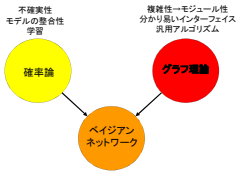
情報意味論 (9)
ベイジアンネットワーク

慶應義塾大学理工学部
櫻井 彰人

どこから生まれてきたか？

- 実問題の共通課題：
  - 不確実性 ← 確率的枠組み ← 確率変数を用いよう
  - 複雑性 ← すっきりと表現しよう



確率変数を用いて簡潔に

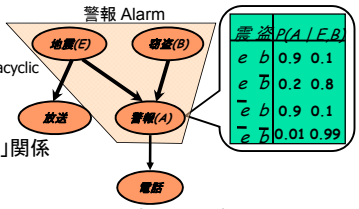
- 原理的にできそう:
  全変数の結合確率で表現
  しかし、naïve Bayes の時と同様に
- 「全変数の結合確率」ではパラメータが多すぎ
  かといっても、naïve Bayes は簡単化しすぎ
- 「全変数の結合確率」と「naïve Bayes」の中間はないか？
- Bayesian network は一つの答え

BNとは何か？

条件付確率を用いた、結合確率のコンパクトな表現

定性的要素:
有向無閉路グラフ directed acyclic graph (DAG)

- ノード – 確率変数.
- エッジ –非「条件付独立」関係



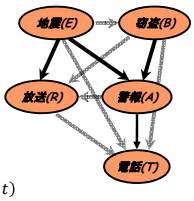
あわせて:
ある確率分布の因数分解(?. 確率分布の積に分解)

定量的要素:
条件付確率分布の集まり

Figure from N. Friedman

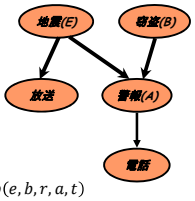
コンパクトな表現

完全な結合の表現



$$p(e,b,r,a,t) = p(e)p(b|e)p(a|e,b)p(r|e,b,a)p(t|e,b,a,r)$$

コンパクトな表現



$$p(e,b,r,a,t) = p(e)p(b)p(a|e,b)p(r|e)p(t|a)$$

条件付き独立性

- 確率変数 x と z が y を条件として条件付き独立であるとは、

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

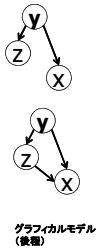
しばしば、 $x \perp\!\!\!\perp z|y$ と書く

- 条件付き確率の定義から

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

- 従って、 $x \perp\!\!\!\perp z|y$ if and only if

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



グラフィカルモデル（後程）

なぜ役立つか？

- グラフ構造があるので
  - 知識をモジュール化して表現できる
  - 推論・学習に、局所的かつ分散的アルゴリズムが使える
  - 直感的な (場合によっては因果的な) 解釈が可能
- 結合確率 $P(X_1,\ldots,X_n)$ をそのまま表現するより、指数関数的に少ないパラメータで、表現可能 =>
  - 学習に必要なデータ数(sample complexity)が少なくてすむ
  - 推論に必要な時間(time complexity)が少なくてすむ

何に使うか？

- **事後確率推定**
  - 証拠・現象 evidence から発生した事象 event の確率を推定

これは、全確率変数の結合確率が分かっていればできること

- 最も可能性が高い説明
  - 証拠・現象を説明するシナリオ

これは、因果関係的な解釈ができる場合

- 合理的な意思決定
  - 期待成果を最大化
  - 情報の価値

これは、全確率変数の結合確率が分かっていればできること

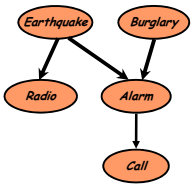


Figure from N. Friedman

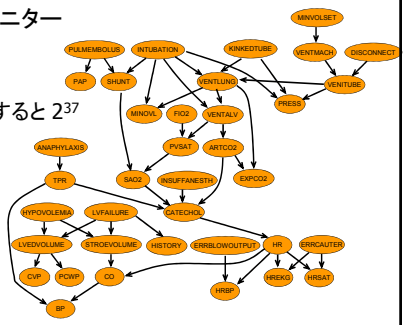
応用事例

- "Microsoft's competitive advantage lies in its expertise in Bayesian networks"
  -- Bill Gates, LA Times より, 1996
- MS Answer Wizards, (printer) troubleshooters
- 医療診断
- 遺伝子系統解析
- 音声認識 (HMMs)
- 遺伝子配列分析
- Turbocodes (通信路の符号化)

実例: Alarm (A Logical Alarm Reduction Mechanism)

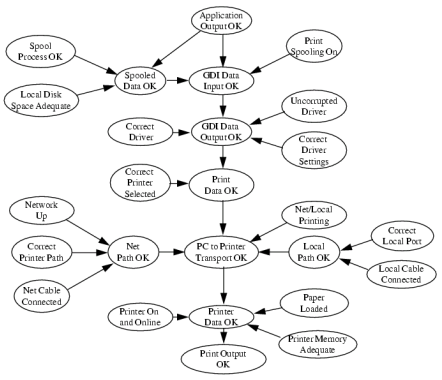
分野: ICU でのモニター

- 37 変数
- 509 パラメータ
  … 各変数2値とすると 2^{37}



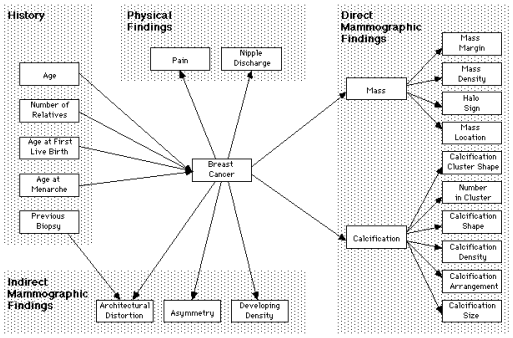
A Logical Alarm Reduction Mechanism

Figure from N. Friedman



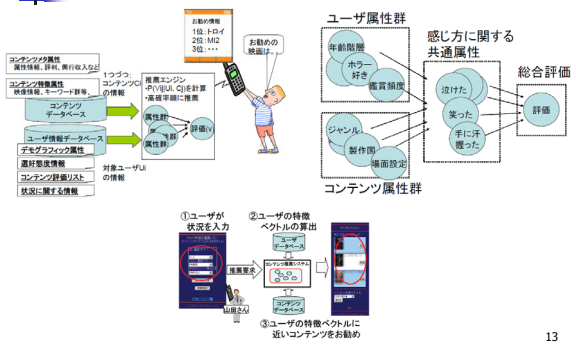
Microsoft Print Troubleshooter

MammoNet



http://www.mcw.edu/midas/images/mammo.model.gif
http://www.mcw.edu/midas/mammo.html

