Exact inference in general Bayesian networks

Peter Antal antal@mit.bme.hu

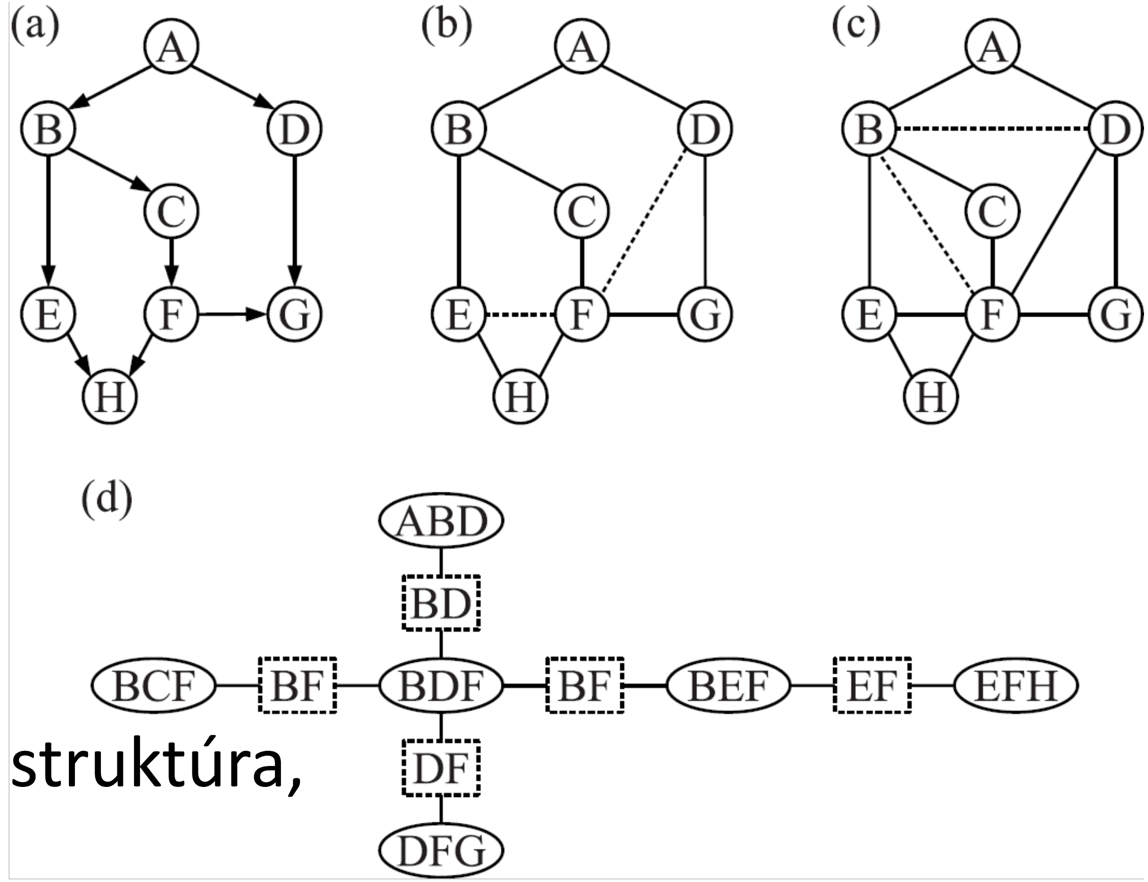
Overview

- The „Probability Propagation in Trees of Cliques” (a.k.a. ~in join trees)
- Practical inference
- Exercises
- Literature:
  - Valószínűségi döntéstámogató rendszerek:
    - 5 Egzakt, optimalizációs és Monte-Carlo-következtetések VGM-ben
      - 5.4 A PPTC-következtetés
  - Bioinformatika laboratórium:
    - Tudásmérnöki technikák alkalmazása döntési hálóknál

