum und argmax nicht kommutativ
 - Kann die Baumweite vergrößern
 - Bei Anfragen an Zufallsvariablen, die mindestens die Separatoren in dem Subgraph aufdecken, der die Anfragevariablen abdeckt, bleibt die Baumweite gleich der von Wahrscheinlichkeits- / MPE-Anfragen
- MAP-VE mit zwei Schleifen, eine für Aussummieren, eine für Ausmaximieren
- MAP-JT mit normalen VE-Nachrichten im Jtree und Aufruf von MAP-VE auf dem Subgraph
- Com-JT für eine Menge von Anfragen unterschiedlichen Typs

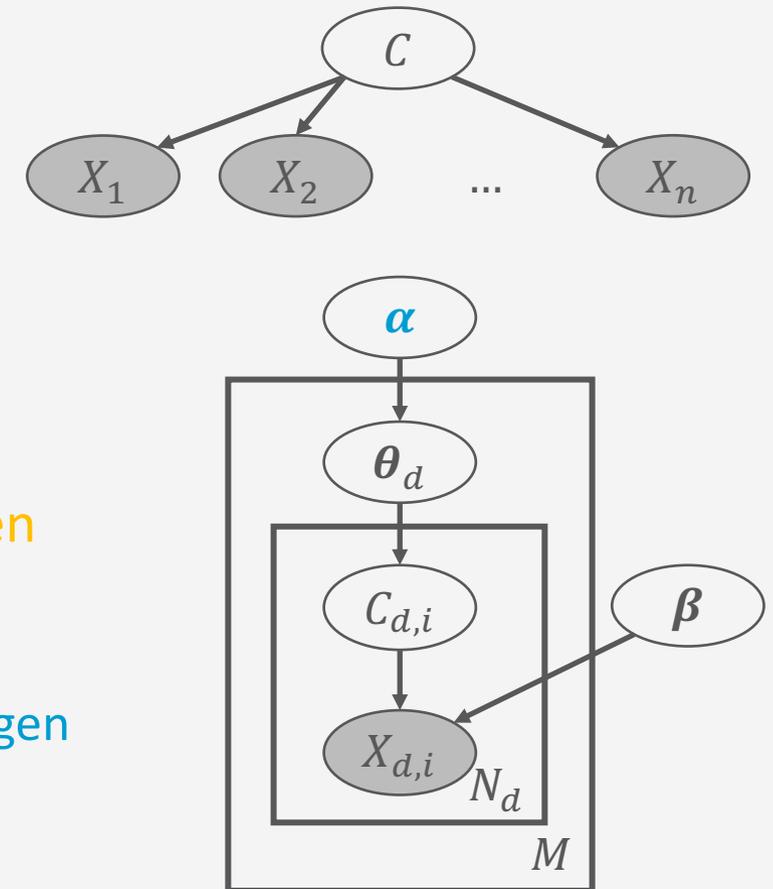
Bemerkung zur Nomenklatur

- Mit BNs als Forschungshintergrund, Namen der Anfragetypen wie hier benutzt:
 1. Wahrscheinlichkeitsanfragen
 2. MPE-Anfrage
 3. MAP-Anfrage
- Mit MNs als Forschungshintergrund, Namen häufig eher
 1. Wahrscheinlichkeitsanfragen = *marginale Anfrage*
 2. MPE-Anfrage = *MAP-Anfrage*
 3. MAP-Anfrage = *marginale MAP-Anfrage*
- In der Logik wären die korrespondierenden Inferenzprobleme
 1. Wahrscheinlichkeitsanfragen = *marginale Anfrage* \triangleq *Induktion*
 2. MPE-Anfrage = *MAP-Anfrage* \triangleq *Abduktion*

Anwendungen

- Mixture of Topics
 - Mögliche Anfrage: Topic eines Wortes $P(C_{d,i} | \mathbf{x}_d)$
 - $\mathcal{S} = \{C_{d,i}\}, \mathcal{T} = \text{rv}(\mathbf{x}_d)$ und damit

$$\mathbf{U} = \mathbf{R} \setminus \mathcal{S} \setminus \mathcal{T} = \{C_{d,j}\}_{i \neq j} \cup \{C_{d',k}\}_{d' \neq d}$$
 - Unabhängigkeit zwischen den Dokumenten
 - Vereinfachung: nur d betrachten, damit $\mathbf{U} = \{C_{d,j}\}_{i \neq j}$
 - **Problem: Immer noch (zu) viele Zufallsvariablen auszusummieren**
 - Nächstes Thema:
 - Approximative Inferenz durch Sampling ([Thema 4](#))
 - Mögliche Anfrage: **Fragmente eines Textes (mit Topic) vervollständigen** $P(\mathbf{x}'_d | \mathbf{x}''_d)$ (bzw. $P(\mathbf{x}'_d | \mathbf{x}''_d, C_{d,i})$) mit $\mathbf{x}'_d \cup \mathbf{x}''_d = \mathbf{x}_d$
 - Werte (Worte) sample'n



Überblick: 3. Exakte Inferenz in episodischen PGMs

A. Einzelanfragen: Variableneliminierung (VE)

- Algorithmus, Operatoren für Wahrscheinlichkeitsanfragen
- Dekompositionsbäume, Komplexität

B. Multi-Anfragen: Junction Tree (Cliques-Bäume) Algorithmus (JT)

- Cliques, Junction Tree als Hilfsstruktur, Vorverarbeitung und Anfragebeantwortung
- Zusammenhang mit VE, Komplexität
- Geschichtsstunde: Pearl's Probability Propagation (PP) auf Polytree BNs

C. Inferenzproblem Zustandsanfragen

- Ausprägungen: Most probable explanation (MPE) / maximum a posteriori Anfragen (MAP)
- Semantik: Ausmaximieren statt aussummieren; max-out Operator in VE
- Auswirkungen auf die Komplexität

→ [Approximative Inferenz in episodischen PGMs](#)

Einordnung der Vorlesung: *Modell- und nutzenbasierter Agent*

- Nachfolgende Themen der Vorlesung
 2. Episodische PGMs
 3. Exakte Inferenz in episodischen PGMs
 4. Approximative Inferenz in episodischen PGMs
 5. Lernalgorithmen für episodische PGMs
 6. Sequentielle PGMs und Inferenz
 7. Entscheidungstheoretische PGMs