状況に応じた映画推薦

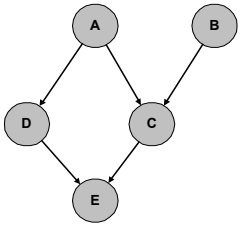


確率の変形規則…

- ベイズ規則： $\Pr(A,B) = \Pr(A \mid B)\cdot\Pr(B)$
  $= \Pr(B \mid A)\cdot\Pr(A)$
- 独立性 $A \perp B$ iff： $\Pr(A \mid B) = \Pr(A)$
  $\Pr(B \mid A) = \Pr(B)$
  $\Rightarrow \Pr(A,B) = \Pr(A)\cdot\Pr(B)$
- チェーン規則： $\Pr(A,B,C,D) = \Pr(A)\cdot\Pr(B,C,D \mid A)$
  $= \Pr(A)\cdot\Pr(B \mid A)\cdot\Pr(C,D \mid A,B)$
  $= \ldots$
  $= \Pr(A)\cdot\Pr(B \mid A)\cdot\Pr(C \mid A,B)\cdot\Pr(D \mid A,B,C)$
- 周辺化 marginalize：
  $\Pr(A) = \sum_b \Pr(A, B=b)$

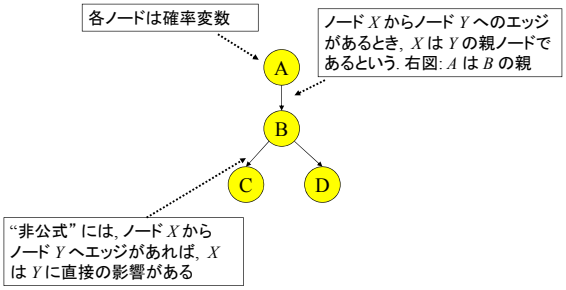
BN の形式的定義

- **DAG**：
  有向無閉路グラフ directed acyclic graph
- **ノード**：
  各ノードは確率変数。変数間にはある順序がある
  （離散値をとる）
- **エッジ**：
  エッジの出る側は入る側の親と呼ぶ。
  子ノードには、親ノードを条件とする条件付確率表（CPT）が定義されている。
  各エッジは2変数間に直接的な関係がありうることを示唆している。正確には、「条件付独立関係がある」とは言えないことを示している
  方向は、因果関係があれば、原因→結果、なければ、任意。ノード順序に矛盾しない
- **CPTs**：
  条件付確率表： Pr(X | pa(X))
  右図：Pr(C | A, B), Pr(D | A), Pr(E|C,D)
- **事前分布 a priori distribution**：
  親のないノードすべてに
  右図：Pr(A), Pr(B)



全変数の結合確率は、上記の条件付確率の積で表される $P(X_1,\ldots,X_n) = \prod_i P(X_i \mid pa(X_i))$

DAG



条件付確率表 CPT

各ノード X_i には条件付確率表 $P(X_i \mid Parents(X_i))$ があり，親ノードの当該ノードへの影響を表現する

表中の条件付確率がパラメータとなる。

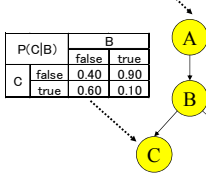
$P(D,C,B,A)$
$= P(D \mid B)P(C \mid B)P(B \mid A)P(A)$

A	false	true
	0.6	0.4

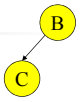
P(B|A)	A	
	false	true
B false	0.01	0.7
B true	0.99	0.3

P(C|B)	B	
	false	true
C false	0.40	0.90
C true	0.60	0.10

P(D|B)	B	
	false	true
D false	0.02	0.05
D true	0.98	0.95



条件付確率表 CPT



親ノードが B であるノード C，の条件付確率表

ここには直接の親ノードしか現れない

	B	
	false	true
C false	0.4	0.9
C true	0.6	0.1

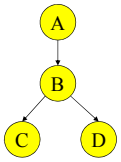
親ノード（左図ではB）の値のすべての組み合わせについて，
P(C=true | B) と P(C=false | B) の和は 1 とならないといけない

k 個の親が全てブール変数（2値変数）であれば、
ブール値変数のCPTの要素数は $2^k * 2 = 2^{k+1}$ となる

BNの定義 (まとめると)

BN の構成要素:

1. 有向無閉路グラフ
DAG directed acyclic graph



3. 全変数の結合確率は、各ノードに付随する条件付確率の積

$$P(D,C,B,A) = P(D \mid B)P(C \mid B)P(B \mid A)P(A)$$

もし構造がなければ
$\Pr(D \mid A,B,C)\cdot\Pr(C \mid A,B)\cdot\Pr(B \mid A)\cdot\Pr(A)$

2. 各ノードに付随する条件付確率表

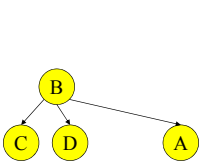
A	false	true
	0.6	0.4

P(B|A)	A	
B	false	true
false	0.01	0.7
true	0.99	0.3

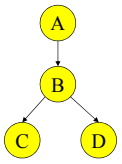
P(D|B)	B	
D	false	true
false	0.02	0.05
true	0.98	0.95

P(C|B)	B	
C	false	true
false	0.40	0.90
true	0.60	0.10

補足: naïve Bayes との比較



$$P(D,C,B,A) = P(D \mid B)P(C \mid B)P(A \mid B)P(B) = P(D \mid B)P(C \mid B)P(A,B)$$



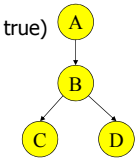
$$P(D,C,B,A) = P(D \mid B)P(C \mid B)P(B \mid A)P(A) = P(D \mid B)P(C \mid B)P(A,B)$$

20

計算例

先ほどの例で次の結合確率を計算する:

P(A = true, B = true, C = true, D = true)
= P(A = true) * P(B = true | A = true) *
P(C = true | B = true) * P(D = true | B = true)
= (0.4) * (0.3) * (0.1) * (0.95)