Feladatok

- 1. Idézzük fel az általános és a polifa Bayes-hálókban való egzakt következtetés komplexitásait (ld. jegyzet).
- 2. Mi határozza meg a jegyzetben leírt klikkfán alapuló egzakt következtetés komplexitását?
- 3. Vizsgáljuk meg a BayesCube-ban implementált klikkfa alapú következtetés által létrehozott klikkek számát és a klikkek állapotterének maximumát a következő modellosztályokban:
  - Naív Bayes-hálókban, fa-összekötött Naív Bayes hálókban, általános összekötésű Naív Bayes-hálókban
  - Elsőrendű és magasabb rendű Markov láncokban.
  - Pontosan egy irányítatlan kört tartalmazó Bayes-hálókban.
- 4. Egy tetszőleges, alkalmas Bayes-hálóban mutassunk példát az "oksági", "diagnosztikai" és a "kimagyarázás" következtetés típusokra.
- 5. Egy tetszőleges Bayes-hálóban (például a készülő nagyHF-beli Bayes-hálóban) mutassunk példát és következtetéssel ellenőrízzük is az irányított-elválasztás ("d-szeparáció") 3 alesetét: "benti-áthaladó", "benti-széttartó" és "kinti-összetartó+leszármazott(ak)".
- 6. Egy tetszőleges, alkalmas Bayes-hálóban egy önkényesen megválasztott célváltozó esetén mutassunk példát Markov-takarókra és (a) Markov-határra.
- **kisHF➔7. Egy tetszőleges Bayes-hálóban alkalmasan megválasztott célváltozókat felhasználva demonstráljuk a láncszabállyal történő kiszámításukat, ezt numerikusan is demonstráljuk, és mutassunk arra is példát, amikor a célváltozók:**
  - **egy közös klikkbe esnek,**
  - **különböző klikkbe esnek.**

Másodlagos struktúra létrehozása



- (a) eredeti Bayes-háló struktúra,
- (b) a morális gráf
- (c) a háromszögesített gráf,
- (d), a klikkeket (folytonos vonal) és szeparáló halmazokat (szaggatott vonal) tartalmazó klikkfa

Morális gráf formára alakítás

- Első lépésként a DAG-ot annak morális gráfjává alakítjuk, azaz összekötjük az egyes csomópontok szüleit egymással, majd töröljük az élek irányítottságát.

- A függetlenségi modellben a szülői szeparációk nem változnak.

A morális gráf háromszögesítése

- „háromszögesítés”: minden *3*-nál hosszabb körben kell lennie *2* a körben nem szomszédos, összekötött csomópontnak.

Algorithm 1.2 Morális gráf G_M háromszögesítése

1: Készítsünk G_M-ről egy másolatot: G'_M
2: **while** $G'_M \neq \varnothing$ **do**
3: Válasszuk ki G'_M-ből a V csúcsot a 8. sortól leírt kritérium szerint.
4: V és szomszédai egy úgynevezett *klikket* alkotnak. Kössük össze az összes csomópontpárt a klikkben, és az újonnan hozzáadott éleket húzzuk be G_M-ben is.
5: Töröljük V-t G'_M-ből.
6: **end while**
7: G_M az újonnan hozzáadott élekkel így már háromszögesítve van.

8: A 3. sorban alkalmazott kritérium:
9: Egy csomópont *súlya* annak értékkészletének számossága.
10: G'_M csomópontjai közül válasszuk azt, amelyik a 4 sorban a lehető legkevesebb él gráfhoz adását indukálja.
11: Ha több ilyen is van, válasszuk a legkisebb súlyút.

Klikkek azonosítása

- A háromszögesített gráfban azonosítani kell a maximális klikkeket: teljesen összekötött csomóponthalmazokat.
- Felhasználhatjuk, hogy
  - (1) minden a gráfban lévő klikk a háromszögesítés során jött létre;
  - (2) egy ilyen klikk nem lehet egy korábban létrehozott másik klikk részhalmaza. Ebből
- Háromszögesítés során feljegyezzük azokat a klikkeket, amelyek az eddig lementettek egyikének sem részhalmazai ➔ a klikkek listája.

