# 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、 計算量が非常に大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 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0をもちいた2ノード間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, O)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。

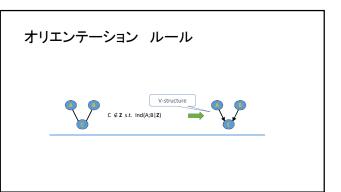
先ずPCアルゴリズムでは,行2に示されるようにすべてのノード間に辺を引いた完全グラフから開始する.

CIテストの条件部Clt,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中の辺に方向つ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 θを返す条件付き独立テスト関数 アルゴリズム 32 PC アルゴリズム:PC(X) 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 $t \leftarrow t + 1$ 13. ノード集合 C ← φ 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 $X \ge Z$ が隣接せず、かつ $CI(X, Z \mid Y) = 0$ then $X \to Y \leftarrow Z$ $t \leftarrow 0$ 17. end for for 各ノード X。 do 18. while 方向づけされていないリンクがない do for X<sub>i</sub> 以外の各ノード X<sub>i</sub> do 19. if $X \to Y - Z$ かつ $X \succeq Z$ が隣接しない then $X \to Z \to Y$ 21. if $X \rightarrow Y \leftarrow Z$ かつ $X \succeq Z$ が隣接していない、A - D - C かつ S8. $C \leftarrow X_i, X_j$ の共通隣接ノード集合中の t 個のノードの組み合わせ ンク B-D が存在 then $D\to B$ 9. if $CI(X_i,X_j\mid C)=1$ then $\mathcal G$ からリンク $(X_i,X_i)$ を削除 :ただし、22. end while $CI(X_i, X_j \mid C)$ は、C を所与として $X_i$ と $X_j$ 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 $G^2$  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、 $G^2$ 統計は、

$$G^2 \equiv 2 \sum_s S_{ijC}^{abc} \ln \frac{S_{ijC}^{abc} S_C^c}{S_{iC}^{ac} S_{iC}^{bc}}$$
(7.1)

として定義される.  $G^2$  統計は適当な自由度を持つ  $\chi^2$  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

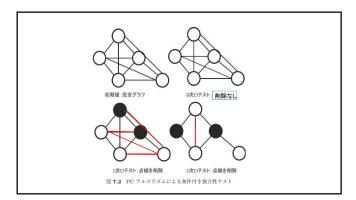
$$d\!f = (\mid D(X_i) \mid -1)(\mid D(X_j) \mid -1) \ \prod \ \mid D(C_l) \mid$$

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

例 48 図 7.1 のベイジアン・ネットワークを考えよう。PCアルゴリズムにお ける条件付き独立性テストは、図 7.2 の流れで実施される.



図 7.1 ベイジアン・ネットワーク



## 4. MMHCアルゴリズム

PCアルゴリズムは条件付き独立テストの数を劇的に減少させるが、それで もまだ莫大な計算が必要である。そこで、強力なヒューリスティックを用いて ちまた吴人な町事か必要である。そこで、張力なビューリスティックを用いて 探索を行う MMHC アルゴリズム (Max-Min Hill Climbing algorithm) が提 案されている (Tsamardinos, Brown, and Aliferis 2006). MMHCアルゴリ ズムは、1. 辺の方向づけをする前に MMPC/Max-Min Parents and Children を用いてターゲット・ノードの隣接ノード集合(スケルトンと呼ばれる)を推 定するフェーズ、2. スケルトンを基に辺の方向づけを貪欲法(greedy search)で 探索するフェーズ、に分類される。 今、ターゲットとなるノード変数をTとし、その根集合と子集合を $PC_T$ と書

く、もし、同じ変数集合を持つベイジアン・ネットワーク  $(G,\Theta)$  と  $(G',\Theta)$  が同 じ確率分布を持ちフェイスフルであるとき、すべての T について、 $PC_T^G = PC_T^{GT}$ となる (Verma and Pearl 1990). 従って、フェイスフルなペイジアン・ネットワータでは、どのようなターヴット・ノードアに対しても一つの同時確率分析に対応する  $PC_T$  はただ一つに決定する。 MMPCは、ターグット・ノードアについて動作し、データを読み込むこと

によりTの隣接ノード集合(T から向かうノード集合とT に向かうノード集 合)  $PC_T$  を同定し、返すアルゴリズムである。

Max-Min ヒューリスティック: 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数を加える.