例題が簡単すぎて、あまり簡単にならないが、、、

21

別の計算例

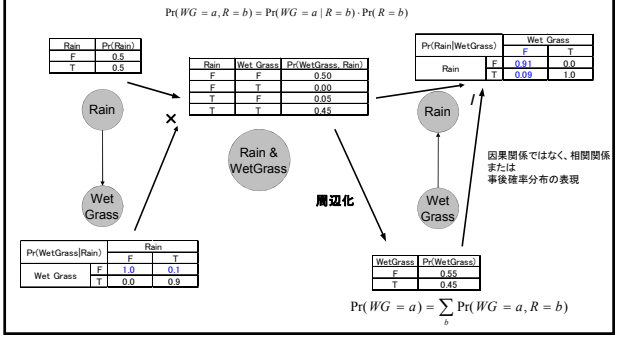
$$\Pr(R=a \mid WG=b) = \frac{\Pr(R=a, WG=b)}{\Pr(WG=b)}$$

$$\Pr(WG=a, R=b) = \Pr(WG=a \mid R=b)\cdot\Pr(R=b)$$

Rain	Pr(Rain)
F	0.5
T	0.5

Rain	Wet Grass	Pr(WetGrass, Rain)
F	F	0.50
F	T	0.00
T	F	0.05
T	T	0.45

Pr(Rain|WetGrass)	Wet Grass	
Rain	F	T
F	0.91	0.0
T	0.09	1.0

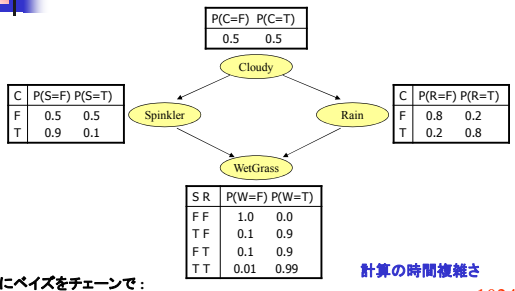


Pr(WetGrass|Rain)	Rain	
Wet Grass	F	T
F	1.0	0.1
T	0.0	0.9

WetGrass	Pr(WetGrass)
F	0.55
T	0.45

$$\Pr(WG=a) = \sum_b \Pr(WG=a, R=b)$$

他の例：Water-Sprinkler



P(C=F)	P(C=T)
0.5	0.5

C	P(S=F)	P(S=T)
F	0.5	0.5
T	0.9	0.1

C	P(R=F)	P(R=T)
F	0.8	0.2
T	0.2	0.8

S R	P(W=F)	P(W=T)
F F	1.0	0.0
T F	0.1	0.9
F T	0.1	0.9
T T	0.01	0.99

単にベイズをチェーンで：
$\Pr(C,R,S,W) = \Pr(C)\cdot\Pr(R \mid C)\cdot\Pr(S \mid R,C)\cdot\Pr(W \mid R,C,S)$

条件付独立性を使うと：
$\Pr(C,R,S,W) = \Pr(C)\cdot\Pr(R \mid C)\cdot\Pr(S \mid C)\cdot\Pr(W \mid R,S)$

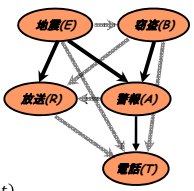
計算の時間複雑さ

2 x 4 x 8 x 16 = 1024

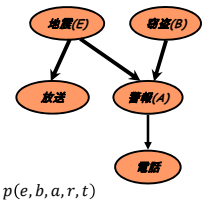
2 x 4 x 4 x 8 = 256

条件付独立性とBN

完全な結合の表現



コンパクトな表現



$$p(e,b,a,r,t) = p(e)p(b|e)p(a|e,b)p(r|e,b,a)p(t|e,b,a,r)$$

$p(b) = p(b|e)$ $\quad b \perp\!\!\!\perp e$

$p(r|e,b,a) = p(r|e)$ $\quad b,a \perp\!\!\!\perp r|e$

$$p(e,b,a,r,t) = p(e)p(b)p(a|e,b)p(r|e)p(t|a)$$

24

条件付独立性の判定方法

全変数の結合確率表を作って計算すれば分かるのだが、それはしたくない

- D-separation: ある証拠が与えられたとき、それに対応する変数を条件として、他の変数が条件付独立であるための十分条件を与える。
  - 証拠: ある確率変数達について、実現した値
- DAG上で、2変数間を、証拠変数がさえぎるか否かを判定し、それで、条件付独立か否かを表している。

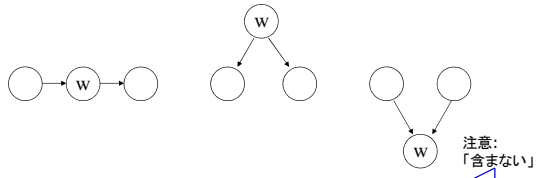
25

D-separation

- D-separation は、DAG上の変数間の独立性を調べるグラフ的なテストである
- A, B: 変数集合. 独立性を調べる
  Z: 変数集合. 条件
  A の全ての変数とBの全ての変数間の全てのpathを調べる
- AとBはZを条件として(i.e. Zが観測されるとき)独立である
  (A ⫫ B | Z) iff A の全ての変数とBの全ての変数の間の全てのpathが通行止めである
- もしpathが一つでも通行可能であれば、独立も非独立もいえない
- D-separationが成立していないときに独立性を言おうと思えば、条件付確率表を調べるしかない
- ある pathが通行止めであるのは、このpath上のあるノード列が次のスライドに示す「通行止め」になっている場合である。

26

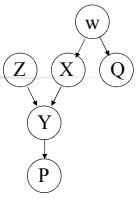
通行止め



	連続	分岐	合流
通行止め	$w \in Z$	$w \in Z$	$w \notin Z$ and 全子孫$(w) \notin Z$
通行可	$w \notin Z$	$w \notin Z$	$w \in Z$ or ある子孫$(w) \in Z$

27

例



正しい関係　　D separation による説明

(Q ⫫ X, Y, Z, P | W) : Q←W →X は分岐. Wを条件として通行止め

(Z ⫫ X, W, Q | ∅) :　Z →Y←X は合流. Y及びその子孫Pを条件としないので通行止め.

(Z $\not\perp\!\!\!\perp$ X, W, Q | P) :　Z →Y←X は合流. Yの子孫Pを条件としているので通行可能.

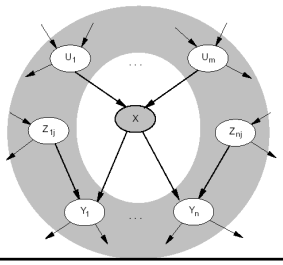
(Z, Y, P ⫫ W, Q | X) : W → X → Y は連続. Xを条件として通行止め.

(Z, Y, P $\not\perp\!\!\!\perp$ W, Q | ∅) : W → X → Y は連続. Xを条件としていないので通行可能.

