

ЦИКЛЫ В БАЙЕСОВСКИХ СЕТЯХ: ВЕРОЯТНОСТНАЯ СЕМАНТИКА И ОТНОШЕНИЯ С СОСЕДНИМИ УЗЛАМИ

А. Л. Тулупьев¹, С. И. Николенко², А. В. Сироткин³

^{1,3}Санкт-Петербургский институт информатики и автоматизации РАН, ²Санкт-Петербургское отделение Математического института им. В. А. Стеклова РАН

^{1,3}СПИИРАН, 14-я линия ВО, д. 39, Санкт-Петербург, 199178; ²ПОМИ РАН, Санкт-Петербург, наб. р. Фонтанки, д. 27, 191023

¹<alt@ias.spb.su>, ²<sergey@logic.pdmi.ras.ru>, ³<sav_ptts@inbox.ru>

УДК 681.3

Тулупьев А. Л., Николенко С. И., Сироткин А. В. Циклы в байесовских сетях: вероятностная семантика и отношения с соседними узлами // Труды СПИИРАН. Вып. 3, т. 1. — СПб.: Наука, 2006.

Аннотация. Мы рассматриваем направленные циклы (циклы обратной связи) в байесовских сетях доверия, учитывая их взаимодействие с предками и потомками цикла в БСД, а также приводим результаты в случае циклов с многозначными переменными. Учет предков цикла приводит к тому, что цикл в БСД может сам по себе повлиять на своих предков, сделав некоторые их означивания противоречивыми. Мы также рассматриваем достаточное условие противоречивости цикла в АБС, при выполнении которого цикл можно преобразовать в линейную цепь ФЗ константного порядка. Результаты снабжены численными примерами, в том числе примером цикла, некоторые означивания предков которого оказываются противоречивыми. — Библ. 11 назв.

UDC 681.3

Tulupyev A. L., Nikolenko S. I., Sirotkin A. V. Cycles in Bayesian networks: probabilistic semantics and relations with neighboring nodes // SPIIRAS Proceedings. Issue 3, vol. 1. — SPb.: Nauka, 2006.

Abstract. We consider directed (feedback) cycles in Bayesian belief networks, taking into consideration their interaction with successors and predecessors in the network. We also consider the case of multivalued variables. Our discussion leads to the conclusion that a cycle in a BBN may by itself influence its parents, making some of their assignments inconsistent. We also consider a sufficient condition of a cycle's consistency in an algebraic Bayesian network. If it holds, the cycle may be transformed into a linear chain of knowledge patterns of constant size. We also make numerical examples, including an example of a cycle, some assignments of whose parents turn out to be inconsistent. — Bibl. 11 items.

1. Введение

Проблема учета направленных циклов (или циклов обратной связи) в байесовских сетях доверия (БСД) возникает как на практике (направленные циклы вполне могут возникнуть в процессе экспертного построения БСД или автоматического построения сетей зависимостей [1]), так и при теоретическом анализе естественных обобщений аппарата БСД.

В наших предыдущих работах [2–6], как правило, шла речь исключительно об *изолированных* циклах, т.е. фактически о сети, целиком состоящей из направленного цикла. В настоящей работе мы не только изложим вероятностную семантику изолированных циклов, в том числе и над многозначными переменными, но и рассмотрим, какое влияние оказывает цикл в БСД в некоторых частных случаях на своих соседей: родителей и сыновей.

Сразу отметим основные особенности нашего подхода: мы работаем в рамках существующих теорий и определений. Вероятностный подход гарантирует выполнение аксиом теории вероятностей, что очень важно в искусствен-

ном интеллекте (к сожалению, некоторые аппараты выходят за рамки аксиоматики, но объявляют, что полученные результаты могут быть интерпретированы как вероятности). И к теории БСД мы подходим столь же прямо и «наивно»: понятие d -разделимости принимается в том виде, в котором оно существует в теории БСД. Однако вполне возможно, что для более адекватной работы с циклическими БСД это понятие нужно будет скорректировать; это остается интересной проблемой, которая в настоящей статье не рассматривается.

2. Основные понятия

Байесовская сеть доверия — это ациклический направленный граф, вершины которого представляют собой переменные, а связи между ними указывают на непосредственную зависимость между этими переменными. Основная идея байесовской сети доверия заключается в том, что слишком большое для прямого анализа множество утверждений (переменных) структурируется при помощи графа, в котором связаны друг с другом вершины, отвечающие зависимым друг от друга утверждениям, а получающаяся структура поддается достаточно простому анализу.

В байесовской сети доверия связь (говоря языком теории вероятностей и вероятностной логики, зависимость) на самом деле имеется отнюдь не только между узлами, непосредственно связанными ребром. Определение БСД включает в себя понятие так называемой d -разделимости, которая говорит, когда узлы БСД условно независимы. Так как d -разделимость окажется весьма важной для рассмотрения соседей циклов в БСД, мы должны рассмотреть ее достаточно подробно. Поскольку это понятие — одно из самых базовых в теории БСД, мы могли бы порекомендовать читателю обратиться к уже имеющимся источникам на английском языке [7,8]. В русской литературе байесовским сетям доверия внимания до сих пор практически не уделялось; мы постарались в какой-то мере исправить это досадное упущение в [9].

Для того чтобы определить d -разделимость, сначала определяют три способа связи между узлами. *Последовательная связь (serial connection)* — это прямая связь между узлами сети (рис. 1а). В этом случае 1 влияет на 2, а 2, в свою очередь, влияет на 3, и узлы 1 и 3 получают связанные. Однако, если в 2 поступило свидетельство, связь между 1 и 3 нарушается: если мы твердо знаем, что промежуточное событие произошло, связи между его причиной и следствием уже нет (ее обеспечивал тот факт, что вероятность следствия зависит от вероятности причины, но если следствие уже произошло, этот механизм больше не работает).

В случае *расходящейся связи (diverging connection)* у одного узла сети имеется несколько потомков (рис. 1б). Информация об одном из потомков может повлиять на вероятность другого потомка одного и того же узла. Это связано с тем, что не только информация о произошедшей причине повышает вероятность (правильнее, конечно, было бы сказать «оценку вероятности»), а еще правильнее и более нейтрально — «степень нашей уверенности в», но для краткости мы будем говорить просто «вероятность») следствия, но и случившееся следствие повышает вероятность причины. Но если общий предок уже получил означивание, то связь нарушается. Действительно, если мы уже твердо знаем, что причина двух следствий имеет место, эти следствия становятся независимыми.

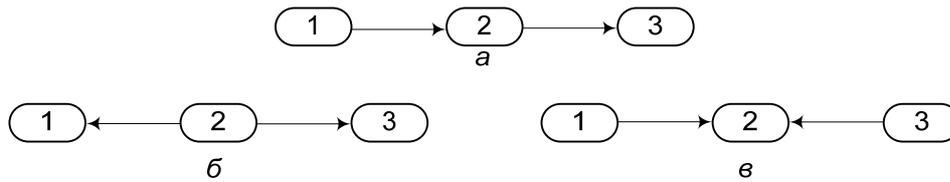


Рис. 1. Типы связи в БСД.

а — последовательная связь; б — расходящаяся связь; в — сходящаяся связь.

Сходящаяся связь (converging connection) возникает, когда два узла имеют общего потомка (рис. 1в). Эта ситуация — самая интересная. Казалось бы, связи между узлами 1 и 3 нет: если произошло 1, то это повлияет на вероятность события 2, но вероятность 3 от этого измениться не должна. Однако ситуация меняется, если свидетельство 2 уже получено. Действительно, после получения свидетельства 2 вероятности обеих его причин повышаются: раз уж что-то произошло, значит, какая-то причина у этого была — неизвестно, какая именно, но обе причины становятся более вероятными. Но если теперь мы вдруг узнаем, что одна из причин произошла, это должно понизить вероятность другой причины: ведь следствие уже объяснено, и его влияние на вторую причину должно уменьшиться. Итак, в случае сходящейся связи зависимость должна появляться, только если общий потомок (или любой из его потомков — там ситуация будет аналогичной) уже получил какое-то означивание.

Теперь можно дать формальное определение d -разделимости.

Определение 1. Два узла направленного графа x и y называются d -разделенными, если для всякого пути из x в y (путь здесь не учитывает направление ребер) существует такой промежуточный узел z (не совпадающий ни с x , ни с y), что либо связь в пути в этом узле последовательная или расходящаяся, и узел z получил означивание, либо связь сходящаяся, и ни узел z , ни какой-либо из его потомков означивания не получил. В противном случае узлы называются d -связанными.

Для удобства нам потребуется обозначение \tilde{x} — аргументное место, т. е. позиция в формуле, куда может быть поставлено одно из двух значений — либо x , либо \bar{x} . Мы будем использовать его для обозначения произвольного означивания.