Optimális klikkfa építése

- Az így előállított klikkekből ezután ki kell alakítani a klikkfát: lépésről-lépésre összekötögetjük a klikkeket, amíg a fa az összeset nem tartalmazza.
- A klikkek összekötésénél közéjük a gráfban egy úgynevezett szeparáló halmazt (sepset-et) illesztünk a gráfban.
- A sepset ugyanúgy az eredeti háló csomópontjainak egy halmazát tartalmazza, mint a klikkek, nevezetesen azokat, amelyek a hozzá kapcsolódó mindkét klikkben jelen vannak (metszet).

Optimális klikkfa építése: módszer

Algorithm 1.3 Optimális klikkfa építése

1: Kezdjünk n darab különálló, egy csomópontos gráffal (a $c \in \mathcal{C}$ klikkekből) és egy $\mathcal{S}$ üres halmazzal.
2: **for each** (X, Y) **in** $(X, Y) : X, Y \in \mathcal{C}, X \neq Y$ **do**
3:     Állítsuk elő az S_{XY} sepset-et, amely X-re és Y-ra hivatkozik szomszédaiként és $X \cap Y$ csomópontokat tartalmazza.
4:     Adjuk hozzá S_{XY}-t $\mathcal{S}$-hez.
5: **end for each**
6: **repeat**
7:     Válasszunk ki egy S_{XY} sepset-et $\mathcal{S}$-ből, a 11. sortól kezdődően leírt kritérium szerint.
8:     Töröljük S_{XY}-t $\mathcal{S}$-ből.
9:     Illesszük be S_{XY}-t az általa hivatkozott X és Y klikkek közé, feltéve, hogy X és Y külön fákban vannak.
10: **until** Beillesztettünk $n - 1$ sepset-et.

11: A 7. sorban alkalmazott kritérium.
12:     S_{XY} sepset *tömege* az általa tartalmazott csomópontok száma, azaz $|X \cap Y|$
13:     S_{XY} sepset *költsége* X és Y klikkek súlyának összege, ahol egy klikk *súlya* az őt alkotó csomópontok súlyainak szorzata (lásd 1.2 algoritmus, 9. sor).
14:     Az $S_{XY} \in \mathcal{S}$ sepset-ek közül válasszuk azt, amelyiknek a legnagyobb a tömege.
15:     Ha több ilyen is van, akkor ezek közül válaszuk azt, amelyiknek a legkisebb a költsége.

Következtetés a klikkfában

- Inicializáció
  - A csomópontok (vagyis klikkek és sepsetek) által tárolt valószínűségi potenciálok inicializálása.
- Evidenciák bevitele
  - A V változóval kapcsolatos ismereteinket leíró valószínűségi potenciált egy V-t tartalmazó X klikkbe bevinni egy pontonkénti szorzással.
- A valószínűségek globális terjesztése
  - Cél: a klikkfát lokálisan konzisztensé tevő üzenetküldéssekkel globálisan is konzisztenssé tesszük.
- Normalizálás.

Valószínűségek terjesztése a klikkfában

Algorithm 1.5 Globális valószínűség-terjesztés

```
Válasszunk egy tetszőleges klikket: X.

for each C in 𝒞 do b(C) ← false
end for each
call COLLECT-EVIDENCE(X)

for each C in 𝒞 do b(C) ← false
end for each
call DISTRIBUTE-EVIDENCE(X)
```

