

鈴木讓「ベイジアンネットワーク入門」(培風館)

2. グラフィカルモデル

2.3 Markov ネットワーク: 依存モデルの無向グラフによる表現

鈴木讓

大阪大学

2010年5月20日

あらまし

- 1 Markov ネットワーク
- 2 Markov 毛布
- 3 Gibbs ポテンシャル

Markov ネットワーク

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$

M : 依存モデル

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が M の I-対応

$\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \subseteq \mathbf{U}$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \implies I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y})_M \quad (25)$$

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が M の D-対応

$\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \subseteq \mathbf{U}$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \longleftarrow I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y})_M$$

Markov ネットワーク (続)

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が M の完全対応

$\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \subseteq \mathbf{U}$

$$\langle \mathbf{X} | \mathbf{Z} | \mathbf{Y} \rangle_G \iff I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y})_M$$

M は無向グラフ同型 (無向グラフと同型)

G が M の極小 I-対応 (G が M の Markov ネットワーク)

- 1 $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が M の I-対応
- 2 任意の $\mathbf{E}' \subsetneq \mathbf{E}$ に対して, $G' = (\mathbf{U}, \mathbf{E}')$ が M の I-対応ではない

Markov ネットワーク (続)

(例)

X, Y : 確率 $1/2$ で $0, 1$ が生じる独立な確率変数

M : $\mathbf{U} := \{X, Y, X + Y\}$ の条件付独立性

$I(\{X\}, \{Y\}, \{X + Y\})_M, \quad I(\{Y\}, \{X + Y\}, \{X\})_M,$

$I(\{X + Y\}, \{X\}, \{Y\})_M$

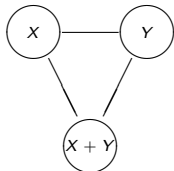
はどれも偽。 M の Markov ネットワーク G は, 完全グラフ

$I(\{X\}, \{\}, \{Y\})_M, \quad I(\{Y\}, \{\}, \{X + Y\})_M, \quad I(\{X + Y\}, \{\}, \{X\})_M$

はどれも真。 $\{X, Y\}, \{Y, X + Y\}, \{X + Y, X\} \in \mathbf{E}$ より、

$\langle \{X\} | \{\} | \{Y\} \rangle_G, \quad \langle \{Y\} | \{\} | \{X + Y\} \rangle_G, \quad \langle \{X + Y\} | \{\} | \{X\} \rangle_G$

のどれも偽。 G は D-対応ではなく, M は無向グラフ同型ではない。



Markov ネットワーク (続)

(例)

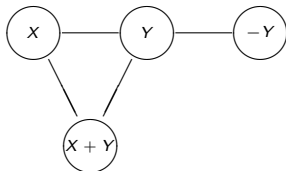
X, Y : 確率 $1/2$ で $0, 1$ が生じる独立な確率変数

$\mathbf{U} = \{X, Y, X + Y, -Y\}$

条件付独立性 M の Markov ネットワーク

$$\langle \{X\} | \{Y\} | \{-Y\} \rangle_G, \quad I(\{X\}, \{Y\}, \{-Y\})_M$$

$$\langle \{X + Y\} | \{Y\} | \{-Y\} \rangle_G, \quad I(\{X + Y\}, \{Y\}, \{-Y\})_M$$



定理 2.5

M : (5),(6),(9) を満足する依存モデル

定理 2.5

- ① 極小 I -対応 $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ が存在し、一意
- ② G は, 完全グラフから, $I(\{X\}, \mathbf{U} - \{X, Y\}, \{Y\})_M$ が真となる $\{X, Y\} \in \mathbf{E}$ を除いて得られる:

$$\{X, Y\} \notin \mathbf{E} \iff I(\{X\}, \mathbf{U} - \{X, Y\}, \{Y\})_M. \quad (26)$$

証明: テキスト (58-59 ページ)

定理 2.6

定理 2.6

依存モデル M が無向グラフ同型

$\iff I(\cdot, \cdot, \cdot)_M$ が (5), (6), (9) および

$$I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y}) \implies I(\mathbf{X}, \mathbf{Z} \cup \mathbf{W}, \mathbf{Y}), \quad (27)$$

$$I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y}) \implies I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \{U\}) \vee I(\{X\}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y}), \quad U \notin \mathbf{Z}. \quad (28)$$

証明: テキスト (59-60 ページ)