28

Markov Blanket

- Markov blanket: 親 + 子供 + 子供の親
- (中心にある)ノードは、Markov blanket 内の変数を条件として、ネットワーク内のどの変数からも、条件付独立である



29

推論

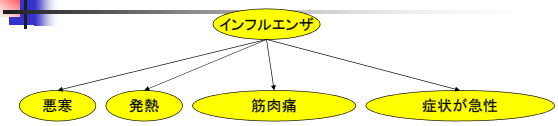
- ベイジアンネットワークで確率を計算することを推論という
- 一般に, 推論では次の形のクエリーが扱われる:
  P(X | E)

E = 証拠 evidence 変数

X = 問い合わせる変数

30

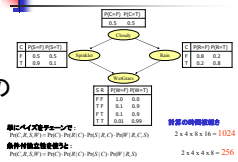
推論



- クエリーは、例えば、:
  P(*インフルエンザ= true | 発熱 = true, 急性症状 = true*)
- 注: *悪寒* と *筋肉痛* という変数がベイジアンネット中に現れているが、クエリー中では値が与えられていない (ie. 質問変数としても証拠変数としても現れていない)
- 未観測の確率変数として扱われる

BNにおける推論

他の例：Water-Sprinkler



- WetGrass が真のとき、2つの説明が可能：Rain か Sprinkler
  - どちらがよりありうるか?

$$\Pr(S=T \mid W=T)=\frac{\Pr(S=T,W=T)}{\Pr(W=T)}=\frac{\sum_{C,r}\Pr(C,R,S=T,W=T)}{\Pr(W=T)}=\frac{0.2781}{0.6471}=0.430$$ Sprinkler

$$\Pr(R=T \mid W=T)=\frac{\Pr(R=T,W=T)}{\Pr(W=T)}=\frac{\sum_{C,s}\Pr(C,S,R=T,W=T)}{\Pr(W=T)}=\frac{0.4581}{0.6471}=0.708$$ Rain

Rain が真であるのが理由である可能性がより高い

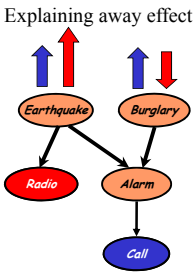
BNにおける推論 (2)

- **Bottom-Up :**
  - 結果から原因へ → 診断 diagnostic
  - 例. エキスパートシステム, パターン認識,…
  - 証拠・結果が与えられたとき、それを説明する最もありうべき仮説を求める
- **Top-Down :**
  - 原因から結果へ → 推論 causal
  - 例. 生成モデル, 計画,…
  - ある仮説のもとどのような結果がどのような確率で起こるか？
- **Explain Away :**
  - Sprinkler と Rain は, WetGrass が真であることの説明に際し, 競合している
    → この二つは, 共通の子供（WetGrass）が観測されると条件付依存となる

Explaining away effect

ある仮定（または仮定の集合）を支持する証拠が、その証拠とは相容れない（競合する）仮定の確からしさを減少させる効果、またはその現象

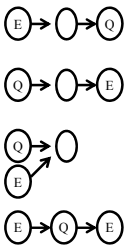
Call=true が観測されると、Earthquake=true の重要度（確からしさ）も Burglary=true の重要度も上昇する。しかし、Radio=true がさらに観測されると、Earthquake=true の重要度は上昇するが、Burglary=true の重要度は減少する。



to minimize the significance of by or as if by explanation <explains his faults, but does not try to *explain* them *away*— M. K. Spears>
http://www.merriam-webster.com/dictionary/explain%20away
To dismiss or minimize the significance of (something) by means of an explanation or excuse: There is no way to explain away my carelessness.
http://www.thefreedictionary.com/explain+away

推論 – まとめると

- 因果推論
  Causal Inferences
- 診断推論
  Diagnostic Inferences
- 原因間推論
  Intercausal Inferences
- 混合推論
  Mixed Inferences



推論 – 結局のところ

- 条件付確率を求めること

$$P(Q \mid E)=\frac{P(Q,E)}{P(E)}$$

Q と E は確率変数（または当該確率変数のある値）の集合で、重なりはない

- そのためには、結合確率が高速に計算できるとよい

Naïve な推論

BN で P(Q|E = e) を解く naïve なアルゴリズム

- 条件付確率を全て乗じ, 全変数に関する結合確率分布を求める

$$P(Q \mid E) = \frac{P(Q,E)}{P(E)} = \frac{P(Q,E)}{\sum_q P(Q=q,E)}$$

- BN 構造が使用されず, 変数が多いときこのアルゴリズムは実効的ではない
- 一般にこの推論は NP-hard

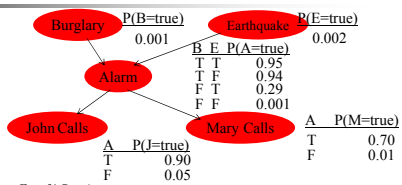
全然、BN ではない。

手計算でやってみよう

因果推論 Causal Inferences

原因から結果への推論

例: 窃盗が入ったとして, P(J=true|B=true)?



$$P(A=t \mid B=t)$$
$$= P(A=t, E=t \mid B=t) + P(A=t, E=f \mid B=t)$$
$$= P(A=t \mid E=t, B=t)P(E=t \mid B=t) + P(A \mid E=f, B=t)P(E=f \mid B=t)$$
$$= (0.95)(0.002) + (0.94)(0.998)$$
$$= 0.94$$

$$P(J \mid B) = P(J, A \mid B) + P(J, \neg A \mid B)$$
$$= P(J \mid A, B)P(A \mid B) + P(J \mid \neg A, B)P(\neg A \mid B)$$
$$= P(J \mid A)P(A \mid B) + P(J \mid \neg A)P(\neg A \mid B)$$
$$= (0.9)(0.94) + (0.05)(0.06)$$
$$= 0.85$$

略記: A とは $A=t$, $\neg A$ とは $A=f$

同様に P(M|B)=0.67 となる

手計算でやってみよう

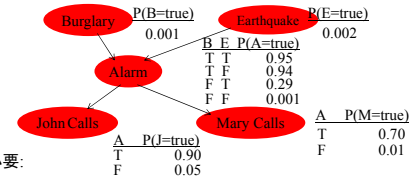
診断推論 Diagnostic Inferences

結果から原因へ.

例: John が電話をした. では P(burglary)?

$$P(B \mid J) = \frac{P(J \mid B)P(B)}{P(J)}$$

P(J) は? まず P(A) が必要:



$$P(A) = P(A,B,E) + P(A,\neg B,E) + P(A,B,\neg E) + P(A,\neg B,\neg E)$$
$$=$$
$$=$$
$$= 0.002517$$

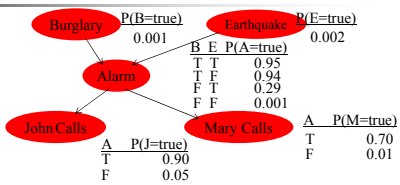
$$P(J) = P(J,A) + P(J,\neg A)$$
$$=$$
$$=$$
$$= 0.052$$

$$P(B \mid J) = \frac{(0.85)(0.001)}{(0.052)} = 0.016$$

false positives 多し

手計算でやってみよう

原因間推論 Intercausal Inferences



Explaining away effect が発生する.

