8.条件付き独立性検定による構造学習

電気通信大学大学院 情報システム専攻 知識処理システム講座 植野 真臣

1. ベイジアンネットワーク学習の問題

- ・前回、学習したベイジアンネットワーク学習法は厳密解と呼ばれる 手法で予測を最大化する最小マップを見つける手法である。しかし、 計算量が非常にたきすぎて数十程度のノードのネットワークしか計 算できないことが問題である。
- •D分離と条件付き独立性は数学的には一対一対応しないが、例外を の施に本作が見るようこで、変数間の条件付きないか。前から 除けばほぼ同等であると考えて、変数間の条件付き独立性を検定し ながら構造を作成する手法が昔からある。これらの手法のほうが比 較的計算量が小さいことから実用的であるともいえる。
- 本章では、条件付き独立性検定手法の学習法を紹介しよう。

2. 因果のフェイスフルの仮定

条件付き独立性検定による構造学習では、因果のフェイスフルネス の仮定が前提となる.フェイスフルは以下のように定義される. • 定義

ベイジアン・ネットワーク(G, O)において、条件付き確率集合Oをもちい た2ノードの親ノードを所与としたときの確率分布の条件付き独立 性とグラフGでの条件付き独立性が対応しているとき.(G, 0)はフェイ スフル(faithful)であるという.

この仮定は一般的には成り立たない場合があることは授業で学んだ.

3. PCアルゴリズム (Spirts, Glymour, Scheines, and Tillman 2010, Glymour and Cooper 1999) 最も代表的な古典的条件付き独立性検定による構造学習法である. このアルゴリズムは、SGSアルゴリズム(Spirts and Glymour 1991)とICアルゴリズム (Verma and Pearl 1990) を発展させて開発されている. 先ずPCアルゴリズムでは、行2に示されるようにすべてのノード間に辺を引いた完全グ ラフから開始する。 CIテストの条件部Cは,変数数t=0,つまり, 空集合より始まり、これを0次の条件付き独立性テスト(zero-order CI test)と呼ぶ. 順次、 t=1, 2, …と増やし, 1次(1st order), 2次(2nd order), …の条件付き独立性テストと呼ぶ. 定理50に従い、条件付き独立な変数間を早く発見し、その間の辺を完全グラフから順 次消去していく.

t-N-2まで以上の処理を行うと、条件付き独立性テストのフェーズが終了し、無向グラフGが得られる。このあと行15より、G中の辺に方向づけを行うオリエンテーションフェーズを行う。

	りそれ以外で0を返す条件付き独立テスト関数
$F \mu = j \times \Delta 32$ PC $F \mu = j \times \Delta (A)$	10. end for
 Input: N ノード変数, データ X 	11. end for
 Output: ネットワーク構造 G 	12. end for
main	13. $t \leftarrow t + 1$
1. $\mathcal{I} = \mathbb{F} \oplus \mathbb{C} \leftarrow \phi$	14. end while
2. 初期グラフ $G \leftarrow 無向完全グラフ K_N$	 for G で X - Y - Z を形成する全ての 3 ノード X, Y, Z do
3. while $t < N - 2$ do	16. if X と Z が隣接せず, かつ $CI(X, Z Y) = 0$ then $X \rightarrow Y \leftarrow Z$
4. $t \leftarrow 0$	17. end for
5. for 各ノード X_i do	18. while 方向づけされていないリンクがない do
6. for X_i 以外の各ノード X_j do	19. $if X \rightarrow Y - Z$ かつ X と Z が隣接しない then $X \rightarrow Z \rightarrow Y$
 for X_i,X_jの共通隣接ノード集合中のt 個の全てのノードの組み合 	20. if $X \rightarrow Y \rightarrow Z$ かつ $X \ge Z$ が隣接している then $X \rightarrow Z$
わせ do	21. $if X \rightarrow Y \leftarrow Z$ かつ X と Z が隣接していない, $A - D - C$ かつリ
8. $C \leftarrow X_i, X_j$ の共通隣接ノード集合中の t 個のノードの組み合わせ	$\nu \rho B - D$ が存在 then $D \rightarrow B$
9. if $CI(X_i, X_j C) = 1$ then G からリンク (X_i, X_i) を削除 :ただし、	22. end while
$CI(X_i, X_j C)$ は、Cを所与として $X_i \ge X_j$ が条件付き独立の時1とな	23. return (G) を出力