Z が $X \in U$ の Markov 毛布

$$I(\{X\}, Z, U - Z - \{X\})_M, X \notin Z \quad (29)$$

Z が $X \in U$ の Markov 境界 B_M

Markov 毛布であって, 任意の $Z' \subsetneq Z$ に対して

$$I(\{X\}, Z', U - Z' - \{X\})_M, X \notin Z'$$

が成立しない

定理 2.7

$$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$$

$\mathbf{B}_G(X)$: $X \in \mathbf{U}$ に隣接する \mathbf{U} の元の集合

定理 2.7

- ① 依存モデル M が (5),(6),(9) を満足
 \implies 各 $X \in \mathbf{U}$ に対して, 唯一の Markov 境界 $\mathbf{B}_M(X)$
- ② 依存モデル M が (5),(6),(7),(9) を満足
 \implies 各 $X \in \mathbf{U}$ に対して, $\mathbf{B}_M(X)$ は, (26) の $\mathbf{B}_G(X)$

証明: テキスト (61 ページ)

系 2.1

$M: \mu_{\mathbf{U}}(d\mathbf{u}) > 0, \mathbf{u} \in \mathbf{U}(\Omega)$ なる確率 $\mu_{\mathbf{U}}$ の依存モデル

系 2.1

- ① $X \in \mathbf{U}$ について, $X \notin B_M(X)$.
- ② $X, Y \in \mathbf{U}$ について, $Y \in B_M(X) \iff X \in B_M(Y)$

証明:

- ① 定理 2.1 より, (5),(6),(7),(9)。
- ② $B_G(X) = B_M(X), X \in \mathbf{U}$
- ③ 2 条件は, $B_G(X), X \in \mathbf{U}$ の性質。

系 2.2

$M: \mu_{\mathbf{U}}(d\mathbf{u}) > 0, \mathbf{u} \in \mathbf{U}(\Omega)$ なる確率 $\mu_{\mathbf{U}}$ の依存モデル
 $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$: M の Markov ネットワーク

系 2.2

$$\mathbf{E} = \{\{X, Y\} \mid X \in \mathbf{U}, Y \in \mathbf{B}_M(X)\}$$

証明: 定理 2.7 および系 2.1 と同じ条件では, $B_G(X) = B_M(X), X \in \mathbf{U}$

$$\{X, Y\} \in \mathbf{E} \iff Y \in B_G(X) \iff Y \in B_M(X)$$

Markov ネットワークの例

例:

$$\Sigma = \{I(\{X\}, \{Y\}, \{Z\}), I(\{X\}, \{Z\}, \{W\}), I(\{Y\}, \{Z\}, \{W\})$$

$$I(\{X, Y\}, \{Z\}, \{W\}), I(\{X\}, \{Y, Z\}, \{W\}), I(\{Y\}, \{X, Z\}, \{W\})\}$$

M : Σ の要素に (5), (12) を適用した $\mathbf{U} = \{X, Y, Z, W\}$ の依存モデル

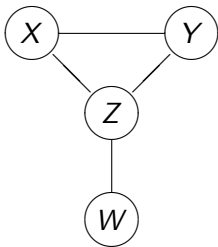
$$I(\{X\}, \{Y\}, \{Z\})_M, I(\{X\}, \{Y, Z\}, \{W\})_M, \neg I(\{X\}, \{Y\}, \{Z, W\})_M$$

- ① (8) が満足されない。定理 2.1 より、対応する確率 $\mu_{\mathbf{U}}$ は存在しない。
- ② (5), (6), (9) が満足。定理 2.5 より、一意的な極小 I-対応が存在。
- ③ (7) が満足。定理 2.7 より、(26) に従って、完全グラフから $\{X, W\}, \{Y, W\}$ を削除して $B_G(U)$, $U \in \mathbf{U}$ が得られる。

Markov ネットワークの例 (続)

$$B_G(X) = \{Y, Z\}, \quad B_G(Y) = \{X, Z\}, \\ B_G(Z) = \{X, Y, W\}, \quad B_G(W) = \{Z\}.$$

(29) に従って , Markov 境界を計算してもよい。



系 2.3

$M: \mu_{\mathbf{U}}(d\mathbf{u}) > 0, \mathbf{u} \in \mathbf{U}(\Omega)$ なる確率 μ の依存モデル
 $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$

系 2.3

以下の3条件は同値。

- ① G は M の1-対応である。
- ② $\{X, Y\} \notin \mathbf{E} \implies I(\{X\}, \mathbf{U} - \{X, Y\}, \{Y\})_M$
- ③ $X \in \mathbf{U}$ について, $I(\{X\}, \mathbf{B}_G(X), \mathbf{U} - \{X\} - \mathbf{B}_G(X))_M$

証明: 2. \Rightarrow 1. 仮定より, (5),(6),(7),(8),(9) が成立する。定理 2.5 より (26) が極小1-対応であり、2. であれば, G は1-対応。