3. Вероятностная семантика изолированного цикла в БСД

Рассмотрим БСД, представляющую собой изолированный цикл из конечного числа вершин. Это означает, что в качестве начальных данных заданы тензоры условных вероятностей

$$p(x_2 | x_1), p(x_2 | \bar{x}_1), p(x_3 | x_2), p(x_3 | \bar{x}_2), \dots, p(x_n | x_{n-1}), p(x_n | \bar{x}_{n-1}).$$

Попытаемся выразить тензоры совместных вероятностей через начальные данные. Следуя основным свойствам условных вероятностей, мы можем записать систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} p(x_1) = p(x_1 | x_n)p(x_n) + p(x_1 | \bar{x}_n)(1 - p(x_n)), \\ p(x_2) = p(x_2 | x_1)p(x_1) + p(x_2 | \bar{x}_1)(1 - p(x_1)), \\ \vdots \\ p(x_n) = p(x_n | x_{n-1})p(x_{n-1}) + p(x_n | \bar{x}_{n-1})(1 - p(x_{n-1})). \end{cases}$$

Эта система имеет очень простую структуру и может быть решена за линейное время (для этого можно просто последовательно подставлять неизвестные вероятности в последующие уравнения системы, элиминируя переменные и, вследствие того, что каждая из переменных встречается лишь дважды, получая в конце линейное уравнение линейного размера). Отметим, что все условные вероятности уже даны, и мы решаем систему относительно маргинальных вероятностей $p(x_i)$. Обозначая $\xi_{ij} = p(x_i | \bar{x}_j) - p(x_i | x_j)$, видим, что система имеет вид $\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{B}$, где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \xi_{1n} \\ \xi_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \xi_{32} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \xi_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p(x_1) \\ p(x_2) \\ p(x_3) \\ \vdots \\ p(x_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} p(x_1 | \bar{x}_n) \\ p(x_2 | \bar{x}_1) \\ p(x_3 | \bar{x}_2) \\ \vdots \\ p(x_n | \bar{x}_{n-1}) \end{pmatrix}.$$

Для того, чтобы исследовать систему на возможную вырожденность, вычислим определитель матрицы системы $\det \mathbf{A}$, разложив его по первой строке:

$$\det \mathbf{A} = 1 + (-1)^n \xi_{1n} \xi_{21} \xi_{32} \cdots \xi_{n,n-1}.$$

Мы видим, что система может быть вырожденной, только если $\xi_{i,j-1} = \pm 1$ для всех $i = 1, \dots, n$ и, более того, знаки подобраны так, чтобы общее произведение $(-1)^n \xi_{1n} \xi_{21} \xi_{32} \cdots \xi_{n,n-1}$ оказалось равно минус единице, а не единице. Это соответствует случаю, когда все x_i семантически эквивалентны, т.е. описывают одно и то же утверждение x . В этом случае каждая из переменных x_i соответствует либо x , либо \bar{x} , и, таким образом, $p(\tilde{x}_i | \tilde{x}_j)$ равна нулю или единице. Тогда, действительно, на $p(x)$ не налагается никаких ограничений, и каждое значение $p(x)$ даст решение системы. Однако этот случай на практике бесполезен, т.к. нет никакой пользы (а на самом деле есть вред) от использования нескольких вершин графа для обозначения одного и того же события. По этим причинам в дальнейшем мы рассматриваем невырожденный случай.

Итак, в невырожденном случае вышеописанная система дает точечные вероятности всех вершин цикла. Следующая формула позволяет нам вычислить также совместные вероятности соседних вершин цикла¹:

$$p(\tilde{x}_i \tilde{x}_{i-1}) = p(\tilde{x}_{i-1}) p(\tilde{x}_i | \tilde{x}_{i-1}).$$

Сейчас мы сначала подробно рассмотрим простейшие случаи — циклы из двух и трех вершин, — а затем перейдем к более общим вопросам.

В простейшем случае циклических байесовских сетей доверия — случае цикла из двух вершин x_1 и x_2 — никакой неопределенности в распределении

¹Здесь и далее мы часто заменяем $p(x_0)$ на $p(x_n)$ и обратно для краткости и единообразия записи формул.

вероятностей не содержится. Маргинальные вероятности подчиняются следующей системе ограничений:

$$\begin{cases} p(x_1) + (p(x_1 | x_2) - p(x_1 | \bar{x}_2))p(x_2) = p(x_1 | \bar{x}_2), \\ (p(x_2 | x_1) - p(x_2 | \bar{x}_1))p(x_1) + p(x_2) = p(x_2 | \bar{x}_1). \end{cases}$$

Решая ее, получаем маргинальные вероятности в явном виде:

$$p(x_1) = \frac{p(x_1 | \bar{x}_2) - (p(x_1 | x_2) - p(x_1 | \bar{x}_2))p(x_2 | \bar{x}_1)}{1 - (p(x_1 | x_2) - p(x_1 | \bar{x}_2))(p(x_2 | x_1) - p(x_2 | \bar{x}_1))},$$

$$p(x_2) = \frac{p(x_2 | \bar{x}_1) - (p(x_2 | x_1) - p(x_2 | \bar{x}_1))p(x_1 | \bar{x}_2)}{1 - (p(x_1 | x_2) - p(x_1 | \bar{x}_2))(p(x_2 | x_1) - p(x_2 | \bar{x}_1))}.$$

Теперь легко получить все распределение целиком:

$$\begin{aligned} p(x_1 x_2) &= p(x_1)p(x_2 | x_1), \\ p(x_1 \bar{x}_2) &= p(x_1)(1 - p(x_2 | x_1)), \\ p(\bar{x}_1 x_2) &= (1 - p(x_1))p(x_2 | \bar{x}_1), \\ p(\bar{x}_1 \bar{x}_2) &= (1 - p(x_1))(1 - p(x_2 | \bar{x}_1)). \end{aligned}$$

Отметим, что, как и в общем случае, эти формулы имеют смысл только если $(p(x_1 | x_2) - p(x_1 | \bar{x}_2))(p(x_2 | x_1) - p(x_2 | \bar{x}_1)) \neq 1$, что может произойти лишь в описанном выше вырожденном случае.

Случай цикла из трех вершин вносит элементы неопределенности в получаемый ответ, однако эта неопределенность «одномерна», и задача линейного программирования становится тривиальной. Стоит отдельно отметить, что задача эта может, несмотря на свою тривиальность, не решиться; цикл может оказаться противоречив не только в описанной выше вырожденной ситуации. В данном частном случае система линейных уравнений принимает следующий вид:

$$\begin{cases} p(x_1) = p(x_1 | x_3)p(x_3) + p(x_1 | \bar{x}_3)(1 - p(x_3)), \\ p(x_2) = p(x_2 | x_1)p(x_1) + p(x_2 | \bar{x}_1)(1 - p(x_1)), \\ p(x_3) = p(x_3 | x_2)p(x_2) + p(x_3 | \bar{x}_2)(1 - p(x_2)). \end{cases}$$

Так как в данном случае любая пара переменных является парой соседей в цикле, все вероятности конъюнкций длины два заданы однозначно. Единственным неизвестным является $p(x_1 x_2 x_3)$. Решив систему, получим маргинальные вероятности вершин цикла и попарные совокупные вероятности. Примем теперь за неизвестную величину $p(x_1 x_2 x_3)$ и запишем систему ограничений, вытекающую из простейших свойств вероятности:

$$\begin{cases} p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_1 x_2) - p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_1 x_3) - p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_2 x_3) - p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_1) - p(x_1 x_2) - p(x_1 x_3) + p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_2) - p(x_1 x_2) - p(x_2 x_3) + p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ p(x_3) - p(x_1 x_3) - p(x_2 x_3) + p(x_1 x_2 x_3) \geq 0, \\ 1 - p(x_1) - p(x_2) - p(x_3) + p(x_1 x_2) + p(x_2 x_3) + p(x_1 x_3) - p(x_1 x_2 x_3) \geq 0. \end{cases}$$

Это — тривиальный одномерный случай задачи линейного программирования. Для ее решения достаточно пересечь вышеуказанные интервалы. В явном виде ее решение запишется следующим образом:

$$\max \left\{ \begin{array}{l} 0, \\ p(x_1x_2) + p(x_1x_3) - p(x_1), \\ p(x_1x_2) + p(x_2x_3) - p(x_2), \\ p(x_1x_3) + p(x_2x_3) - p(x_3) \end{array} \right\} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \min \left\{ \begin{array}{l} p(x_1x_2), \\ p(x_1x_3), \\ p(x_2x_3), \\ 1 - p(x_1) - p(x_2) - p(x_3) + \\ + p(x_1x_2) + p(x_1x_3) + p(x_2x_3) \end{array} \right\}.$$

Затем можно выразить через $p(x_1x_2x_3)$ и все остальные вероятности, формирующие совокупное распределение:

$$p(\bar{x}_1x_2x_3) = p(x_2x_3) - p(x_1x_2x_3),$$

$$p(x_1\bar{x}_2x_3) = p(x_1x_3) - p(x_1x_2x_3),$$

$$p(x_1x_2\bar{x}_3) = p(x_1x_2) - p(x_1x_2x_3),$$

$$p(\bar{x}_1\bar{x}_2x_3) = p(x_3) - p(x_2x_3) - p(x_1x_3) + p(x_1x_2x_3),$$

$$p(\bar{x}_1x_2\bar{x}_3) = p(x_2) - p(x_1x_2) - p(x_2x_3) + p(x_1x_2x_3),$$

$$p(x_1\bar{x}_2\bar{x}_3) = p(x_1) - p(x_1x_2) - p(x_1x_3) + p(x_1x_2x_3),$$

$$p(\bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3) = 1 - p(x_1) - p(x_2) - p(x_3) + p(x_1x_2) + p(x_1x_3) + p(x_2x_3) - p(x_1x_2x_3).$$

Как наиболее эффективно решать вышеописанную систему уравнений? Мы опишем один из простейших, но вместе с тем достаточно удобных и эффективных подходов к вычислению $p(x_n)$, а значения остальных оценок вероятностей в таком случае можно будет просто, обойдя цикл, подсчитать по известным значениям условных вероятностей.

Итак, мы решаем систему $\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{B}$. Мы хотим подсчитать $p(x_n)$ по формуле Крамера, разделив определитель матрицы \mathbf{A}' , которая получается из \mathbf{A} заменой последнего столбца на столбец \mathbf{B} , на определитель матрицы \mathbf{A} .