Alarmが所与なら, P(B|A)=0.37.
そこに Earthquake が真という証拠を加えれば, P(B|A,E)=0.003.

すなわち, B と E は独立であるが, Aを条件とした条件付独立ではないため、一方に証拠があれば, 他方の確率分布は変化する可能性がある

$$P(B, A) =$$
$$=$$
$$= 0.00094002$$
$$P(B \mid A) = P(B, A)/P(A) = 0.3735$$
$$P(B, E, A) = P(B)P(E)(0.95) = 0.0000019$$
$$P(E, A) =$$
$$=$$
$$= 0.00058132$$
$$P(B \mid A, E) = P(B, A, E)/P(A, E) = 0.003268$$

手計算でやってみよう

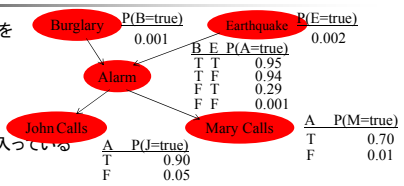
混合推論 Mixed Inferences

原因間推論と診断推論を同時に

例: “John calls” かつ “Earthquake=false”:

$P(A \mid J, \neg E) = 0.03$
$P(B \mid J, \neg E) = 0.017$

この計算はかなり込み入っている



$$P(A, J, \neg E) =$$
$$=$$
$$=$$
$$=$$
$$= 0.001742$$

$$P(\neg A, J, \neg E) =$$
$$=$$
$$=$$
$$=$$
$$= 0.04980$$

$$P(A \mid J, \neg E) = P(A, J, \neg E)/(P(A, J, \neg E) + P(\neg A, J, \neg E))$$
$$= 0.03379$$

一般化: 行うべき推論

$V_{e_1}, \ldots, V_{e_{|E|}}$

- 一部の変数について、その値が観測される
- 仮に証拠変数と呼ぶ E
- 推論 – 証拠変数以外の変数 X_i すべてについて、条件付確率 $P(X_i \mid E)$ を求める

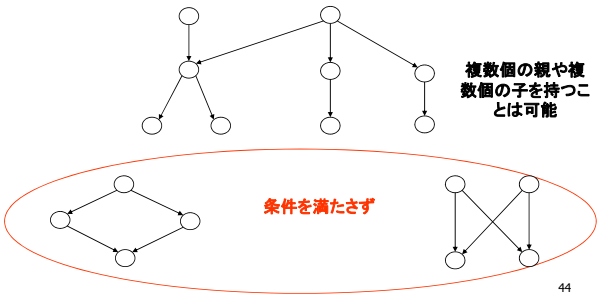
- 一般には、計算量大 – (NP-hard)
- (ある条件のもと)厳密値の計算方法がある
  - **確率伝播 belief propagation**
- 従って、近似計算も用いられる

厳密な計算方法 – 信念伝播

- Judea Pearl, 1982 による
- 単結合グラフ singly-connected graph – どのノード間にもたかだか一つの無向路しか存在しない – についてのアルゴリズム.
- (下方に、上方に)(確率に基づくある量を)送る。これをメッセージと呼ぶ。(原理的には)収束するまで繰り返す(単結合なら必ず収束する)
  - π-message: ノード X の上方にある証拠(事前分布)による量。下方に送られる
  - λ-message: ノード X の下方にある証拠(事前分布)による量。上方に送られる

以下では少し異なる定式化を行う

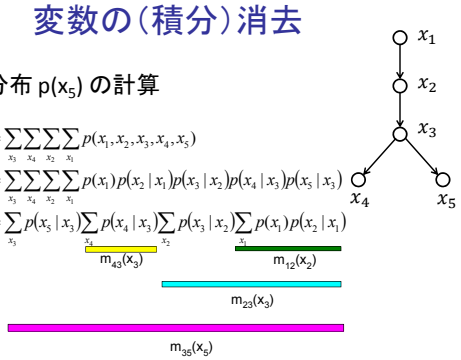
単結合グラフ (または Polytrees)



変数の(積分)消去

例: 周辺分布 $p(x_5)$ の計算

$$p(x_5) = \sum_{x_3}\sum_{x_4}\sum_{x_2}\sum_{x_1} p(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5)$$
$$= \sum_{x_3}\sum_{x_4}\sum_{x_2}\sum_{x_1} p(x_1)p(x_2\mid x_1)p(x_3\mid x_2)p(x_4\mid x_3)p(x_5\mid x_3)$$
$$= \sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)\sum_{x_4} p(x_4\mid x_3)\sum_{x_2} p(x_3\mid x_2)\sum_{x_1} p(x_1)p(x_2\mid x_1)$$



変数消去の順序は: 1, 2, 4, 3

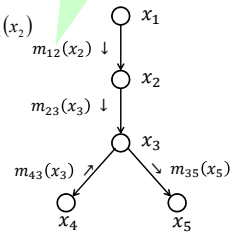
メッセージ伝播

$m_{ij}(x_j)$: i から j へのメッセージと呼ぶ

$m_{12}(x_2) = \sum_{x_1} p(x_2\mid x_1)p(x_1)$

i は総和をとって消去する変数, j はそれ以外

$$p(x_5) = \sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)\sum_{x_4} p(x_4\mid x_3)\sum_{x_2} p(x_3\mid x_2)m_{12}(x_2)$$
$$= \sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)\sum_{x_4} p(x_4\mid x_3)m_{23}(x_3)$$
$$= \sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)m_{23}(x_3)\sum_{x_4} p(x_4\mid x_3)$$
$$= \sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)m_{23}(x_3)m_{43}(x_3)$$
$$= m_{35}(x_5)$$



消去順序に依存することに注意

信念伝播 (Pearl, 1982)

$$m_{ij}(x_j) \leftarrow \sum_{x_i} \psi_{ij}(x_i,x_j) \prod_{x_k\in N(x_i)\setminus x_j} m_{ki}(x_i)$$

i: メッセージ発信元

j: メッセージ送信先

N(i): i の近傍

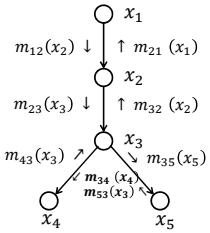
N(i)¥j: j を除く、i の近傍

例

$$\sum_{x_3} p(x_5\mid x_3)m_{23}(x_3)m_{43}(x_3)$$
$$m_{35}(x_5)$$

周辺分布は:

$$p(x_i) \propto \prod_{x_k\in N(x_i)} m_{ki}(x_i)$$



但し、Pearl 1982 とは定式化が少し異なる

信念伝播 (Pearl, 1982)