直感的には、 $X \ge T$  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 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 Z を選択して

 $MinAssoc(X,T\mid Z) = \min_{S\subseteq Z} Assoc(X,T\mid S)$ 

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. % フェーズ 1: forward
- $2. \qquad CPC = \emptyset$
- 3. repeat
- 4.  $\langle F, assocF \rangle = MaxMinHeuristic(T, CPC)$
- 5. if  $assocF \neq 0$  then
- $6. \quad CPC = CPC \cup F$

8. until CPC has not changed

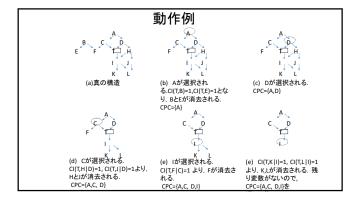
- 9. % フェーズ 2: Backward
- 10. for all  $X \in CPC$  do

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

 $16. \ \ \mathbf{procedure} \ MaxMinHeuristic(T,CPC)$ · 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

- $17. \quad assocF = \max_{X \in V} MinAssoc(X, T \mid CPC)$
- 18.  $F = \underset{X \in V}{\operatorname{arg MinAssoc}}(X, T \mid CPC)$ 19.  $\operatorname{return} < F, assocF >$
- 20. end procedure



アルゴリズム 34 改良  $\mathbf{MMPC}$  アルゴリズム: $\mathbf{RMMPC}(T,X)$ 

- Input: N ノード変数、ターゲット・ノード T、データ  ${\bf X}$
- 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
- $1. \quad CPC = MMPC(T,X)$
- 2. for  $C \in CPC$  do
- 3. if  $T \in MMPC(C,X)$  でない then

4.  $CPC = CPC \setminus C$ 

- 5. if  $assocF \neq 0$  then
- $6. \quad CPC = CPC \cup F$ 
  - . 010 0100
- 7. end if
- 8. end for
- 9. return CPC
- 10. end procedure

アルゴリズム 35 MMHC アルゴリズム:MMHC(X)

- Input:  $N \supset -$  F  $g \otimes V = \{X_1, \dots, X_N\}, \ \vec{\tau} \beta \ \mathbf{X}$
- Output: ベイジアン・ネットワーク構造 G

nain

- 1.  $E = \emptyset$
- 2. for  $X_i \in \{X_1, \dots, X_N\}$  do
- 3.  $PC_{X_i} = MMPC(X_i, X)$
- 4. end for
- 5. for  $X_i \in V = \{X_1, \dots, X_N\}$  do
- 6. for  $X_j \in PC_{X_i}$  do
- 7. 3 構造  $X_j \to X_i, \, X_j \leftarrow X_i, \, X_j \perp X_i$  の BDeu スコアを計算
- 8. if  $X_j \to X_i$  が BDeu スコアの値が最も高い
- 9. then  $X_j \rightarrow X_i$  を E に追加 10. end for
- 10. end for
- 11. end for
- 12. return G = (V, E)13. end procedure

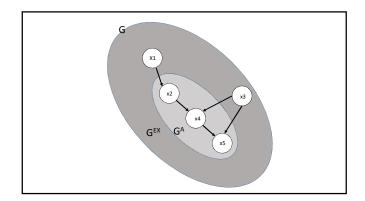
## 5. RAI

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、ベイジアン・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: Yehezkel 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  $\mathbf{V}' \subset \mathbf{V}$  and  $\mathbf{E}' \subset \mathbf{E}$  とする。このとき、 $Y \in /\mathbf{V}'$  かつ  $\forall X \in \mathbf{V}'$  で、 $Y \in \mathbf{Pa}_{\mathbf{p}}(X,G)$  もしくは  $Y \in /\mathbf{Adj}(X,G)$  のとき、ノード  $Y \in G = (\mathbf{V},\mathbf{E})$  はグラフ  $G' = (\mathbf{V}',\mathbf{E}')$  の外生因果 (exogenous cause) である。

定義 94 DAGG = (V, E) において、 $\forall X \in V^A$  かつ  $Pa_p(X, G) \subset \{V^A \cup V_{ex}\}$  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  $V_{ex} \subset V$  を所与として、G において**自律的** (autonomous) であるという。もし、 $V_{ex}$  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。



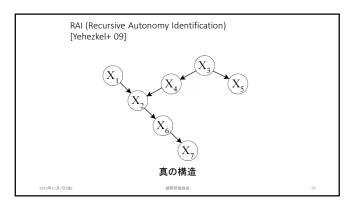
#### アルゴリズム 36 RAIアルゴリズム:RAI(X)

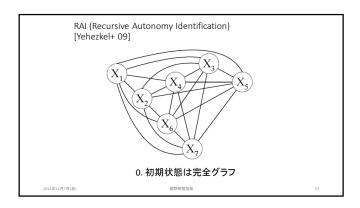
- Input: N ノード変数  $V = \{X_1, \dots, X_N\}$ , データ X
- Output: ベイジアン・ネットワーク構造 G