Определитель $\det \mathbf{A}$ мы уже вычисляли:

$$\det \mathbf{A} = 1 + (-1)^n \xi_{1n} \xi_{21} \xi_{32} \dots \xi_{n,n-1}.$$

Вот как выглядит матрица \mathbf{A}' :

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & p(x_1 | \bar{x}_n) \\ \xi_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 & p(x_2 | \bar{x}_1) \\ 0 & \xi_{32} & 1 & \dots & 0 & p(x_3 | \bar{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \xi_{n,n-1} & p(x_n | \bar{x}_{n-1}) \end{pmatrix}.$$

Предлагаемый нами способ вычислять ее определитель — это рекуррентно, один за другим, вычислять аналогичные определители меньшего порядка, раскладывая определители по последней строке. Вот как это выглядит (мы обозначаем через Δ_i определитель подматрицы порядка i (при этом положим $\Delta_0 = 0$):

$$\Delta_0 = 0,$$

$$\Delta_1 = -\xi_{1n} \Delta_0 + p(x_1 | \bar{x}_n),$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & p(x_1 | \bar{x}_n) \\ \xi_{21} & p(x_2 | \bar{x}_1) \end{vmatrix} = -\xi_{21}\Delta_1 + p(x_2 | \bar{x}_1),$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & p(x_1 | \bar{x}_n) \\ \xi_{21} & 1 & p(x_2 | \bar{x}_1) \\ 0 & \xi_{32} & p(x_3 | \bar{x}_2) \end{vmatrix} = -\xi_{32}\Delta_2 + p(x_3 | \bar{x}_2),$$

$$\Delta_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & p(x_1 | \bar{x}_n) \\ \xi_{21} & 1 & 0 & p(x_2 | \bar{x}_1) \\ 0 & \xi_{32} & 1 & p(x_3 | \bar{x}_2) \\ 0 & 0 & \xi_{43} & p(x_4 | \bar{x}_3) \end{vmatrix} = -\xi_{43}\Delta_3 + p(x_4 | \bar{x}_3),$$

$$\dots,$$

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & p(x_1 | \bar{x}_n) \\ \xi_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 & p(x_2 | \bar{x}_1) \\ 0 & \xi_{32} & 1 & \dots & 0 & p(x_3 | \bar{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & p(x_{i-1} | \bar{x}_{i-2}) \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \xi_{i,i-1} & p(x_i | \bar{x}_{i-1}) \end{vmatrix} = -\xi_{i,i-1}\Delta_{i-1} + p(x_i | \bar{x}_{i-1}).$$

Эти формулы представляют собой простую рекурсию и допускают несложную реализацию на любом языке программирования. Кроме того, они удачны с вычислительной точки зрения — для вычисления $p(x_n)$ потребуется произвести лишь одно деление ($p(x_n) = \frac{\Delta_n}{\det \mathbf{A}}$), а определитель будет вычислен за линейное количество сложений и умножений; такие параметры позволяют рассчитывать на быстроту и хорошую устойчивость метода.

После получения $p(x_n)$ остальные вероятности вычислить уже совсем не сложно:

$$p(x_i) = p(x_i | x_{i-1})p(x_{i-1}) + p(x_i | \bar{x}_{i-1})(1 - p(x_{i-1})), \quad p(x_i x_{i-1}) = p(x_i | x_{i-1})p(x_{i-1}).$$

До сих пор речь шла исключительно о бинарных переменных, пропозициях. Но аппарат БСД позволяет работать не только с пропозициями, но и с многозначными переменными! Этому (достаточно прямолинейному) обобщению мы и посвятим следующий раздел настоящей статьи.

4. Изолированные циклы с многозначными переменными

Классическая теория байесовских сетей доверия оперирует обычно многозначными, не только бинарными переменными. Разумеется, многозначную переменную можно представить набором (цепочкой) бинарных точно так же, как всякое число можно перевести в двоичную систему счисления. Однако в результате такого перевода структура сети значительно усложнится; было бы, конечно, гораздо лучше, если бы сеть с самого начала допускала многозначные переменные.

Что же происходит с циклом в случае многозначных переменных? Уже в случае цикла из трех переменных x_1, x_2, x_3 (соответствующие аргументные места будем обозначать через \ddot{x}_j , подчеркивая их многозначность; обозначение

Таким образом, мы получили набор из $(m+1)n$ ограничений на mn переменных. Чтобы работать с квадратной матрицей системы (это, разумеется, гораздо удобнее с точки зрения анализа множества решений системы), нужно от n ограничений избавиться. Проще всего это сделать, воспользовавшись условиями $\sum_{j=1}^m p_i^j = 1$ и выразив по этим формулам один из p_i^j через другие для каждого i . Мы будем подставлять вместо p_i^1 равное ему выражение $1 - \sum_{j=2}^m p_i^j$ для каждого i . Тогда имеющиеся условия переписутся следующим образом:

$$\forall i, k \quad p_i^k = \sum_{l=2}^m c_i^{kl} p_{i-1}^l + c_i^{k1} - c_i^{k1} \sum_{l=2}^m p_{i-1}^l.$$

После того как мы перенесем свободный член в правую часть и переобозначим для краткости $\xi_i^{kl} = c_i^{kl} - c_i^{k1}$, окончательный вид ограничений станет таким:

$$\forall i, k \quad p_i^k + \sum_{l=2}^m \xi_i^{kl} p_{i-1}^l = c_i^{k1}.$$

Тогда в линейной системе $\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{B}$, построенной по тому же принципу, что и система из предыдущего раздела, матрица \mathbf{A} будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \xi_1^{22} & \xi_1^{23} & \dots & \xi_1^{2m} \\ 0 & 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \xi_1^{32} & \xi_1^{33} & \dots & \xi_1^{3m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \xi_1^{m2} & \xi_1^{m3} & \dots & \xi_1^{mm} \\ \xi_2^{22} & \xi_2^{23} & \dots & \xi_2^{2m} & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \xi_2^{32} & \xi_2^{33} & \dots & \xi_2^{3m} & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \xi_2^{m2} & \xi_2^{m3} & \dots & \xi_2^{mm} & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \xi_n^{22} & \xi_n^{32} & \dots & \xi_n^{m2} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \xi_n^{23} & \xi_n^{33} & \dots & \xi_n^{m3} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \xi_n^{2m} & \xi_n^{3m} & \dots & \xi_n^{mm} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

а векторы неизвестных и свободных членов системы имеют вид:

$$\mathbf{p} = (p_1^2 \quad p_1^3 \quad \dots \quad p_1^m \quad p_2^2 \quad p_2^3 \quad \dots \quad p_2^m \quad \dots \quad p_n^2 \quad p_n^3 \quad \dots \quad p_n^m)^T,$$

$$\mathbf{B} = (c_1^{21} \ c_1^{31} \ \dots \ c_1^{m1} \ c_2^{21} \ c_2^{31} \ \dots \ c_2^{m1} \ \dots \ c_n^{21} \ c_n^{31} \ \dots \ c_n^{m1})^T.$$

Структура матрицы \mathbf{A} представляется уже достаточно очевидной, но на всякий случай выпишем ее еще и поблочно, переобозначив блоки через Ξ_j :

$$\Xi_j = \begin{pmatrix} \xi_j^{22} & \xi_j^{23} & \dots & \xi_j^{2m} \\ \xi_j^{32} & \xi_j^{33} & \dots & \xi_j^{3m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \xi_j^{m2} & \xi_j^{m3} & \dots & \xi_j^{mm} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{m-1} & \mathbf{0}_{m-1} & \dots & \mathbf{0}_{m-1} & \Xi_1 \\ \Xi_2 & \mathbf{E}_{m-1} & \dots & \mathbf{0}_{m-1} & \mathbf{0}_{m-1} \\ \mathbf{0}_{m-1} & \Xi_3 & \dots & \mathbf{0}_{m-1} & \mathbf{0}_{m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0}_{m-1} & \mathbf{0}_{m-1} & \dots & \Xi_n & \mathbf{E}_{m-1} \end{pmatrix},$$

где \mathbf{E}_i — единичная матрица порядка i , $\mathbf{0}_i$ — нулевая матрица того же порядка.

Пример. Для облегчения понимания структуры вышеописанной системы выпишем линейную систему, соответствующую циклу с трехзначными (тернарными) переменными:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \xi_1^{22} & \xi_1^{23} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \xi_1^{32} & \xi_1^{33} \\ \xi_2^{22} & \xi_2^{23} & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \xi_2^{32} & \xi_2^{33} & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_3^{22} & \xi_3^{23} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_3^{32} & \xi_3^{33} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \xi_n^{22} & \xi_n^{23} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \xi_n^{32} & \xi_n^{33} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_1^2 \\ p_1^3 \\ p_2^2 \\ p_2^3 \\ p_3^2 \\ p_3^3 \\ \vdots \\ p_{n-1}^2 \\ p_{n-1}^3 \\ p_n^2 \\ p_n^3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} c_1^{21} \\ c_1^{31} \\ c_2^{21} \\ c_2^{31} \\ c_3^{21} \\ c_3^{31} \\ \vdots \\ c_{n-1}^{21} \\ c_{n-1}^{31} \\ c_n^{21} \\ c_n^{31} \end{pmatrix}.$$

Чтобы найти точечные оценки вероятностей, нужно лишь решить эту систему линейных уравнений. Правда, анализ того, когда эта система не имеет решений, становится более сложным. Определитель теперь нужно считать по формуле Бине–Коши:

$$\Delta = 1 + (-1)^n \Delta_1 \Delta_2 \dots \Delta_n,$$

где Δ_i — это соответствующий определитель

$$\Delta_i = \det \Xi_i = \begin{vmatrix} \xi_i^{22} & \xi_i^{23} & \dots & \xi_i^{2m} \\ \xi_i^{32} & \xi_i^{33} & \dots & \xi_i^{3m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \xi_i^{m2} & \xi_i^{m3} & \dots & \xi_i^{mm} \end{vmatrix}.$$

Кроме того, для проверки на непротиворечивость придется учитывать ограничение $\forall i \sum_{j=1}^m p_i^j = 1$. Чтобы оно выполнялось, нужно, чтобы в результате решения системы было выполнено условие $\sum_{j=2}^m p_i^j \leq 1$ — тогда получится неотрицательное значение p_i^1 .

5. Многозначные переменные как цепочки булевских

Отдельный, представляющий самостоятельный интерес случай многозначных переменных — это случай, когда многозначная переменная представляет собой цепочку булевских переменных. Иными словами, у переменной $\tilde{X} = \tilde{x}_1 \tilde{x}_2 \dots \tilde{x}_m$ в таком случае 2^m возможных значений, отвечающих различным означиваниям.

Отметим, что, разумеется, любую многозначную переменную можно представить в таком виде; для этого достаточно выбрать ближайшую сверху к количеству возможных значений степень двойки и закодировать возможные значения переменной цепочками означиваний булевских переменных. Лишние цепочки означиваний просто получают нулевую условную вероятность при любых комбинациях означиваний предков, и де-факто модель не будет ничем отличаться от исходной многозначной переменной.