1. \Rightarrow 3. $B_G(X)$ の定義から、 $\langle \{X\} | B_G(X) | \mathbf{U} - \{X\} - B_G(X) \rangle_G$ が成立。
 G が M の1-対応であれば,

$$\langle \{X\} | B_G(X) | \mathbf{U} - \{X\} - B_G(X) \rangle_G \implies I(\{X\}, B_G(X), \mathbf{U} - \{X\} - B_G(X))_M$$

3. \Rightarrow 2. 各 $\{X, Y\} \notin \mathbf{E}$ で $\mathbf{W} = \mathbf{U} - \{X, Y\} - B_G(X)$ を (7) に適用

$$I(\{X\}, B_G(X), \mathbf{U} - \{X\} - B_G(X))_M \implies I(\{X\}, \mathbf{U} - \{X, Y\}, \{Y\})_M$$

Gibbs ポテンシャル

$\mathbf{U} = \{X_1, \dots, X_n\}, |X_i(\Omega)| < \infty$

$\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_m \subseteq \mathbf{U}$: $G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$ の極大クリーク

g_1, \dots, g_m : $\mathbf{C}_1(\Omega), \dots, \mathbf{C}_m(\Omega)$ から非負実数への写像

$$K := \sum_{\mathbf{U}} \prod_{i=1}^m g_i(\mathbf{C}_i)$$

Gibbs ポテンシャル

$$P(\mathbf{U}) = K^{-1} \prod_{i=1}^m g_i(\mathbf{C}_i) > 0 \quad (30)$$

命題 2.5

命題 2.5

$I(\mathbf{X}, \mathbf{Z}, \mathbf{Y})$

\iff 各 $\mathbf{x} \in \mathbf{X}(\Omega)$, $\mathbf{y} \in \mathbf{Y}(\Omega)$, $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}^*(\Omega) := \{\mathbf{z} \in \mathbf{Z} \mid P_{\mathbf{Z}}(\mathbf{z}) > 0\}$ に対して,

$$P_{\mathbf{X}\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\mathbf{z}) = g_{\mathbf{X}\mathbf{Z}}(\mathbf{x}, \mathbf{z})g_{\mathbf{Y}\mathbf{Z}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (31)$$

なる $g_{\mathbf{X}\mathbf{Z}} : \mathbf{X}(\Omega) \times \mathbf{Z}^*(\Omega) \rightarrow [0, 1]$, $g_{\mathbf{Y}\mathbf{Z}} : \mathbf{Y}(\Omega) \times \mathbf{Z}^*(\Omega) \rightarrow [0, 1]$ が存在。

命題 2.5 (続)

証明：各 $\mathbf{x} \in \mathbf{X}(\Omega)$, $\mathbf{y} \in \mathbf{Y}(\Omega)$, $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}^*(\Omega)$ について, (31) を仮定すると、

$$P_{\mathbf{X}|\mathbf{Z}}(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = g_{\mathbf{XZ}}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \sum_{\mathbf{y} \in \mathbf{Y}(\Omega)} g_{\mathbf{YZ}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}),$$

$$P_{\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(\mathbf{y}|\mathbf{z}) = g_{\mathbf{YZ}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}(\Omega)} g_{\mathbf{XZ}}(\mathbf{x}, \mathbf{z}),$$

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}(\Omega)} g_{\mathbf{XZ}}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \sum_{\mathbf{y} \in \mathbf{Y}(\Omega)} g_{\mathbf{YZ}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = 1.$$

3つの式の辺々をかけて, (1) が得られる。逆に, (1) を仮定すると

$$g_{\mathbf{XZ}}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) := P_{\mathbf{X}|\mathbf{Z}}(\mathbf{x}|\mathbf{z}),$$

$$g_{\mathbf{YZ}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) := P_{\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(\mathbf{y}|\mathbf{z})$$

とおけば, (31) が成立。

定理 2.8

定理 2.8

P が G の Gibbs ポテンシャルであるとき、 G は P の 1-対応

証明: $J(X) := \{j \mid X \in \mathbf{C}_j\}$, $B_G(X) \cup \{X\} = \bigcup_{j \in J(X)} \mathbf{C}_j$

(30) より, 各 $X \in \mathbf{U}$ で

$$P(\mathbf{U}) = \prod_{j \in J(X)} g_j(\mathbf{C}_j) \cdot \prod_{j \notin J(X)} g_j(\mathbf{C}_j) = h_1(B_G(X) \cup \{X\}) h_2(\mathbf{U} - \{X\}),$$

$$P(B_G(X)) = h_3(B_G(X) \cup \{X\})$$

なる関数 h_1, h_2, h_3 が存在。したがって,

$$P(\mathbf{U} | B_G(X)) = \frac{h_1(B_G(X) \cup \{X\})}{h_3(B_G(X) \cup \{X\})} \cdot h_2(\mathbf{U} - \{X\}).$$