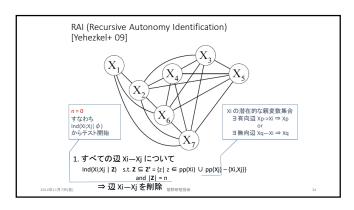
 $\label{eq:main} \begin{aligned} & \text{main } G_{out} = \text{RAI}[Ns, G_{start}(\mathbf{V}_{start}, \mathbf{E}_{start}), G_{ex}(\mathbf{V}_{ex}, \mathbf{E}_{ex}), G_{all}] \end{aligned}$ 

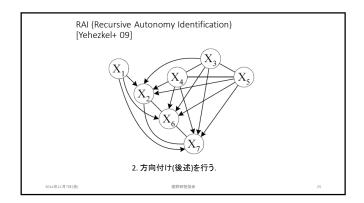
- if G<sub>stort</sub> の全てのノードが Ns+1 より少ない潜在的な親ノード数を持 つ then G<sub>out</sub> = G<sub>olf</sub> return
- 2. for  $Y \in G_{start}$ ,  $X \in G_{ex}$  do
- 3. if  $X \perp Y \mid S$  となるとき、 $\exists S \in \operatorname{Pa}_p(Y,G_{start}) \cup \operatorname{Pa}(Y,G_{ex})$  かつ
- $|\mathbf{S}| = Ns$  then 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<sub>start</sub> 中の辺を方向付け
- πηπητ-νων λν-λιεξε
   for Y ∈ G<sub>start</sub>, X ∈ G<sub>start</sub> do
- 7. if  $X \perp Y \mid S$  となるとき、 $\exists S \subset Pa(Y,G_{ex}) \cup Pa_p(Y,G_{start}) \setminus X$

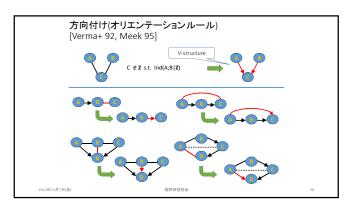
- かつ  $|\mathbf{S}| = Ns$  then X,Y 間の辺を  $G_{all}$  と  $G_{start}$  から削除
- 8. end for
- 9. オリエンテーション・ルールに従い、 $G_{start}$ 中の辺を方向付け
- 10. 最も低次のトポロジカル・オーダーを持つノード集合を子孫部分構造  $G_E$
- としてクループ化  $11. \enskip 遂次 $G_{start}$ から $G_D$ を削除し、その結果の無向グラフを先祖郎分構造$
- $G_{A_1},...,G_{A_k}$  として定義 12. for i=1 to k do
- 12. for i = 1 to k do 13. Call  $RAI[Ns + 1, G_{A_t}, G_{ex}, G_{all}]$
- 13. Call R
- 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
- $16. \quad Call \; \mathbf{RAI}[Ns+1, G_D, G_{ex_D}, G_{all}]$
- 17. return  $G_{out} = G_{all}$
- 18. end procedure