Чем же удобнее для нашего аппарата переменные, представимые как цепочки конъюнкций аргументных мест? Дело в том, что наша конечная цель — вложить байесовские сети доверия с циклами в алгебраические байесовские сети, оставаясь в рамках вероятностного подхода. Алгебраические байесовские сети, как правило, работают с булевскими переменными, образуя из них фрагменты знаний [10]. Многозначная переменная в терминах состоящей из булевских переменных АБС представляется в виде фрагмента знаний. Отметим попутно, что в рамках одной многозначной переменной в БСД распределение вероятностей может быть каким угодно, поэтому никакой избыточности в структуре ФЗ заложено не будет. Поэтому переменные, изначально представляющие собой цепочки конъюнкций аргументных мест, лучше и более естественно вкладываются в аппарат АБС. Однако и переменных с другим количеством значений бояться не следует — ценой введения дополнительных переменных с нулевой вероятностью одного из означиваний они тоже вкладываются в ФЗ АБС.

Попытаемся формализовать то, что у нас получилось. Для формализации цепочек конъюнкций, принимающих 2^n значений, используется понятие *случайной бинарной последовательности*. Рассмотрим набор означиваний цепочки конъюнкций вида $\tilde{W} = \tilde{X}\tilde{Y}$; соответствующая случайная бинарная последовательность (СБП) $\hat{W} = \hat{X}\hat{Y}$ принимает значения из этого набора. Предполагается, что \hat{X} и \hat{Y} как множества атомов не пересекаются (мы обозначаем такие множества через $\text{Set}(X)$ и $\text{Set}(Y)$, а условие, соответственно, примет вид $\text{Set}(X) \cap \text{Set}(Y) = \emptyset$). Более строгой записью вероятности приобретения СБП

\hat{W} значений вида \tilde{W} была бы такая: $p(\hat{W} = \tilde{W})$, но вместо нее мы станем использовать сокращенный вариант везде, где это не будет вносить неясностей в изложение: $p(\tilde{W})$. Заметим, что СБП \hat{e} все время приобретает единственное значение e . Эта СБП не зависит ни от какой другой, как, впрочем, никакая другая СБП от нее также не зависит; e соответствует достоверному событию в теории вероятностей и тождественной истине — в логике.

Какова семантика изолированного цикла с многозначными переменными, представленными в виде СБП? Семантика — это образ одной системы обозначений и содержательного понимания в другой, в данном случае — вложение БСД (или обобщенных БСД с циклами) в АБС. С точки зрения АБС, случайная бинарная последовательность \hat{W} — это типичный фрагмент знаний, базовыми элементами которого являются переменные, входящие в \hat{W} , а оценки вероятностей точечные и соответствуют распределению вероятностей $p(\tilde{W})$. Пример такого соответствия представлен на рис. 2: СБП из трех переменных порождает ФЗ АБС третьего порядка.

Что теперь произойдет со всем циклом? Получается, что каждый элемент цикла должен перейти в ФЗ с точечными оценками. Но, как мы уже писали выше, весь цикл также должен перейти в объемлющий ФЗ, но уже с интервальными оценками. Получается, что вся конструкция будет представлять собой цикл из «маленьких» фрагментов знаний с точечными оценками, объединенными в единый объемлющий фрагмент знаний с интервальными оценками. Большой ФЗ будет иметь размер, экспоненциальный от произведения mn , — если цикл большой, эта сложность может оказаться запредельной. Однако эвристически можно предположить, что циклы в реальных приложениях будут получаться небольшими.

Теперь, детально изучив изолированные циклы, можно перейти к тому, чтобы рассматривать их в контексте сети. Напомним, что мы по-прежнему работаем в рамках «наивного» подхода к обобщению: считаем, что действует стандартное определение d -разделимости, и сеть задана обычным образом — условными вероятностями потомка при условии предков. В таком случае оказывается, что предки и потомки цикла — это две принципиально разные ситуации. Начнем разбираться с простейшей из них — ситуации, когда у цикла есть ровно один потомок.

6. Потомки цикла

Предположим, что у одной из вершин цикла x есть сын y , не входящий в сам цикл (см. рис. 3). Мы будем называть его сыном цикла. В терминах условных вероятностей это означает, что заданы условные вероятности $p(y|x)$ и $p(y|\bar{x})$. Поскольку вероятность $p(x)$, как мы уже видели, определяется из цикла однозначно (для определения этой вероятности не имеет значения, есть у цикла сыновья или нет), никаких особых проблем в этой ситуации не возникает: пропагацию (вычисление маргинальных вероятностей переменных соответствующих вершинам сети, возможно при наличии свидетельств) в остальной сети, следующей за этим сыном, можно вести в обычном порядке. Фактически, пропагация в остальной сети в этом случае может рассматривать цикл как одну вершину x (у нее есть однозначно определенная априорная вероятность, по-

этому она с точки зрения этой пропагации эквивалентна вершине без предков). Такая ситуация изображена на рис. 3а.

$$\hat{W} = \hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{x}_3$$

$\rho(\bar{x}_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3)$	$\rho(x_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3)$
$\rho(\bar{x}_1 \bar{x}_2 x_3)$	$\rho(x_1 \bar{x}_2 x_3)$
$\rho(\bar{x}_1 x_2 \bar{x}_3)$	$\rho(x_1 x_2 \bar{x}_3)$
$\rho(\bar{x}_1 x_2 x_3)$	$\rho(x_1 x_2 x_3)$

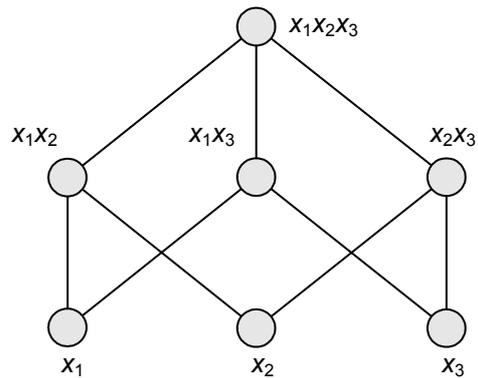


Рис. 2. СБП и ФЗ АБС.

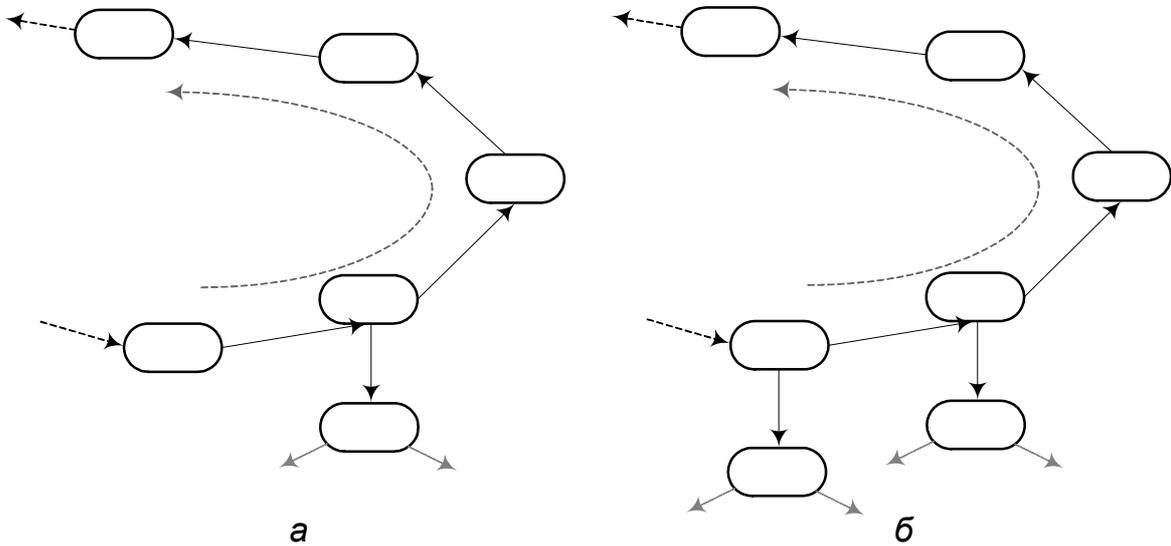


Рис. 3. Цикл с непересекающимися потомками.

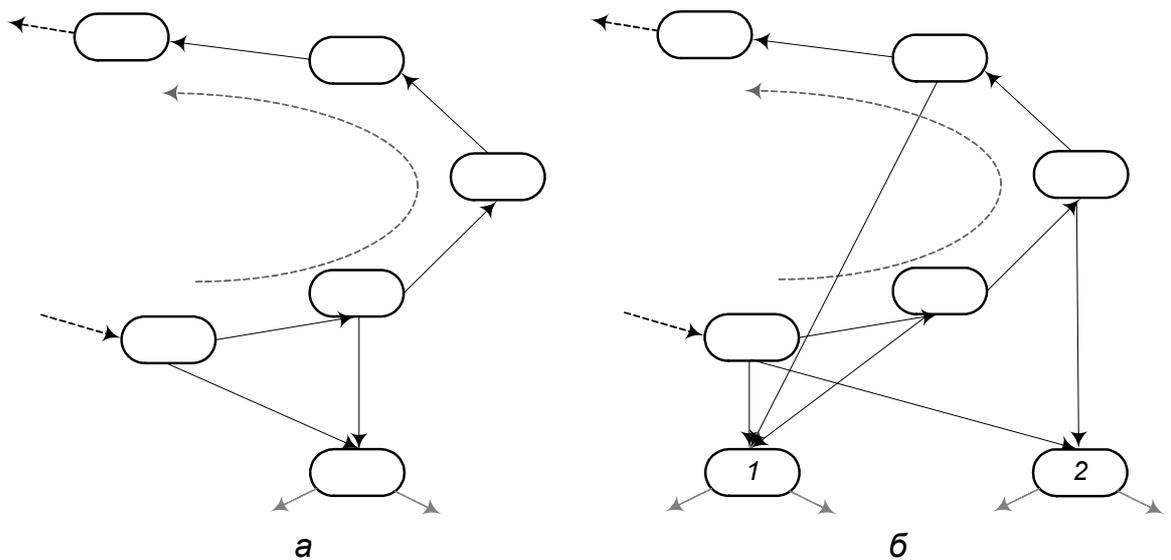


Рис. 4. Цикл с сыновьями, на которых должны продолжаться интервальные оценки.

Разумеется, ничего бы не изменилось, если бы таких узлов с сыновьями было несколько, и подсети, корнями которых являются эти сыновья, не пересекались бы (рис. 3б). Кроме того, ничего не изменилось бы, если бы вершина была сыном сразу двух вершин цикла, но соседних. В этом случае, как мы видели выше, совместные вероятности (все совместное распределение) определяются однозначно, давая тем самым возможность рассматривать эти вершины как лежащие отдельно от цикла (рис. 4а).