命題 2.5 より, $I(\{X\}, B_G(X), \mathbf{U} - \{X\} - B_G(X))$, $X \in \mathbf{U}$ が成立。

系 2.3 より G は P の 1-対応。

Gibbs ポテンシャルの例

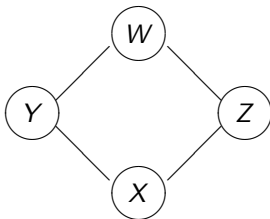
$\mathbf{U} := \{X, Y, Z, W\}$

$G = (\mathbf{U}, \mathbf{E})$

$\mathbf{C}_1 := \{X, Y\}$, $\mathbf{C}_2 := \{X, Z\}$, $\mathbf{C}_3 := \{Y, W\}$, $\mathbf{C}_4 := \{Z, W\}$

Gibbs ポテンシャル

$$P_{XYZW}(x, y, z, w) \propto g_1(x, y)g_2(x, z)g_3(y, w)g_4(z, w)$$



Gibbs ポテンシャルの例 (続)

$$\begin{aligned} & P_{W|XYZ}(w|x, y, z) \\ = & \frac{P_{XYZW}(x, y, z, w)}{\sum_w P_{XYZW}(x, y, z, w)} \\ = & \frac{g_1(x, y)g_2(x, z)g_3(y, w)g_4(z, w)}{g_1(x, y)g_2(x, z) \sum_w g_3(y, w)g_4(z, w)} \\ = & \frac{\sum_x g_1(x, y)g_2(x, z) \cdot g_3(y, w)g_4(z, w)}{\sum_x g_1(x, y)g_2(x, z) \cdot \sum_w g_3(y, w)g_4(z, w)} \\ = & \frac{\sum_x g_1(x, y)g_2(x, z)g_3(y, w)g_4(z, w)}{\sum_{x,w} g_1(x, y)g_2(x, z)g_3(y, w)g_4(z, w)} \\ = & \frac{P_{YZW}(y, z, w)}{P_{YZ}(y, z)} \\ = & P_{W|YZ}(w|y, z). \end{aligned}$$

Gibbs ポテンシャルの例 (続)

同様に、 $P_{Y|XZW}(y|x, z, w) = P_{Y|XW}(y|x, w)$

$$I(\{X\}, \{Y, Z\}, \{W\})_P, \quad I(\{Y\}, \{X, W\}, \{Z\})_P$$

G が意味しているすべての条件付独立性が成立 (I-対応)。

$$\neg I(\{X\}, \{\}, \{W\})_P, \quad \neg I(\{Y\}, \{\}, \{Z\})_P$$

$$\neg \langle \{X\} | \{\} | \{W\} \rangle_G, \quad \neg \langle \{Y\} | \{\} | \{Z\} \rangle_G$$

(D-対応)

P できまる依存モデル M は、無向グラフ同型

定理 2.9

定理 2.9

P の 1-対応となる G で定理 2.2 の 4 条件が成立するとき、 P は G の極大クリークにおける確率の積をその辺の確率の積で割った形でかける。

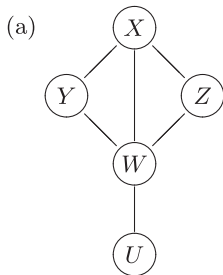
証明: テキスト (66 ページ)

(例)

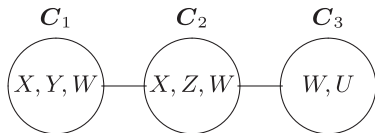
$$\begin{aligned} P(X, Y, Z, W, U) &= P(X, Y, W)P(Z|X, W)P(U|W) \\ &= \frac{P(X, Y, W)P(X, Z, W)P(W, U)}{P(X, W)P(W)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(X, Y, Z, W, U) &= P(X, Z, W)P(Y|X, W)P(U|W) \\ &= \frac{P(X, Z, W)P(X, Y, W)P(W, U)}{P(X, W)P(W)} \end{aligned}$$

定理 2.9 (続)

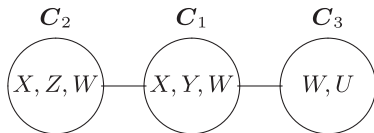


(b)



$$\{X, Y, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Z, W\}$$

(c)



$$\{X, Z, W\} \cap \{W, U\} \subseteq \{X, Y, W\}$$