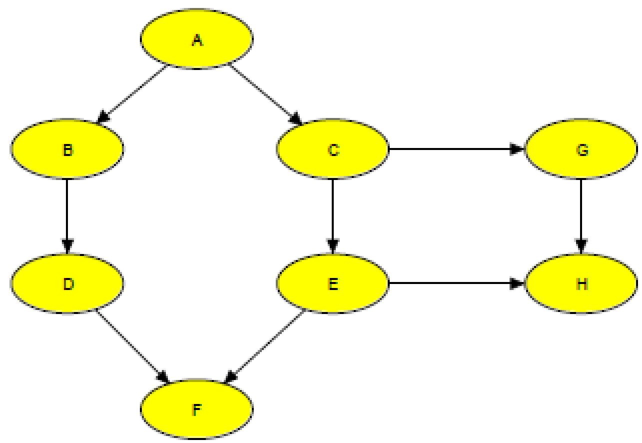
```
function COLLECT-EVIDENCE(klikk X)
    b(X) ← true
    for each Y in X szomszédai do
        if b(Y) = false then call COLLECT-EVIDENCE(Y)
        end if
    end for each
    Küldjünk üzenetet X-ből abba a csomópontba, amely ezt a függvényhívást indította.
end function
```

```
function DISTRIBUTE-EVIDENCE(klikk X)
    b(X) ← true
    for each Y in X szomszédai do
        if b(Y) = false then
            Küldjünk üzenetet X-ből Y-ba.
            call COLLECT-EVIDENCE(Y)
        end if
    end for each
end function
```

Következtetés

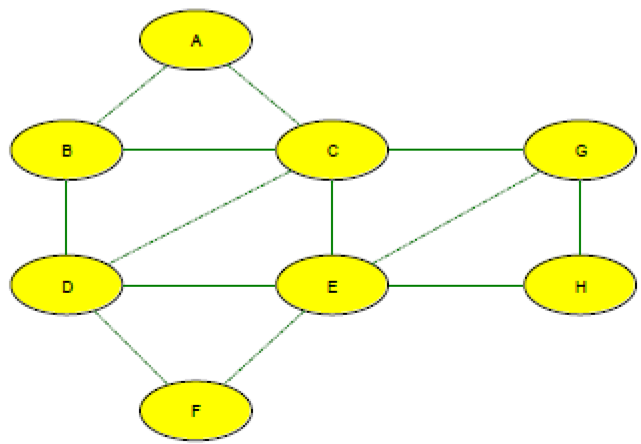
- Egyetlen változó marginálisa.
  - A lokális konzisztenciának megfelelően minden klikk és sepset táblája egy valós többváltozós marginálist tartalmaz ➔ keresnünk egy (lehetőleg minél kevesebb változót tartalmazó) csomópontot, és annak táblájából marginalizálással előállíthatjuk a keresett valószínűségi eloszlást.
- Több változó marginálisa
  - Ha létezik olyan klikkfa csomópont, amely tartalmazza az összes lekérdezés-változót➔ marginalizálás.
  - Ha viszont nincs olyan klikk, amely teljes egészében lefedné a célváltozók halmazát➔ láncszabály.

Bayes-háló megjelenítése



1.13. ábra. Bayes-háló-modell az élek megjelenítésével

Húrgráf megjelenítése



1.14. ábra. Bayes-háló-modell a háromszögesített (húr-) gráf éleinek megjelenítésével

Klikkfa megjelenítése

- **Klikkfa csomópontjai.** A klikkfa csomópontjait lekerekített sarkú fehér négyzetek jelképezik. Az egyes klikkfa-csomópontok által tartalmazott csomópontok listája a kurzort a klikkfa-csomópont fölé helyezve jeleníthető meg: ezt a felbukkanó tooltip tartalmazza.
- **Klikkfa ``élei''.** A klikkfában lévő klikkek egymáshoz úgynevezett határoló halmazokon (sepset) keresztül kapcsolódnak. Bár maguk a határoló halmazok nem jelennek meg, azok között a klikkek között, amelyek ily módon össze vannak kötve, vastag szaggatott élek futnak.
- **A klikkfa és az eredeti csomópontok közötti összeköttetések.** Az egyes klikkek által tartalmazott csomópontokat vékony szaggatott vonal köti az őket tartalmazó klikk(ek)hez.