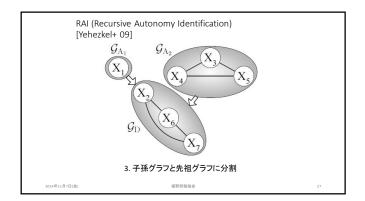


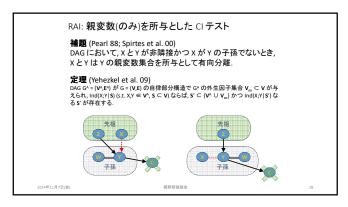


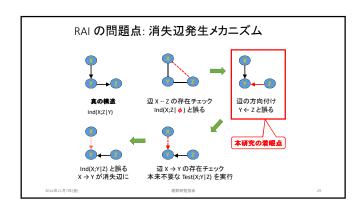


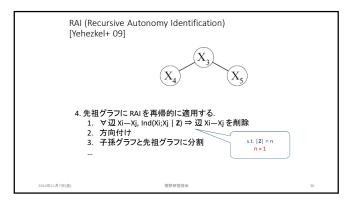


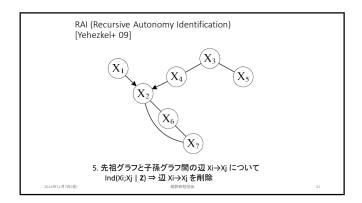


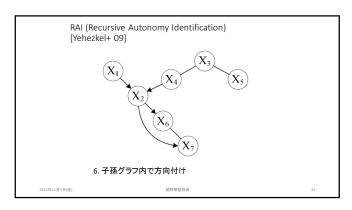


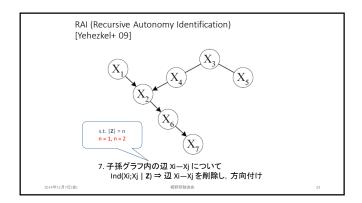


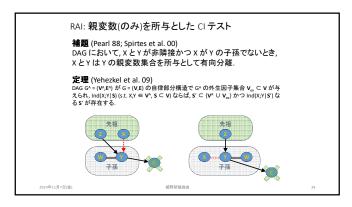


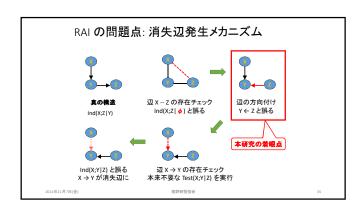


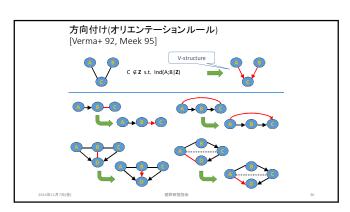


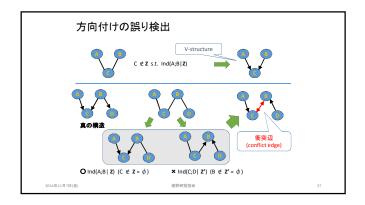










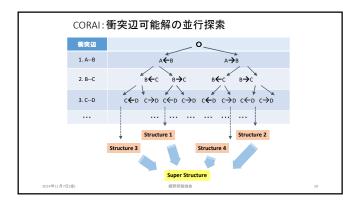


CORAI (Concurrently Oriented RAI) 提案アルゴリズム

考え方:衝突辺の各方向付けを可能な限り探 索,結果を合成することで消失辺を抑制する

#### アルゴリズム

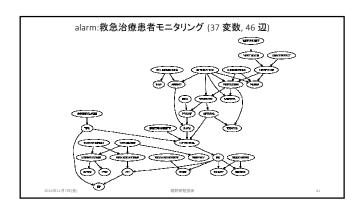
- 1. 衝突辺解決ルールの異なる複数の RAI を並行実 行する.
  ✓ 各 RAI は, 衝突辺ごとに向きをランダムに固定する.
- 2. 各 RAI の辺集合の和をスーパーストラクチャとして

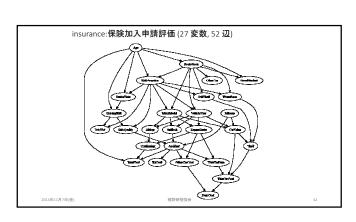


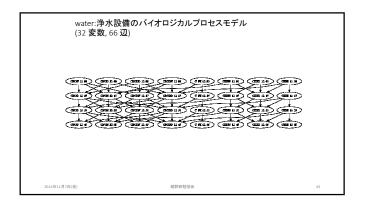
## 実験

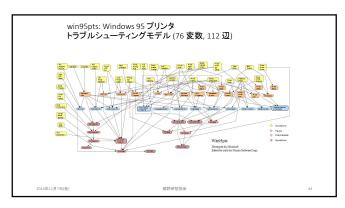
- 比較対象: MMPC, RAI, PC
- G 検定: 有意水準を 0.01 から 0.95 まで変化
- ・10,000 件のサンプルを 10 セットずつ学習
- 有意水準 0.05 で SS 学習後, SS 内で exact 学習 (宇都さん実装の DP [Malone+11])

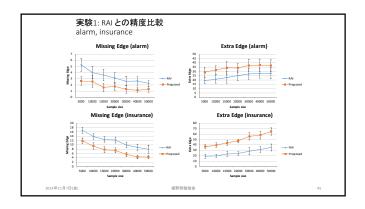
ネット ワーク	変数	辺	親変数 最大	変数 状態数
alarm	37	46	4	2-4
insurance	27	52	3	2-5
water	32	66	5	3-4
win95pts	76	112	7	2-2