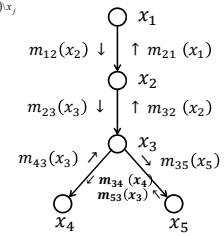
$$m_{ij}(x_j) \leftarrow \sum_{x_i} \psi_{ij}(x_i,x_j) \prod_{x_k\in N(x_i)\setminus x_j} m_{ki}(x_i)$$

i: メッセージ発信元

j: メッセージ送信先

- (無向な木とした)葉 i から開始 (葉 = エッジが一つのノード)

$N(x_i)\setminus\{x_j\} = \phi$



- 木構造から、各ノード i は、メッセージを j に送る前にすべての $N(x_i)\setminus\{x_j\}$ からメッセージを集めることができる

確率伝播（和積） 一般化

和積（sum-product）更新式

$$m_{ij}(x_j) \leftarrow \alpha \sum_{x_i} \psi_{ij}(x_i, x_j) m_{ii}(x_i) \prod_{x_k \in N(x_i) \setminus x_j} m_{ki}(x_i)$$

$$b_i(x_i) \leftarrow \alpha\, m_{ii}(x_i) \prod_{x_k \in N(x_i)} m_{ki}(x_i)$$

ただし、 αは正規化定数を表し $N(x_i) \setminus x_j$ は x_i の x_j を除く近傍を表す

$m_{ii}(x_i) = m_{ii}(x_i, y_i)$は、非観測変数 x_i から観測変数 y_iへのメッセージを表す

49

確率伝播（最大-積）

最大-積（max-product）更新式

$$m_{ij}(x_j) \leftarrow \alpha \max_{x_i} \Psi_{ij}(x_i, x_j) m_{ii}(x_i) \prod_{x_k \in N(x_i) \setminus x_j} m_{ki}(x_i)$$

$$b_i(x_i) \leftarrow \alpha\, m_{ii}(x_i) \prod_{x_k \in N(x_i)} m_{ki}(x_i)$$

ただし、 αは正規化定数を表し $N(x_i) \setminus x_j$ は x_i の x_j を除く近傍を表す

$m_{ii}(x_i) = m_{ii}(x_i, y_i)$は、非観測変数 x_i から観測変数 y_iへのメッセージを表す

50

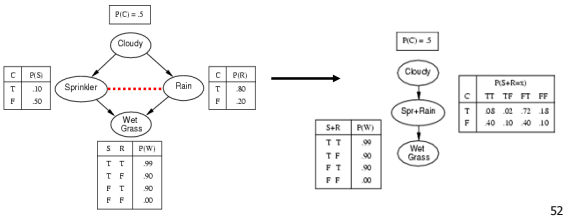
複雑度

- 単結合グラフ（polytree）上では, BP アルゴリズムは収束する。収束速度はグラフの直径に比例する – 高々線形
- 各ノードごとの作業は CPT のサイズに比例する
- 従って BP の計算量はベイジアンネット中のパラメータ数に対し線形である
- 一般のベイジアンネットワークについては
  - 厳密な推論は NP-hard
  - 近似推論も（まともな近似は） NP-hard

51

より一般のグラフでは

- 信念伝播法が正しい値に収束するには、グラフが単結合でなければならない
- 一般的なグラフに対しては、それを junction tree に変換してから適用する方法が考えられている
- ただし、計算複雑度は、変換の結果発生するクラスター数の指数オーダーである
  → もし最適な junction tree を見出そうとすると、それは NP-hard



52

近似アルゴリズム

- なぜ?
  - ループを含むグラフに対して正確な計算を行おうとすると、指数関数時間かかるため
  - また、連続分布を考えた場合、非ガウスであると、message は閉じた形式では表現できないため
- どうやって?
  - 決定的な近似: loopy BP, 平均場近似（変分ベイズ）等
  - 統計的近似: MCMC (ギッブスサンプラー), 等

- アルゴリズムにより、速度・精度のトレードオフがある（当然！）

53

ランダムサンプリング Random Sampling

- For i = 1 to n
  1. X_i の親ノード($X_{p(i,1)}$, …, $X_{p(i,n)}$) を見つける
  2. 当該親ノードにランダムに（このアルゴリズムで）与えられた変数値を読み出す
  3. 次の値を表から読み出す
     $P(X_i \mid X_{p(i,1)} = x_{p(i,1)}, \ldots, X_{p(i,n)} = x_{p(i,n)})$
  4. この確率に従い x_i の値をランダムに設定する

54

確率的シミュレーション Stochastic Simulation

- 知りたいのは P(Q = q| E = e)
- ランダムサンプリングを大量に行い次の個数を数える
  - N_c: E = e となるサンプル数
  - N_s: Q = q かつ E = e となるサンプル数
  - N : ランダムサンプルの総数
- N が充分大きければ
  - N_c / N は P(E = e) の良い推定値
  - N_s / N は P(Q = q, E = e) の良い推定値
  - N_s / N_c は従って P(Q = q | E = e) の良い推定値

補足: 連続変数値

- 条件付確率表を考える場合は、離散変数を仮定している
- 連続値変数に対しては、例えば、ガウス分布を仮定する。その場合、平均値と分散を用いることになる
- しかし、基本的には、離散変数を用いる. 実際問題として、連続値であっても離散化することが多いからである. とはいえ、離散化のよしあしが結果に大きく影響するので、簡単ではない.

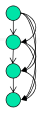
BNの学習(構築)

- 入出力：
  - 入力: 訓練データと事前知識
  - 出力: ベイジアンネットワーク
    - グラフとパラメータ
- 事前知識：
  - 最善(期待できない)：ネットワーク構造
  - 変数間の依存関係
  - 事前分布

場合分け

	構造は既知	**構造が未知**
完全データ	パラメータの統計的推測 (方程式)	構造を含めて離散最適化 (探索)
不完全データ	パラメータ最適化 (EM, 最急降下,…)	両方 (かなり大変,…)

構築

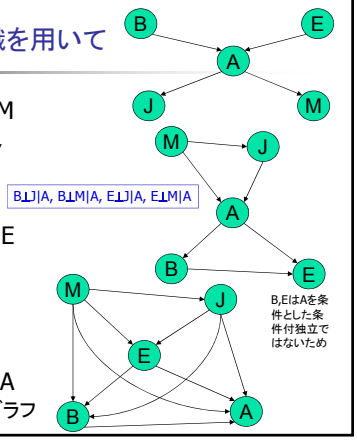


BN を構築する手続き:

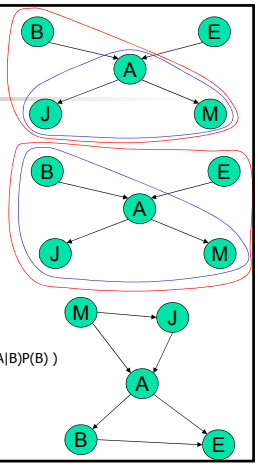
- 適用領域を記述する変数集合を選ぶ
- 変数の順序を定める
- 空のネットワークから開始し、変数をネットワークに、指定した順序に従い、一個ずつ付加していく
- i=1 から順に下記を行う
  - 第 i 番目の変数 X_i の付加：
    - すでにネットワーク中にある変数 (X_1, …,X_{i-1}) の中の変数から $pa(X_i)$ を
$P(X_i \mid X_1, \ldots, X_{i-1}) = P(X_i \mid pa(X_i))$
となるように定める
      - 領域知識を用いる
      - データから判断する
    - 有向弧を、$pa(X_i)$ 中の各変数から X_i に結ぶ

例: 領域知識を用いて

- 順序: B, E, A, J, M
  - pa(B)=pa(E)={},
pa(A)={B,E},
pa(J)={A},
pa(M)={A}
- 順序: M, J, A, B, E
  - pa(M)={},
pa(J)={M},
pa(A)={M,J},
pa(B)={A},
pa(E)={A,B}
- 順序: M, J, E, B, A
  - 完全に結合したグラフ



例: 説明



- 順序: M, J, A, B, E

P(J|M). 簡略化できず
P(A|M,J). 簡略化できず

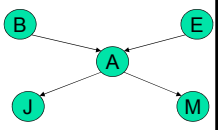
P(B|M,J,A)
= P(M,J,A,B) / P(M,J,A)
= P(J|A)P(M|A)P(A|B)P(B) / (P(M|A)P(J|A)P(A))
= P(A,B) / P(A)
= P(B|A)

P(E|M,J,A,B)
= P(E,M,J,A,B) / P(M,J,A,B)
= P(J|A)P(M|A)P(A|B,E)P(B)P(E) / (P(J|A)P(M|A)P(A|B)P(B))
= P(A,B,E) / P(A,B)
= P(E|A,B)

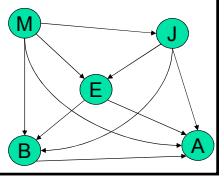
変数順序が大切！

どの変数順序を用いるか?

- 視点：確率を計算する自然な順序. M, J, E, B, A はよくない. なぜなら P(B | J, M, E) は自然でないから
- 視点：弧の個数の最小化. M, J, E, B, A は宜しくない (弧が多すぎる), 初めの方がよい
- 視点：因果関係反映, i.e. 原因が結果の前にくる. M, J, E, B, A は宜しくない. というのも M と J は A の結果なのに A の前に来ている



VS



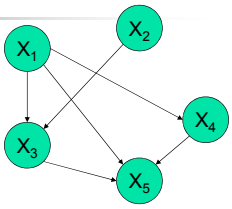
領域知識がないとき

- データから判断する。
  - $P(X_i \mid X_1, \ldots, X_{i-1}) = P(X_i \mid pa(X_i))$ となる最小の $pa(X_i)$ を見つける
  - しかし、データの偏りのため、厳密に上記等号が成立することは期待できない
  - そこで、ある程度のエラーを許容することになる。
  - しかし、どれだけ許容したらよいかが分からない。
- 様々な情報量規準を用いる
  - データだけ（多項分布を仮定する（後述）ので、実は頻度）を見ても、データ数の不足・統計的偏りのため、条件付独立性は結論できない。
  - 誤差を見込むことになる。どの程度の誤差なら、「条件付独立」と見なすかという問に対して、それによって、簡単になるなら「条件付独立」と見なそうと答える。
  - その時の、残余誤差と簡単さとの trade-off を考え、判断するために、情報量規準を用いる。
  - MDLやベイジアンネットにおけるその精密化である BD (Bayesian Dirichlet) score がよく用いられる
- 説明は「補足」に

パラメータ学習

- 例:
  - ある BN の構造が所与
  - データ集合

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
0	0	1	1	0
1	0	0	1	0
0	?	0	0	?
…	…	…	…	…



? は欠測値を表す

  - 条件付確率 $P(X_i \mid pa(X_i))$ の推定

パラメータの推定

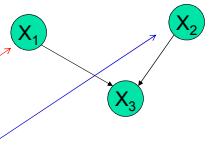
- データには欠測値がないとする
- n 変数 $X_1, \ldots, X_n$
- X_i の状態数 or 変数値の数 : $r_i = |\Omega_{X_i}|$
- X_i の親変数の状態総数: $q_i = |\Omega_{pa(X_i)}|$
- 推定すべきパラメータ:
  $\theta_{ijk} = P(X_i = j \mid pa(X_i) = k)$,
  $i = 1, \ldots, n; j = 1, \ldots, r_i; k = 1, \ldots, q_i$

簡単な例

例: BN を一つ. どの変数も2値 1, 2 をとるとする.

$\theta_{ijk} = P(X_i = j \mid pa(X_i) = k)$

親変数の状態組合せ



$\theta_{111} = P(X_1=1), \theta_{121} = P(X_1=2)$
$\theta_{211} = P(X_2=1), \theta_{221} = P(X_2=2)$

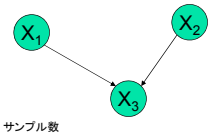
$pa(X_3) = 1 : \theta_{311} = P(X_3=1|X_1=1, X_2=1), \theta_{321} = P(X_3=2|X_1=1, X_2=1)$
$pa(X_3) = 2 : \theta_{312} = P(X_3=1|X_1=1, X_2=2), \theta_{322} = P(X_3=2|X_1=1, X_2=2)$
$pa(X_3) = 3 : \theta_{313} = P(X_3=1|X_1=2, X_2=1), \theta_{323} = P(X_3=2|X_1=2, X_2=1)$
$pa(X_3) = 4 : \theta_{314} = P(X_3=1|X_1=2, X_2=2), \theta_{323} = P(X_3=2|X_1=2, X_2=2)$

要は:簡単な例

例: BN を一つ. どの変数も2値 1, 2 をとるとする.