Рассмотрим теперь чуть более сложный случай: предположим, что узел является сыном двух вершин, находящихся в цикле не рядом (рис. 4б, сын 2). У двух несоседних вершин цикла в совместном распределении появляется один параметр; пусть это будет совместная вероятность $p(x_1x_2)$, которую мы обозначим через p . Напомним, что тогда остальные вероятности распределения запишутся следующим образом:

$$p(x_1\bar{x}_2) = p(x_1) - p,$$

$$p(\bar{x}_1x_2) = p(x_2) - p,$$

$$p(\bar{x}_1\bar{x}_2) = 1 - p(x_1) - p(x_2) + p.$$

Параметр p может принимать такие значения, чтобы все вышеуказанные вероятности были неотрицательными:

$$\max\{0, p(x_1) + p(x_2) - 1\} \leq p \leq \min\{p(x_1), p(x_2)\},$$

хотя и этого недостаточно для непротиворечивости: нужно, чтобы объемлющий фрагмент знаний был непротиворечив. Это требование может еще больше сузить интервал или даже сделать его пустым (а сеть — противоречивой).

Таким образом, если мы начнем вычислять вероятность сына (обозначим его по традиции через y), а затем его потомков, мы получим не одно распределение вероятностей, как в классической БСД, а семейство распределений вероятностей с одним параметром p . Например, вероятность $p(y)$ будет вычисляться следующим образом:

$$p(y) = p(y | x_1x_2)p + p(y | x_1\bar{x}_2)(p(x_1) - p) + \\ + p(y | \bar{x}_1x_2)(p(x_2) - p) + p(y | \bar{x}_1\bar{x}_2)(1 - p(x_1) - p(x_2) + p).$$

Важной особенностью этого случая является то, что зависимость y от p линейная, и далее по графу БСД пересчитанные вероятности, являющиеся композициями линейных функций, также будут линейно зависеть от параметра p . В таком случае можно без особых усилий переложить алгоритмы пропагации на такие линейные функции с одним параметром и проводить пропагацию практически так же, как это обычно делается в теории БСД.

Рассмотрим следующий по сложности случай. Предположим, что у цикла есть сын, зависящий от трех узлов цикла: x_1, x_2, x_3 , причем эти три узла — соседние (то есть x_1 соседствует с x_2 , а x_2 — с x_3). Тогда в соответствующем распределении уже два параметра; выберем в качестве таких параметров $p(x_1x_2)$ и $p(x_1x_2x_3)$ (обозначим их через p_{12} и p_{123} для краткости и наглядности). Даже для локальных рассуждений уже нужно было бы решать задачу линейного программирования, но нам в любом случае нужно решать ЗЛП для объемлющего ФЗ, чтобы получить границы оценок вероятностей конъюнктов p_{12} и p_{123} . В дальнейшем мы получаем пропагацию переменных с двумя степенями свободы, границы которых определяются из приведенной выше системы линейных неравенств.

В общем случае, если предков у узла u в цикле больше двух (рис. 4б, сын 1), совместное распределение этих предков не получается определить однозначно. В оценках их совместного распределения появляются интервальные оценки вероятностей.

Как учитывать интервальные оценки вероятностей в алгоритмах пропагации? На этот вопрос можно дать два разных ответа. Первый из них заключается в том, чтобы оставить алгоритмы пропагации такими, каковы они сейчас, а в качестве входа выбрать из целого семейства распределений вероятностей одно по какому-либо признаку. Этот прием лежит в основе всего аппарата БСД — там распределение выбирается благодаря условиям d -разделимости. Однако в циклическом случае d -разделимость уже работает не так хорошо, как в ациклическом — мы показали выше, что цикл описывает целое семейство распределений вероятностей. Есть основания полагать, что подходящим для выделения единственного распределения признаком может стать максимизация функционала энтропии по множеству допустимых распределений; однако этот вопрос требует дальнейшего исследования и в настоящей работе затронут не будет.

Другой возможный ответ заключается в разработке исчисления, которое бы позволило пропагировать интервальные оценки, обобщая таким образом байесовские сети доверия до работы с недоопределенными данными. По всей видимости, этот путь сложнее предыдущего; он требует серьезной и гораздо более объемной работы.

7. Подходы к учету родителей цикла

Учет родителей цикла (не так уж и неожиданно) оказывается еще более интересной задачей, чем учет его сыновей. В этом разделе мы опишем основные сложности, возникающие в этом случае, и расскажем об одном из возможных методов обработки родителей. Поиск других методов остается важной и интересной открытой проблемой.

Итак, основная проблема с родителями цикла заключается в том, что они кардинально меняют структуру тензоров вероятностей, которые в этом цикле задаются. Если раньше вершине x_i был присвоен тензор условных вероятностей $p(x_i | \tilde{x}_{i-1})$, то теперь, когда у нее есть родитель z , оказывается, что задан тензор $p(x_i | \tilde{x}_{i-1}, \tilde{z})$. А из этого тензора не получается извлечь $p(x_i | \tilde{x}_{i-1})$ без дополнительных сведений. Что же делать?

Мы предлагаем следующий способ обработки родителей направленного цикла, вытекающий напрямую из логико-вероятностного подхода. Обратим внимание на то, что если означивания всех родителей фиксированы, то цикл приобретает свой обычный вид, без родителей, а тензоры условных вероятностей $p(x_i | \tilde{x}_{i-1}, \text{pa}(x_i))$ (здесь $\text{pa}(x)$ — предки узла x) редуцируются до $p(x_i | \tilde{x}_{i-1})$. Поэтому первая естественная идея — перебирать все такие означивания и получать оценки всех интересующих нас вероятностей. А затем, если хочется свести результаты воедино, нужно полученные оценки вероятностей перевзвесить; в качестве весов, по всей видимости, разумно выбирать вероятности перебранных конфигураций (означиваний) родителей цикла.

Пример. Приведем численный пример, на котором будет видно, как работает предлагаемый алгоритм. Рассмотрим цикл из трех переменных x_1, x_2, x_3 , у

которого есть два предка: у вершины x_1 предок y , а у вершины x_2 — предок z . Пусть заданы следующие тензоры условных и маргинальных вероятностей:

$$\begin{aligned} p(y) &= 0.6, & p(z) &= 0.3, \\ p(x_1 | yx_3) &= 0.2, & p(x_2 | zx_1) &= 0.6, \\ p(x_1 | \bar{y}x_3) &= 0.25, & p(x_2 | \bar{z}x_1) &= 0.2, \\ p(x_1 | y\bar{x}_3) &= 0.4, & p(x_2 | z\bar{x}_1) &= 0.2, \\ p(x_1 | \bar{y}\bar{x}_3) &= 0.1, & p(x_2 | \bar{z}\bar{x}_1) &= 0.9, \\ p(x_3 | x_2) &= 0.8, & p(x_3 | \bar{x}_2) &= 0.5. \end{aligned}$$

Разберем одну из ситуаций подробно. Рассмотрим означивание предков yz . Тогда вероятности на цикле примут значения:

$$\begin{aligned} p(x_1 | x_3) &= 0.2, & p(x_2 | x_1) &= 0.6, \\ p(x_1 | \bar{x}_3) &= 0.4, & p(x_2 | \bar{x}_1) &= 0.2, \\ p(x_3 | x_2) &= 0.8, & p(x_3 | \bar{x}_2) &= 0.5. \end{aligned}$$

Обработаем эти вероятности, как в случае изолированного цикла. Для этого выпишем и решим систему линейных уравнений.

$$\begin{cases} p(x_1) = 0.2p(x_3) + 0.4(1 - p(x_3)) \\ p(x_2) = 0.6p(x_1) + 0.2(1 - p(x_1)) \\ p(x_3) = 0.8p(x_2) + 0.5(1 - p(x_2)). \end{cases}$$

Решив указанную систему получаем, что

$$p(x_1) = \frac{9}{32}, \quad p(x_2) = \frac{5}{16}, \quad p(x_3) = \frac{19}{32}$$

Теперь по формулам

$$p(x_1x_3) = p(x_1 | x_3)p(x_3), \quad p(x_1x_2) = p(x_2 | x_1)p(x_1), \quad p(x_2x_3) = p(x_3 | x_2)p(x_2),$$

$$\text{получаем: } p(x_1x_2) = \frac{27}{160}, \quad p(x_1x_3) = \frac{19}{160}, \quad p(x_2x_3) = \frac{1}{4}.$$

Убедимся, что данное распределение непротиворечиво. Для этого проверим, что существует $p(x_1x_2x_3)$, удовлетворяющее следующему неравенству:

$$\max \left\{ \begin{array}{l} 0, \\ p(x_1x_2) + p(x_1x_3) - p(x_1), \\ p(x_1x_2) + p(x_2x_3) - p(x_2), \\ p(x_1x_3) + p(x_2x_3) - p(x_3) \end{array} \right\} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \min \left\{ \begin{array}{l} p(x_1x_2), \\ p(x_1x_3), \\ p(x_2x_3), \\ 1 - p(x_1) - p(x_2) - p(x_3) + \\ + p(x_1x_2) + p(x_1x_3) + p(x_2x_3) \end{array} \right\}.$$

Или в численном виде: $\frac{17}{160} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \frac{19}{160}$. Таким образом, мы получили, что означивание предков yz дает непротиворечивое распределение вероятностей, на элементах цикла.