アルゴリズムは、二変数間の条件付き独立関数 $CI(X_i, X_j \mid C)$ を必要とする. 条件付き独立テストは複数考えられるが、Spirtes, Glymour and Scheines(2000) にあるように G² テストを用いることが一般的である. 今, ノード集合 C が c 番目の値をとるとき、二変数が $X_i = a, X_j = b$ の値 をとった条件付き頻度を S^{abc}_{ijC} とし、同様に S^{ac}_{iC} , S^{bc}_{jC} , S^{c}_{C} を定義する. このとき, G² 統計は, $G^2 \equiv 2 \sum_{a,b,c} S^{abc}_{ijC} \ln \frac{S^{abc}_{ijC}S^c_C}{S^{ac}_{iC}S^{bc}_{iC}}$ (7.1)として定義される. G^2 統計は適当な自由度を持つ χ^2 分布に漸近的に従う. 欠測値がないことを仮定すると、自由度は

 $df = (| D(X_i) | -1)(| D(X_j) | -1) \prod | D(C_l) |$

となる. ここで, |D(X)| はデータに現れる X の値の重複しない数 (distinct values) を示す.







Max-Min ヒューリスティ	ィック: ターゲット・ノード T の PC _T の候補に, 所
与となる条件変数を	T との関連が最小となるように選択した変数のうち,
関連が最大になる変響	数を加える.
直感的には, X と T の条件	+付き独立テストにおいて, どのように努力して条件
の変数集合 Z を選択しても	o X と T の連関が高いものは,優先して X と T 問
の辺を加えていけばよい,	という考え方である.
具体的には, このヒュー	リスティックは以下のように定義できる。
定義 92 X と T の条件付	き独立テストで、どのように努力して条件の変数集
合 <i>Z</i> を選択して	
$MinAssoc(X, T \mid Z$	$X = \min_{S \subseteq Z} Assoc(X, T \mid S)$
このヒューリステックは	定理 50 における「一つでも $I_P(X, Y \mid Z)$ となる Z
を見つければ X と Y の間	には辺が引かれない」という性質を利用している.
また, 関連度は, G ² 統語	計の p 値の逆数を用いている.

アルゴリズム 33 MMPC アルゴリズム:MMPC(T,X) Input: Nノード変数。ターゲット・ノード T, データ X

Output: ターゲット・ノード T の親ノード集合と子ノード集合

- main 1. % 7 x - X 1: forward
- 2. $CPC = \emptyset$
- 3. repeat
- 4. < F, assocF >= MaxMinHeuristic(T, CPC)
- 5. if $assocF \neq 0$ then
- 6. $CPC = CPC \cup F$
- 7. end if

- 8. until CPC has not changed 9. % フェーズ 2: Backward
- 10. for all $X \in CPC$ do
- 11. if $\exists S \subseteq CPC$, s.t. $CI(X, T \mid S) = 1$ then xを削除 12. end if
- 13. end for
- 14. return CPC
- 15. end procedure
- 16. procedure MaxMinHeuristic(T, CPC)
- ・Input: ターゲット・ノード T, CPC
- Output: 最小関連度を最大にするノード
- 17. $assocF = \max_{X \in V} MinAssoc(X, T \mid CPC)$
- $\begin{array}{ll} \text{is user} &= \underset{X \in V}{\max} \ \text{MinAssoc}(X, T \mid CPC) \\ \text{is.} & F = \arg\max_{X \in V} \ \text{MinAssoc}(X, T \mid CPC) \\ \text{is.} & \text{return} < F, assocF > \end{array}$
- 20. end procedure





アルゴリズム 34 改良 MMPC アルゴリズム:RMMPC(T,X) • Input: $N \not - F \oplus gg$ 、 $\beta - f' \neg F \cdot J - F T$, $f - \beta X$ • Output: $\beta - f' \neg F \cdot J - F T$ の観ノーF集合と子ノーF集合 main 1. CPC = MMPC(T,X)2. for $C \in CPC$ do 3. if $T \in MMPC(C,X)$ でない then 9. return CPC10. end procedure

アルゴリズム 35 MMHC アルゴリズム:MMHC(X) • Input: $N / - F 突然 V = \{X_1, ..., X_N\}, \quad \vec{\tau} - \beta X$ • Output: $\neg (I \vee T) \vee \hat{\pi} \supset F \neg (T \vee T) \vee \hat{\pi} \supset F \vee (T \vee T) \vee \hat{\pi} \supset F \vee (T \vee T) \vee$

11. end for

12. return G = (V, E)13. end procedure

5. RAI

PCアルゴリズムや MMHCアルゴリズムでは,N-2個のノードを所与とした 条件付き独立性テストまでを繰り返し、ペイジアン・ネットワークのマルコフ・ グラフを得たあとに辺の方向づけを行う。しかし、高次の条件付き独立性テスト (例えば,N-2個のノードを所与とした場合)は、低次のそれにくらべて信頼性が 非常に低くなることが問題である。従来の手法では、信頼性の低い条件付きテス トの結果も高いものと同等に信頼し、辺の方向づけを行うので方向づけの順序に よっては結果は非常に不安定になるという問題がある。そこで、信頼性の高い低 次の条件付き独立性テストから辺の方向づけを行うことにより、学習の信頼性を 高めようという手法が提案されている。それが RAIアルゴリズム (Recursive Autonomy Identification algorithm: Yeheskel and Lerner(2009))である。