$\theta_{ijk}=P(X_i=j \mid pa(X_i)=k)$

親変数の状態組合せ



P(X3|X1,X2)		X1, X2			
		1,1	1,2	2,1	2,2
X3	1	θ311	θ312	θ313	θ314
	2	θ321	θ322	θ323	θ324

最尤推定

サンプル数

P(X3|X1,X2)		X1, X2			
		1,1	1,2	2,1	2,2
X3	1	3	5	7	9
	2	7	15	23	31
		10	20	30	40

P(X3|X1,X2)		X1, X2			
		1,1	1,2	2,1	2,2
X3	1	3/10	5/20	7/30	9/40
	2	7/10	15/20	23/30	31/40

67

BN におけるパラメータ推定

- 次が求まる:

$$\theta^*_{ijk}=\frac{m_{ijk}}{\sum_j m_{ijk}}$$

- 言葉でいえば,
  θ_{ijk} = P(X_i = j | pa(X_i) = k) の最尤推定量は

$$\frac{X_i=j \text{ かつ } pa(X_i)=k \text{ となる事例数}}{pa(X_i)=k \text{ となる事例数}}$$

しかし、ご存じの通り、ちょっとした問題がある。

68

BN におけるパラメータ推定

- 実は次の形がよく使われている(Laplace correction):

$$\theta^*_{ijk}=\frac{m_{ijk}+1}{\sum_j m_{ijk}+r_i}$$

- 言葉でいえば,
  θ_{ijk} = P(X_i = j | pa(X_i) = k) の最尤推定量は

$$\frac{X_i=j \text{ かつ } pa(X_i)=k \text{ となる事例数}+1}{pa(X_i)=k \text{ となる事例数}+「X_i\text{の変数値の個数}」}$$

なお、"+1" や "r_i" にはもっと一般的な形がある。
Dirichlet 分布を事前分布とすることに相当する。

69

補足

ベイジアンネットワークの学習

領域知識がない場合

70

BNの学習

BNをデータから構成する方法に2種類ある:

- 制約を発見していく方法
  - 統計的検定を行って、条件付独立な変数組を発見していく
  - これを満たす DAG を見つける
- スコア関数を用いる方法
  - DAG を比較するスコア関数を用いる,
    eg. Bayesian, BIC, MDL, MML
  - データに最もよくfitする DAG を選ぶ

注: 通常、Markov等価性(説明してありません)による制約を考える。というのも、Markov等価なDAGは統計的には区別できないからである.

71

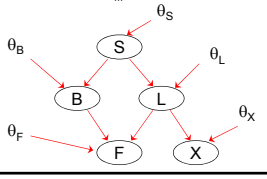
Bayes的方法(1)

(Cooper and Herskovits, 1992)

データを用いて、条件付独立性に関する統計的推定を行う
- 確率的関係をよりよく表現するモデルを探す

M - 構造を表す離散確率変数. 値 m はありうる DAG 構造.
Mの値は分布するとする. 確率分布を P(m) で表す.

Θ_m - モデル m に対応した連続ベクトル値の確率変数(パラメータ). 値 θ_m はそのパラメータ値. Θ_m の値も分布する. 確率分布を $P(\theta_m \mid m)$ で表す.



G.F. Cooper and E. Herskovits (1992)
Machine Learning, 9, 309-47

Bayes的方法(2)

訓練データ集合を D, DAG構造 m の事後確率は, D が与えられたとして:

$$P(m \mid D) = \frac{P(m)P(D \mid m)}{\sum_{m'} P(m')P(D \mid m')}$$

但し

$$P(D \mid m) = \int P(D \mid \theta_m, m)P(\theta_m \mid m)d\theta_m$$

は周辺尤度である. 例によって事前分布 P(m) が一様分布であれば

$$P(m \mid D) \propto P(D \mid m)$$

従って、尤度最大化は事後確率最大化となる.

Bayes的方法 (3)

Cooper and Herskovits (1992) によれば、周辺尤度は次の通り

$$P(D \mid m) = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{q_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ij})}{\Gamma(\alpha_{ij} + N_{ij})} \prod_{k=1}^{r_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ijk} + N_{ijk})}{\Gamma(\alpha_{ijk})}$$

n – 全ノード数
q_i – ノード X_i の親ノード達の値全部の組合せ総数
r_i – ノード(離散確率変数) X_i の値の総数
α – 事前分布である Dirichlet 分布のパラメータ(i はノード, $1 \le j \le q_i$)
N – データ数. ノードi, 親ノード値の組合せj, k番目の値

この P(D | m) は Bayesian scoring function として知られている.

G.F. Cooper and E. Herskovits (1992)
Machine Learning, 9, 309-47

計算例

次の DAG m_1 と訓練データ D を考える

データID	X	Y
1	1	1
2	1	2
3	1	1
4	2	2
5	1	1
6	2	1
7	1	1
8	2	2

P(D | m_1) は

$$P(D \mid m_1) = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{q_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ij})}{\Gamma(\alpha_{ij} + N_{ij})} \prod_{k=1}^{r_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ijk} + N_{ijk})}{\Gamma(\alpha_{ijk})}$$

Y (i=2) に対し q_i = 2 (X は2値) かつ r_i = 2 (Yは2値). j = 1 に対応する項は

X=1 Y=1 Y=2

$$\frac{\Gamma(2)}{\Gamma(2+5)} \frac{\Gamma(1+4)}{\Gamma(1)} \frac{\Gamma(1+1)}{\Gamma(1)}$$

他の項も計算すれば P(D | m_1) = 7.22 x 10^{-6}

R.E. Neapolitan, Learning Bayesian Networks (2004)

計算例 (続)

m_1 は、変数 X と Y の間に(条件付)独立性がないことを示すDAG (の Markov同値クラス)の代表と考えることができる.

m_2 を エッジがない DAG とすると P(D | m_2) = 6.75 x 10^{-6}

さらに m_1 と m_2 の事前確率は等しい、すなわち P(m_1) = P(m_2) = 0.5 とすると m_1 の事後確率は m_2 の事後確率より大きくなる.

Bayesの定理により

$$\begin{aligned} P(m_1 \mid D) &= \frac{P(D \mid m_1)P(D \mid m_1)}{P(D \mid m_1)P(D \mid m_1) + P(D \mid m_2)P(D \mid m_2)} \\ &= \frac{7.215 \times 0.5}{7.215 \times 0.5 + 6.7465 \times 0.5} \\ &= 0.517 \end{aligned}$$

探索アルゴリズムの必要性

理想的には全DAGの空間を網羅的に探索し、前述の Bayesian scoring function を最大化するDAGを見つけたい.

しかし、ノード数を大きく(ほんの少し大きく)しただけで、DAGの数は莫大なものとなる:

ノード数	DAG総数
1	1
2	3
3	25
4	543
5	29,281
10	4.2×10^{18}

様々な発見的方法が開発されている

K2 Algorithm (1)

(Cooper and Herskovits, 1992)

n 変数 $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ 間に順序があると仮定する。すなわち, j > i ならば、X_j は X_i の親にはなれないとする.

X_2 について

X_2 に親がないとしてBayesian score を求める

X_2 の親が X_1 として Bayesian score を求める. これがより大きければ X_1 から X_2へのエッジをつける.

X_iについて

X_i に親がないとして Bayesian score を求める

X_i に親が一つだとして Bayesian scoreを求める. 親がない場合より大きいscoreがあればその最大値を与える X_j からのエッジをつける.

次に第二番目の親を選んで同様のことを試みる. これをscoreが大きくならないまで続ける.

K2 Algorithm (2)

変数の順序を {X, Y, Z} とする