Для означивания родителей $\bar{y}\bar{z}$ получаем вероятности на цикле:

$$\begin{aligned} p(x_1 | x_3) &= 0.25, & p(x_2 | x_1) &= 0.6, \\ p(x_1 | \bar{x}_3) &= 0.1, & p(x_2 | \bar{x}_1) &= 0.2, \\ p(x_3 | x_2) &= 0.8, & p(x_3 | \bar{x}_2) &= 0.5. \end{aligned}$$

Решив систему, получим:

$$p(x_1) = \frac{92}{491}, \quad p(x_2) = \frac{135}{491}, \quad p(x_3) = \frac{286}{491},$$

откуда: $p(x_1x_2) = \frac{276}{2455}, \quad p(x_1x_3) = \frac{143}{982}, \quad p(x_2x_3) = \frac{108}{491}$ и

$$\frac{347}{4910} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \frac{276}{2455}.$$

Для означивания родителей $\bar{y}\bar{z}$ получаем вероятности на цикле:

$$p(x_1 | x_3) = 0.2, \quad p(x_2 | x_1) = 0.2,$$

$$p(x_1 | \bar{x}_3) = 0.4, \quad p(x_2 | \bar{x}_1) = 0.9,$$

$$p(x_3 | x_2) = 0.8, \quad p(x_3 | \bar{x}_2) = 0.5.$$

Решив систему, получим:

$$p(x_1) = \frac{123}{479}, \quad p(x_2) = \frac{345}{479}, \quad p(x_3) = \frac{343}{479},$$

откуда $p(x_1x_2) = \frac{123}{2395}, \quad p(x_1x_3) = \frac{343}{2395}, \quad p(x_2x_3) = \frac{276}{479}$ и

$$\frac{347}{4910} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \frac{276}{2455}.$$

Для означивания родителей $\bar{y}\bar{z}$ получаем вероятности на цикле:

$$p(x_1 | x_3) = 0.25, \quad p(x_2 | x_1) = 0.2,$$

$$p(x_1 | \bar{x}_3) = 0.1 \quad p(x_2 | \bar{x}_1) = 0.9,$$

$$p(x_3 | x_2) = 0.8, \quad p(x_3 | \bar{x}_2) = 0.5.$$

Решив систему, получим:

$$p(x_1) = \frac{431}{2063}, \quad p(x_2) = \frac{1555}{2063}, \quad p(x_3) = \frac{1498}{2063},$$

откуда: $p(x_1x_2) = \frac{431}{10315}, \quad p(x_1x_3) = \frac{749}{4126}, \quad p(x_2x_3) = \frac{1244}{2063}$ и

$$\frac{241}{4126} \leq p(x_1x_2x_3) \leq \frac{431}{10315}.$$

Но последнее неравенство не имеет решения. Следовательно, означивания родителей $\bar{y}\bar{z}$ — противоречиво! И это означивание надо исключить из байесовской сети доверия как невозможное. Таким образом, начальное распределение вероятностей на элементах y и z из исходного:

$$p(yz) = 0.18, \quad p(\bar{y}z) = 0.12, \quad p(y\bar{z}) = 0.42, \quad p(\bar{y}\bar{z}) = 0.28,$$

преобразуется в

$$p(yz) = \frac{1}{4}, \quad p(\bar{y}z) = \frac{1}{6}, \quad p(y\bar{z}) = \frac{7}{12}, \quad p(\bar{y}\bar{z}) = 0.$$

Теперь, объединим полученные нами на каждом из шагов вероятности. Для этого сложим вероятности, полученные в каждом из случаев, с весом равным вероятности этого случая. Тогда:

$$p(x_1) = \frac{9}{32} \cdot \frac{1}{4} + \frac{92}{491} \cdot \frac{1}{6} + \frac{123}{479} \cdot \frac{7}{12} + \frac{431}{2063} \cdot 0 = \frac{22698487}{90312576} \approx 0.251,$$

$$p(x_2) = \frac{5}{16} \cdot \frac{1}{4} + \frac{135}{491} \cdot \frac{1}{6} + \frac{345}{479} \cdot \frac{7}{12} + \frac{1555}{2063} \cdot 0 = \frac{8189785}{15052096} \approx 0.544,$$

$$p(x_3) = \frac{19}{32} \cdot \frac{1}{4} + \frac{286}{491} \cdot \frac{1}{6} + \frac{343}{479} \cdot \frac{7}{12} + \frac{1498}{2063} \cdot 0 = \frac{19965967}{30104192} \approx 0.663.$$

На этом мы заканчиваем рассмотрение примера.

Итак, как видно, для каждого означивания родителей цикла получается цикл с конкретными оценками вероятностей. Его можно рассматривать как цикл без родителей, а полученные результаты априорного вывода просуммировать с соответствующими весами. Подытожим вкратце схему алгоритма априорного вывода в цикле с родителями:

- 1) для каждого возможного означивания родителей цикла:
 - а) вычислить маргинальную вероятность этой конфигурации;
 - б) вычислить тензоры условных вероятностей вершин цикла при условии их родителей в цикле в данной конфигурации родителей цикла;
 - в) провести априорный вывод в полученном цикле без родителей;
- 2) просуммировать результаты шагов 1в с весами, полученными в результате шагов 1а.

Вышеописанный алгоритм, очевидно, экспоненциален от количества родителей у цикла, однако в данном случае это не страшно. Во-первых, отметим, что вершины, не соседствующие с циклом напрямую, нас не интересуют; они используются лишь для подсчета вероятностей различных конфигураций означиваний родителей цикла. Во-вторых, практический интерес представляют в первую очередь *разреженные* сети, т.е. сети, в которых у цикла не может быть слишком много родителей; именно такие сети возникают на практике, и именно в них классические алгоритмы байесовского вывода дают значительное ускорение по сравнению с экспоненциальным худшим случаем. В-третьих, одной из главных идей как этого алгоритма, так и всей настоящей работы является то, что цикл можно рассматривать как (и по своим свойствам он очень похож на) один-единственный узел. А аппарат классической БСД относительно количества родителей у одного узла тоже экспоненциален.

Есть и еще одно интересное направление, нуждающееся в дальнейших исследованиях. Как мы уже знаем, цикл может быть противоречив. Разные означивания дают разные циклы. Значит, может сложиться такая ситуация, при которой некоторые означивания предков приводят к противоречивому циклу, а другие — к непротиворечивому. Родители цикла (в наших предположениях) вместе с их предками образуют ациклическую БСД, подсеть исходной. Эта БСД задает распределение вероятностей над всеми атомарными пропозициями, входящими в эту подсеть. Из-за того, что не все означивания родителей цикла оказываются возможными, ряд означиваний приобретает нулевую вероятность. Пересчет вероятностей может привести не только к пересчету оценок вероятностей, но даже к изменению топологии подсети «родители–предки». Конкретные методы и алгоритмы на этом пути составляют одну из самых интересных открытых проблем обобщения БСД на циклический случай.

Подводя краткий итог, отметим, что существующие алгоритмы и методы уже вполне достаточны для того, чтобы создать прототип программной реализации и провести численные эксперименты относительно нескольких частных случаев вложения направленного цикла в ациклическую БСД, хотя эта работа еще впереди. Кроме линейной комбинации результатов априорного вывода с весами, соответствующими вероятностям конфигураций, возможны и другие подходы к обработке результатов. Их тоже нужно исследовать и сравнить с предлагаемым.

8. Циклы в алгебраических байесовских сетях

Несмотря на то, что основной упор в нашей статье делается на циклы в байесовских сетях доверия, задача обработки циклов в теории АБС является также очень важной. В АБС есть возможность обработать цикл тривиальным образом: погрузить его в объемлющий фрагмент знаний. Однако так можно поступать лишь с небольшими циклами; для циклов, содержащих много пропозиций, получающиеся структуры будут требовать слишком больших вычислительных ресурсов. Алгоритм, который мы изложим и проиллюстрируем в этом разделе, помогает понять, противоречив ли цикл из ФЗ АБС, а если цикл непротиворечив, то алгоритм дает конкретное распределение, согласованное с данными цикла. Точнее говоря, мы дадим *достаточное* условие непротиворечивости цикла (которое, тем не менее, не будет *необходимым*). Кроме того, если непротиворечивость цикла удастся проверить этим условием, то цикл, как мы покажем ниже, преобразуется в цепь фрагментов знаний [10] не слишком большого порядка, удобную для вычислений.

Начнем с простейшей ситуации — цикла из фрагментов знаний второго порядка (рис. 5). Алгоритм, который мы предлагаем, должен вести себя следующим образом.

Сначала выберем вершину (в нашем примере это вершина w). Для того чтобы достаточное условие выполнялось, нам не важно, какая именно это вершина. Поэтому, если с одной вершиной не получилось, ничто не противоречит тому, что может получиться с другой — теоретически алгоритм может выглядеть как «перебираем вершины до тех пор, пока не получится», и только если ни в одной из вершин цикла достаточное условие не выполняется, придется признать поражение (неприменимость данного метода к данному циклу).

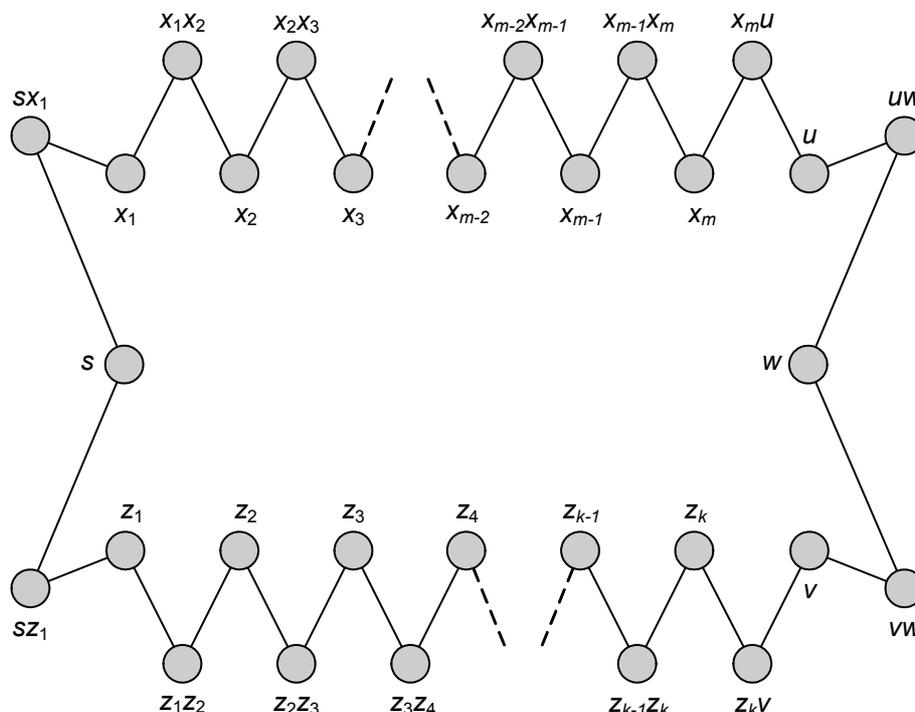


Рис. 5. Цикл ФЗ АБС второго порядка.