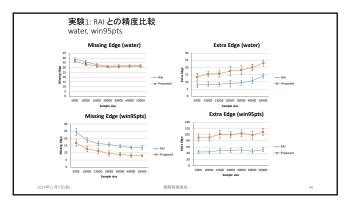








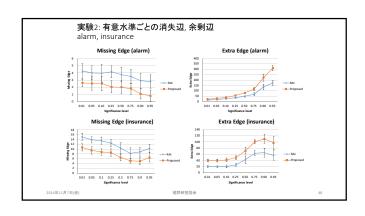


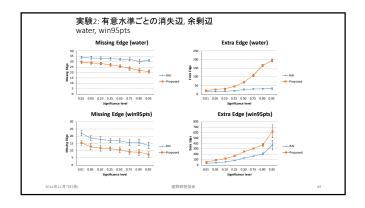


## 実験2:有意水準ごとの消失辺, 余剰辺

- Q: 既存手法(RAI)でも検定の有意水準を上げれば消失辺は減るのでは?
- ・有意水準を 0.01 から 0.95 まで変化
- 10,000 件のサンプルを各 20 セット学習し, 消失辺と余剰辺の数を比

2014年11月7日(中) 結野研修性中 47





## 結論

- 1. 少ない CI テストで高精度とされる RAI [Yehezkel+09] の 消失辺発生メカニズムを示した.
- 消失辺の原因となる方向付けの誤りを衝突辺の発生に より検知できることを示した。
- 消失辺を、衝突辺の可能解並行探索により抑制する スーパーストラクチャ構築アルゴリズム CORAI を提案し
- 比較評価実験により,以下を示した。
   CORAI は,従来より消失辺を削減。
   CORAI は,検定の有意水準を上げるより消失辺を削減でき,余剰辺も少な(抑えられる。
   CORAI によるSS は,従来手法より高精度にBNを推定

## 研究の現況と先行研究

- 既存 Exact 学習の学習可能変数数(例えば [Malone+11]の33個]に届いていない。
   宇都さん作SS上の Exact スコア学習 (Dynamic Programming [Malone+11]) で実行できず。
- H2PC [Gasse+12]:
  - SS 消失辺少ない(対MMPC)
  - ・スコアはヒューリスティック
  - [Gasse+12] Maxime Gasse et al., An Experimental Comparison of Hybrid Algorithms for Bayesian Network Structure Learning, In proc of ECMLPKDD 2012.

## リソース

- ・ソースコード
  - ・コアアルゴリズム:Java
    - CORAI (RAI)
    - UtoDP
  - ・実験スクリプト: Ruby, sh ・動作環境: Windows 上の Cygwin
- ・先行研究の実験コード
- MMPC MMHC, PC: Matlab
- H2PC: R

#### 参考文献

- [Bouchaert 94] Bouchaert et al. Probat

- Bloschert 34 Bloschert 64 J. grychabilistic Network Construction Using the Minimum Description Length Principle, in Proc. of SUIAMA, pp. 41-48, 1994.

  Cheese 201 Cheng et al., Learning Bayesian networks from data. An information-theory based approach, Antificial intelligence, Vol.133, pp. 43-90, 2022.

  Clustern 11 Custern, Bayesian network learning with cutting planes, in Proc. of UAV11, 2011.

  Clustern 11 Custern, Bayesian network learning with cutting planes, in Proc. of UAV11, 2011.

  Disablosch 10] Leakhola et al., Learning Bayesian Networks: The Combination of Knowledge and Statistical Data, Usaskola et al., Learning Bayesian Networks: The Combination of Knowledge and Statistical Data, Usaskola et al., Learning Bayesian Networks and Decision Grouph, 2016 Ed., Springer, 2007.

  Manister, 041 Christop et al., Reposition Networks and Decision Grouph, 2016 Ed., Springer, 2007.

  Manister, 041 Christop et al., Improving the Scalability of Ogtimal Bayesian Network Learning Machine Learning Research, vol. 62, 945-945, 2006.

  Bayesian Network Learning Machine et al., Improving the Scalability of Ogtimal Bayesian Network Learning With External-Memory Control of Machine Learning Research, vol. 62, 940-945, 2006.

  Bayesian Network Learning Machine et al., Improving the Scalability of Ogtimal Bayesian Network Structure, In Proc. of Sciences (1914). 2011.

  Specifical Stander et al., A Simple Approach for Finding the Globally Optimal Bayesian Network Structure, In Proc. of Sciences (1914).
- Spirites-401 Spirites et al., Causation, Prediction, and Search, 2nd Ed., Springer-Verlag, 2000.

  Spirity 333 Suzuki, A Construction of Bayesian Networks from Databases on an MDL Principle, in Proc. of UAP3, pp.266
  737, 1983
- Spars (1992) a status. A Construction of superain networks from large and an insur-intrope, in Proc. of us 12, pp. [Immade; 11] Temperai et al., Papiral Republic for Learning Optimal Bayesian Networks (Tarturus, Durand off Machine Learning Research, Vol. 12, pp. 2457-2459, 2011.

  [Parint] (1962) Spars (

## バックアップ スライド