 $\mathbf{Pa}(X,G)$ をグラフ g に基づく変数 X の親ノード集合, $\mathbf{Pa}_p(X,G)$ をグラ フ g に基づく変数 X の潜在的な親ノード集合 (後の学習で変化する可能性があ る), $\mathbf{Adj}(X,G)$, $\mathbf{Ch}(X,G)$ をそれぞれ, グラフ G に基づく変数 X の隣接ノー ド集合と子ノード集合とする. ここで, $\mathbf{Pa}_p(X,G) = \mathbf{Adj}(X,G) \setminus \mathbf{Ch}(X,G)$ となる. 定義 93 $V' \subset V$ and $E' \subset E$ とする. このとき, $Y \in V'$ かつ $\forall X \in V'$ で, $Y \in \operatorname{Pa}_{\mathbf{p}}(X,G)$ もしくは $Y \in /\operatorname{Adj}(X,G)$ のとき、ノード $Y \in G = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$

はグラフG' = (V', E')の外生因果 (exogenous cause) である.

定義 94 DAG G = (V,E) において、 $\forall X \in \mathbf{V^A}$ かつ $\operatorname{Pa}_{\mathbf{p}}(X,G) \subset \{\mathbf{V^A} \cup$ V_{ex} となるとき、 $V^{A} \subset V$ かつ $E^{A} \subset E$ となる 部分グラフ $G^{A} = (V^{A}, E^{A})$ は, G^A の外生因果の部分集合 $\mathbf{V}_{\mathbf{ex}} \subset \mathbf{V}$ を所与として,Gにおいて自律的 (autonomous) であるという. もし、Vex が空集合のとき、この部分集合を(完 全な:completely) 自律的部分構造 (autonomous sub-structure) という.



7ルゴリズム 36 RAI アルゴリズム:RAI(X)

- Input: $N / ド変数 V = \{X_1, \dots, X_N\}$, データX
- Output: ペイジアン・ネットワーク構造 G
- main $G_{out} = RAI[Ns, G_{start}(V_{start}, E_{start}), G_{ex}(V_{ex}, E_{ex}), G_{all}]$
- 1. if G_{stort}の全てのノードがNs+1より少ない潜在的な親ノード数を持
- \supset then $G_{out} = G_{oll}$ return
- 2. for $Y \in G_{start}$, $X \in G_{ex}$ do
- 3. if $X \perp Y \mid S$ となるとき、 $\exists S \subset Pa_p(Y, G_{start}) \cup Pa(Y, G_{ex})$ かつ
- $|\mathbf{S}| = Ns$ then X, Y間の辺を G_{all} から削除
- 4. end for
- 5. オリエンテーション・ルールに従い、G_{start} 中の辺を方向付け
- 6. for $Y \in G_{start}$, $X \in G_{start}$ do
- 8. end for 9. オリエンテーション・ルールに従い, G_{start} 中の辺を方向付け 10. 最も低次のトポロジカル・オーダーを持つノード集合を子孫部分構造 G_L としてクループ化 逐次 G_{start} から G_D を削除し、その結果の無向グラフを先祖部分構造 G_{A_1}, \dots, G_{A_k} として定義 12. for i = 1 to k do

かつ $|\mathbf{S}| = Ns$ then $X, Y 間の辺を G_{all} \ge G_{start}$ から削除

- 13. Call $RAI[Ns + 1, G_{A_t}, G_{ex}, G_{all}]$ 11. end for
- ・ 15. $G_{ex_D} = \{G_{A_1}, \dots, G_{A_k}, G_{ex}\}$ を G_D への外生因果集合とする
- 16. Call $\mathbf{RAI}[Ns + 1, G_D, G_{ex_D}, G_{all}]$ 17. return $G_{out} = G_{all}$
- 18. end procedure



































実	淚							
 比較 	•比較対象: MMPC, RAI, PC							
•G検	•G 検定:有意水準を0.01 から0.95 まで変化							
・10,000 件のサンプルを10 セットずつ学習								
・有意水準 0.05 で SS 学習後, SS 内で exact 学習 (宇都さん実装の DP [Malone+11])								
	ネット	変数	辺	親変数	変数			
	ワーク			最大	状態数			
	alarm	37	46	4	2-4			
	insurance	27	52	3	2-5			
	water	32	66	5	3-4	1		
	win95pts	76	112	7	2-2			
2014年11月7日(金)		• 40						

























9