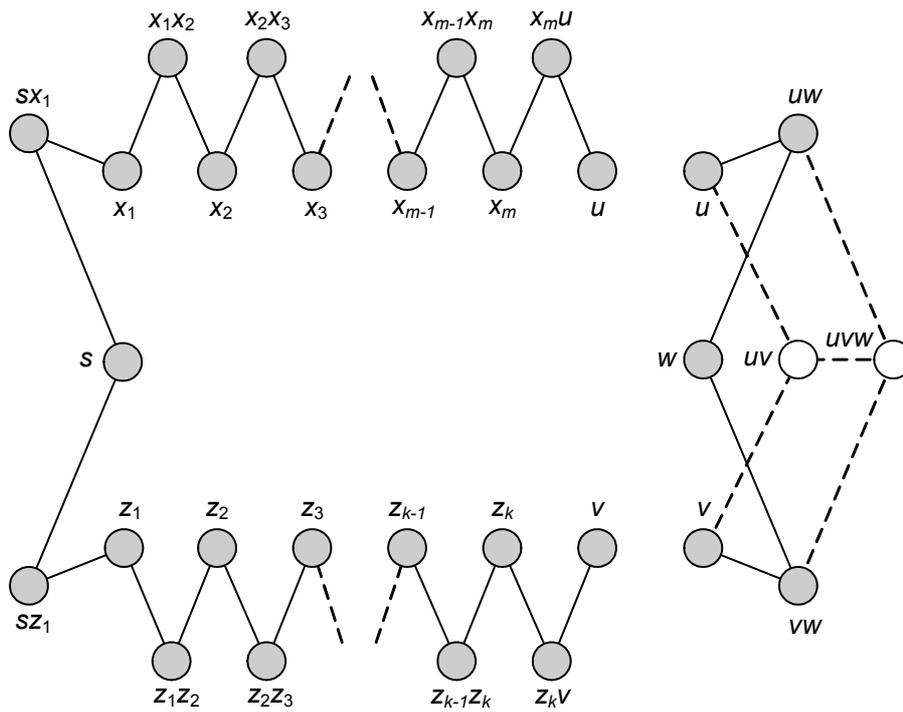


Рис. 6. Разъятый цикл ФЗ АБС второго порядка.

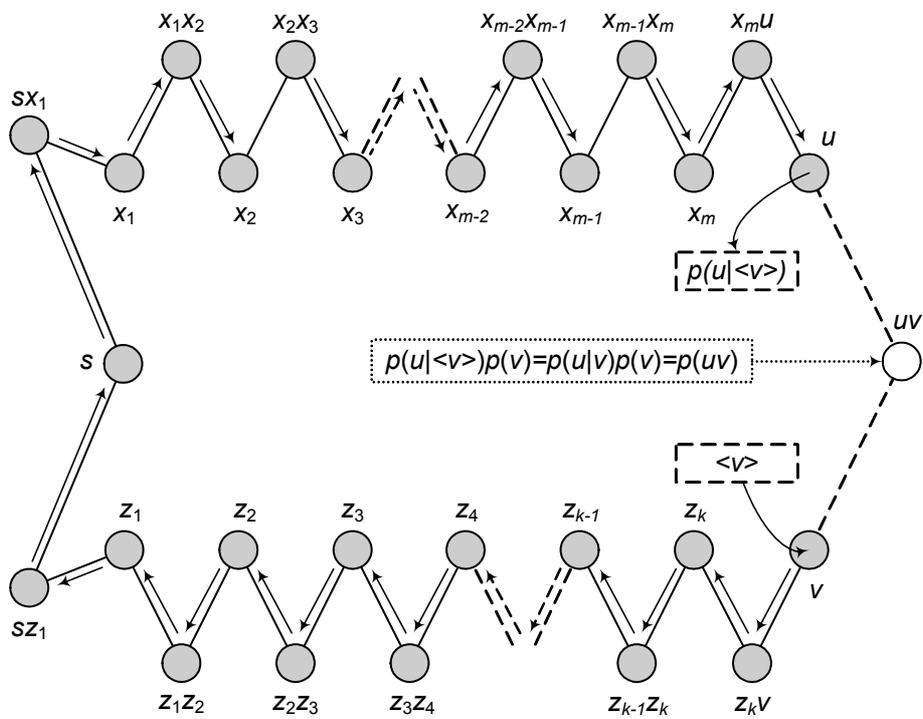


Рис. 7. Пропагация в разъятом цикле.

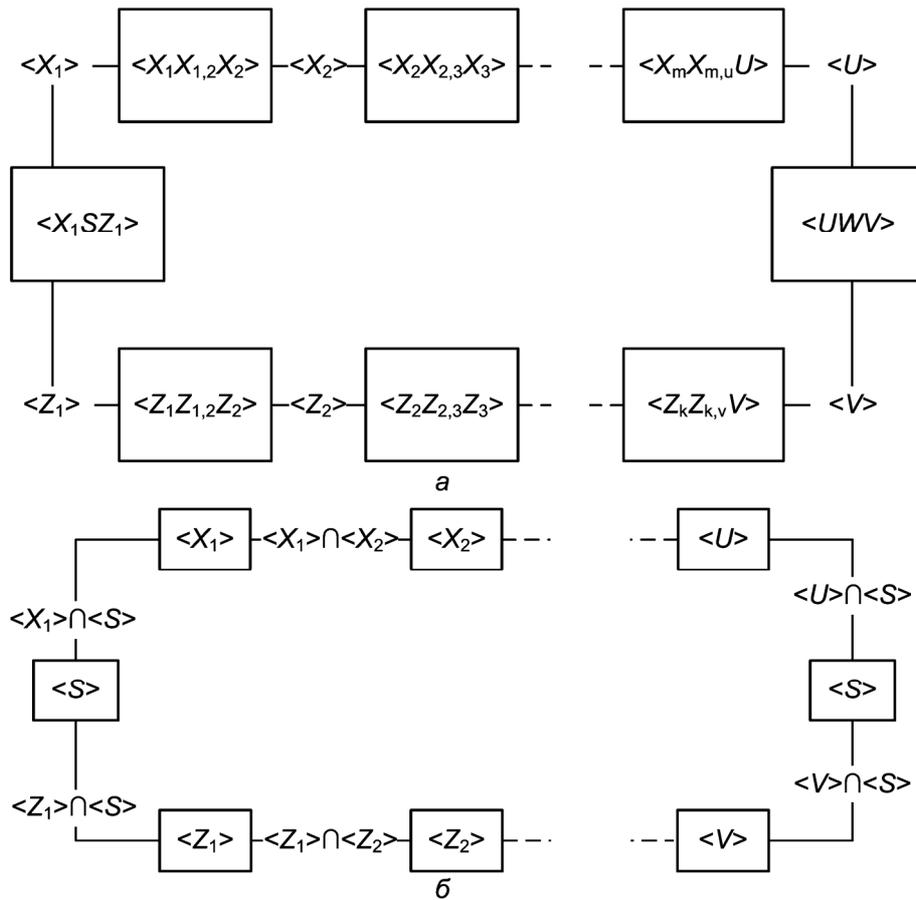


Рис. 8. Общий вид цикла ФЗ АБС.

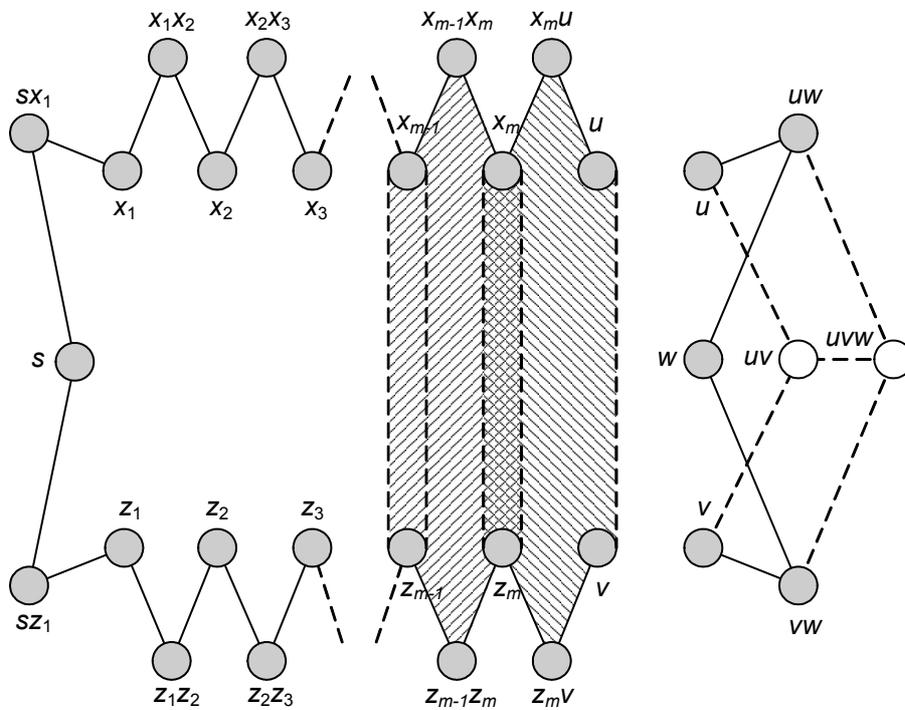


Рис. 9. Преобразование цикла в цепь.

Выбрав вершину, мы хотим теперь временно исключить ее из цикла, тем самым разорвав его. Для этого придется изъять из цикла фрагменты знаний $\{u, w\}^\Delta$ и $\{w, v\}^\Delta$. Ими мы займемся отдельно; для этого нужно будет достроить полученную пару фрагментов знаний до объемлющего ФЗ третьего порядка $\{u, w, v\}^\Delta$, добавив конъюнкты uv и uvw (рис. 6).

Итого, фактически у нас остались длинная цепь из фрагментов знаний второго порядка и недостроенный фрагмент знаний третьего порядка; такую сеть нам нужно проверить на непротиворечивость. Чтобы учесть влияние бывшего цикла на ФЗ третьего порядка, поступим следующим образом: вычислим по имеющимся данным вероятность $p(uv)$. Для этого нужно (рис. 7) пропагировать свидетельство $\langle v \rangle$ вдоль по длинной цепи, вычислив таким образом условную вероятность $p(u | \langle v \rangle)$, а затем получить вероятность $p(uv)$ по формуле

$$p(u | \langle v \rangle)p(v) = p(u | v)p(v) = p(uv).$$

В итоге получаем цепь из фрагментов знаний второго порядка $vz_k \dots z_1 s x_1 \dots x_m u$ (фактически эту цепь можно считать единым ФЗ, приняв за основу построения этого единого ФЗ гипотезу об условной независимости [11]) и ФЗ третьего порядка $\{u, w, v\}^\Delta$, которые пересекаются по ФЗ второго порядка $\{u, w\}^\Delta$, причем в пересечении оценки вероятностей согласованы. На последнем шаге алгоритма нужно просто провести процесс поддержания непротиворечивости в ФЗ третьего порядка, где заданы вероятности всех конъюнктов, кроме $p(uvw)$. Если интервал для этого конъюнкта будет непуст, то мы получим семейство распределений, удовлетворяющее всем исходным данным цикла (нужно будет только продолжить его на длинную цепь, что уже фактически было сделано при апостериорном выводе) и, тем самым, докажем непротиворечивость исходного цикла. Более того, из этого семейства можно будет выделить распределение, удовлетворяющее гипотезе условной независимости несоседствующих фрагментов знаний относительно ФЗ, лежащих между ними в длинной цепи $vz_k \dots z_1 s x_1 \dots x_m u$. А вот если в результате интервал для $p(uvw)$ окажется пуст, это будет означать, что гипотеза условной независимости в этой сети несовместима с исходными данными. Но это вовсе не означает, что исходный цикл глобально противоречив. Вполне возможно, что распределение получится достроить каким-либо иным способом.

Мы для простоты рассматривали случай цикла из ФЗ второго порядка. Однако для более общей ситуации, изображенной на рис. 8, фактически ничего не меняется. В случае, когда пересекаются только соседние фрагменты знаний в цикле (рис. 8а), достаточно, как и в случае ФЗ второго порядка, изъять один фрагмент знаний W и построить объемлющий ФЗ над $X_m X_{m,u} U W V Z_{k,v} Z_k$. А в случае, когда пересечения могут происходить и между более далекими фрагментами знаний (рис. 8б), может потребоваться удалить из цикла больше одного фрагмента знаний и построить объемлющий фрагмент над всеми ФЗ, с которыми пересекался исходный ФЗ S . Однако суть алгоритма от этого не меняется: по-прежнему подсчитываем условные вероятности путем пропации свидетельства (теперь уже это может оказаться не одно свидетельство, а целый кортеж, причем пропагировать придется уже не одно, а все возможные означивания элементов этого кортежа), подставляем результат в ФЗ, построенный над

изъятыми фрагментами, и проверяем полученный ФЗ на непротиворечивость. Основная идея, как и прежде, в том, что после изъятия нескольких соседствующих элементов от цикла останется цепь ФЗ, свойства которой мы хорошо знаем.

Далее. Пока что мы всего лишь проверили цикл на непротиворечивость. Что делать с ним, даже если непротиворечивость уже установлена нашим методом? Погружать цикл в объемлющий ФЗ дорого, да и не понятно в таком случае, в чем же будет выигрыш от применения нашего метода. К счастью, есть идея, позволяющая преобразовать такой ФЗ в линейную цепь из ФЗ третьего--четвертого порядков. Для этого (возвращаемся в случай цикла из ФЗ второго порядка) отметим, что наш изъятый фрагмент знаний пересекается с двумя ФЗ: $\{x_m, u\}^\Delta$ и $\{z_m, v\}^\Delta$. Чтобы получилась цепь, нужно эти два ФЗ объединить; давайте так и сделаем, создав единый ФЗ $\{x_m, u, v, z_m\}^\Delta$. Оценки вероятностей в нем восстанавливаются точно при помощи гипотезы об условной независимости; нужно только знать оценку вероятности $p(x_m z_m)$, которая получится пропагацией свидетельства $\langle x_m z_m \rangle$ по той же схеме, которой мы пользовались выше. А затем повторим процедуру, получив ФЗ $\{x_{m-1}, x_m, z_m, z_{m-1}\}^\Delta$ (именно этот момент изображен на рис. 9, где заштрихованы два новообразованных ФЗ)² и так далее. В итоге получим цепь из ФЗ четвертого порядка (один из них может оказаться третьего порядка, если общее число переменных в цепи окажется нечетным). С этой цепью можно работать точно так же, как с любой другой цепью ФЗ. Аналогично можно поступить и когда ФЗ исходного порядка имеют порядок больше 2; в любом случае получится примерно двукратное увеличение порядка участвующих в сети фрагментов знаний.

9. Заключение и открытые вопросы

Одна из главных идей этой работы состоит в том, что *к циклу надо относиться как к фрагменту знаний*. Теоретических ограничений на его размер не существует, но, разумеется, байесовские сети будут работать, только если размер ФЗ небольшой. Однако на практике фрагменты знаний не бывают слишком большими и, более того, родителей у цикла не может быть слишком много. Интересными являются как раз «редкие» сети, где количество предков у каждого узла или цикла невелико. Для этого класса мы построили алгоритм, позволяющий достаточно эффективно осуществлять первичную пропагацию и априорный вывод.

Если мы будем последовательно развивать нашу точку зрения на цикл в БСД как на фрагмент знаний, то тогда в терминах БСД-исчислений его можно будет рассмотреть как узел. Только в этом узле задан не единственный тензор условных вероятностей, а их семейство (возможно, пустое). Более того, это семейство выпукло, задано линейными ограничениями. Вопрос состоит в том, как обрабатывать такие семейства, как их представлять, как обобщать свойства.

Еще одно интересное направление — элиминация узлов в цикле. Было бы

²Следует обратить внимание на то, что раньше переменных z было k штук, а теперь их m — столько же, сколько и переменных x : естественно, если получать множества переменных путем «отщипывания» по одной пропозиции с каждого края цепи, их количество будет одинаковым.

весьма полезно разработать процедуру, которая позволила бы удалять вершины из цикла. Правда, для этого придется либо предположить, что свидетельства в удаляемые вершины поступать не будут, либо разработать специальные методы апостериорного вывода, учитывающие эти свидетельства в сокращенном цикле (например, предположить выполнение свойства d -разделимости локально, на некоторых подцепях цикла). Интересно оставлять лишь те узлы, у которых есть предки, или те узлы, у которых есть либо предки, либо потомки. Однако нужно понимать, что это приведет к уменьшению количества степеней свободы в семействе распределений вероятностей; иными словами, элиминация переменных — это сужение семейства распределений. При этом крайне желательное свойство элиминации — то, что полученное в результате элиминации семейство должно входить в исходное «большое» семейство.

Наконец, еще одно направление, которого мы не касались в настоящей статье, но которое обязательно должно быть исследовано, — это апостериорный вывод. Как пропагировать свидетельства в цикле? Что происходит с циклом, если в нем появляется свидетельство? А если у его потомка или предка? Эти вопросы составят предмет наших дальнейших исследований.

Исследования, результаты которых изложены в настоящей статье, частично поддержаны государственным контрактом 02.442.11.7289.

Литература

1. Heckerman D., Chickering D., Meek C., Rounthwaite R., Kadie C. Dependency Networks for Inference, Collaborative Filtering, and Data Visualization // *Journal of Machine Learning Research*. 2000. №1. P. 49–75. Also appears as Technical Report MSR-TR-00-16, Microsoft Research, February, 2000.
2. Николенко С. И., Тулупьев А. Л. Учет направленных циклов в байесовских сетях доверия: семантика и вопросы сложности // Сб. научных трудов III международного научно-практического семинара «Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте». М.: Физматлит, 2005. С. 376–382.
3. Николенко С. И., Тулупьев А. Л. Простейшие циклы в байесовских сетях доверия: распределение вероятностей и возможность его непротиворечивого задания // Труды СПИИРАН. 2004. Выпуск 2, том 1. СПб.: Наука. С. 119–126.
4. Николенко С. И., Тулупьев А. Л. Разворот ребер как метод работы с направленными циклами в байесовских сетях // Научная сессия МИФИ-2005. Сборник научных трудов (в 15 томах). Том 3. Интеллектуальные системы и технологии. М., МИФИ, 2005. С. 176–178.
5. Тулупьев А. Л., Николенко С. И. Циклы обратной связи узлов с одним предшественником в байесовских сетях доверия // Труды IX конференции «Региональная информатика», Санкт-Петербург, 2004. С. 65–66.
6. Tulupuyev A. L., Nikolenko S. I. Directed Cycles in Bayesian Belief Networks: Probabilistic Semantics and Consistency Checking Complexity // MICAI 2005: Advances in Artificial Intelligence. 4th Mexican International Conference on Artificial Intelligence, Monterrey, Mexico, November 14-18, 2005, Proceedings Series: Lecture Notes in Computer Science; Subseries: Lecture Notes in Artificial Intelligence, Vol. 3789. / Gelbukh, Alexander; Terashima, Hugo (Eds.) 2005, XXVI. P. 214–223.
7. Jensen F. V. Bayesian Networks and Decision Graphs. New York: Springer-Verlag, 2001. 268 p.
8. Cowell R. G., Dawid A. P., Lauritzen S. L., Spiegelhalter D. J. Probabilistic Networks and Expert Systems. New York: Springer-Verlag, 1999.
9. Тулупьев А. Л., Николенко С. И., Сироткин А. В. Байесовские сети: логико-вероятностный подход. СПб.: Наука, 2006. 607 с.
10. Николенко С. И., Тулупьев А. Л. Вероятностная семантика байесовских сетей в случае линейной цепочки фрагментов знаний // Труды СПИИРАН. 2005. Выпуск 2, том 2. СПб.: Наука. С. 53–75.
11. Тулупьев А. Л. Алгебраические байесовские сети: логико-вероятностный подход к моделированию баз знаний с неопределенностью. СПб.: СПИИРАН, 2000. 282 с.