УДК 004.8

А.В. Вяткин, А.А. Фильченков, А.Л. Тулупьев, В.Ф. Мусина, К.В. Фроленков

ПОДХОДЫ К УСТРАНЕНИЮ ЦИКЛИЧНОСТИ ПЕРВИЧНОЙ СТРУКТУРЫ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ БАЙЕСОВСКОЙ СЕТИ

Вяткин А.В., Фильченков А.А., Тулупьев А.Л., Мусина В.Ф., Фроленков К.В. **Подходы к устранению цикличности первичной структуры алгебраической байесовской сети.**
Аннотация. Одним из условий эффективности алгоритмов логико-вероятностного вывода в алгебраической байесовской сети (АБС) является условие ацикличности представляющего её графа. Введение гиперграфового представления структур АБС позволило применять методы преобразования данного графа к ациклическому виду, основывающиеся на методах теории древовидной декомпозиции. Рассмотрена общая схема метода приведения сети к ациклическому виду, использующего элименирующие последовательности. Приведены основные классы эвристических алгоритмов поиска элименирующих последовательностей, применимых в контексте преобразования АБС, а так же оценки их сложности и качества получаемых результатов.
Ключевые слова: алгебраическая байесовская сеть, элименирующая последовательность, ацикличность.

Vyatkin A.V., Filchenkov A.A., Tulupyev A.L., Musina V.F., Frolenkov K.V. **Approaches for algebraic Bayesian networks primary structure cyclicity elimination.**
Abstract. One of the conditions for the effectiveness of the algorithms of logical and probabilistic inference in algebraic Bayesian network (ABN) is an acyclicity of its graphical representation. Introduction of hypergraphic representation of ABN structures allowed applying the methods of converting this graph to an acyclic form, basing on the methods of the theory of tree decomposition. The general scheme of the method of converting the network to acyclic one with the help of elimination sequences is considered. The main classes of heuristic elimination sequence search algorithms which are appropriate in the context of the transformation of the ABN, as well as evaluation of their complexity and quality of the results are presented.
Keywords: algebraic Bayesian networks, elimination sequence, acyclicity.

1. Введение. Вероятностная графическая модель (ВГМ) — это математическая модель знаний с неопределенностью, в основе которой лежит представление предметной области в виде графа. Неопределенность знаний моделируется при помощи аппарата теории вероятностей. В качестве узлов такого графа выступают сложным образом устроенные случайные элементы, а ребра характеризуют определенную зависимость между ними [7, 32, 36]. Вероятностные графические модели широко и успешно применяются для широкого класса задач, включающего такие области, как компьютерное зрение, рекомендательные системы, распознавание речи, медицинская диагностика, оценка экономических рисков [2, 36].

Алгебраическая байесовская сеть (АБС) [5] — ВГМ, в основе которой лежит логико-вероятностный подход, введенный в искусственный интеллект Нильссоном [40], в формализации Хальперна, Фейгина и Меджиддо [28, 29]. Одним из основных преимуществ использования логико-вероятностного подхода к описанию неопределенности является возможность работать помимо скалярных, также и с интервальными оценками вероятностей [4, 7, 47], которые являются неотъемлемой частью экспертной информации.

В АБС выделяют локальную и глобальную структуры, различают первичную и вторичную глобальные структуры. Первичная структура АБС представляет собой набор фрагментов знаний (точнее, математических моделей фрагментов знаний), которыми в теории АБС выступают идеалы конъюнктов с заданным на них семейством вероятностных распределений. Вероятностные распределения интервальных оценок истинности представлены внутренней и внешней мерой истинности каждого конъюнкта, вероятностные распределения скалярных оценок истинности представлены функцией вероятности истинности каждого конъюнкта. Вторичная структура представляет собой ненаправленный граф с вершинами, соответствующими элементам первичной структуры. Было показано [15], что в качестве вторичной структуры АБС может выступать лишь граф, обладающий особыми свойствами — граф смежности [15]. Вторичная структура позволяет осуществлять глобальный логико-вероятностный вывод, а также эффективно поддерживать непротиворечивость и осуществлять визуализацию АБС [7, 13].

Для корректного осуществления логико-вероятностного вывода требуется *ацикличность вторичной структуры* АБС [7]. В свою очередь, не каждая первичная структура обеспечивает возможность построения ациклической вторичной структуры. Первичные структуры, над которыми возможно построить лишь циклический граф смежности будем называть *циклическими*, первичные структуры, допускающие построение ациклической вторичной структуры — *ациклическими*. Существуют два подхода к устранению цикличности графа смежности: преобразование самого графа смежности или же преобразование исходной первичной структуры АБС [7]. Отметим, что изменение графа смежности подразумевает изменение первичной структуры АБС, таким образом, второй подход является более общим.

Цель работы — представить обзор подходов к устранению цикличности первичной структуры АБС, опирающихся на методы теории древовидной декомпозиции.

2. Основные определения и обозначения. Будем следовать системе терминов и обозначений, введенной в [10]. *Алфавитом* A мы будем называть множество атомарных пропозициональных формул (атомов) $A = \{x_1, \dots x_n\}$. *Фрагментом знаний* (ФЗ) называется пара $(\mathcal{C}(A'), \boldsymbol{p})$, где $\mathcal{C}(A')$ — идеал конъюнктов над подалфавитом A', а $\boldsymbol{p}$ — функция, сопоставляющая каждому конъюнкту из идеала $\mathcal{C}(A')$ замкнутый интервал $[a, b] \in [0,1]$, характеризующий интервальную вероятность истинности конъюнкта. *Максимальным фрагментом знаний* (МФЗ) в наборе ФЗ, мы будем называть фрагмент знаний, максимальный по включению. Идеал такого ФЗ не содержит никакой другой идеал, соответствующий какому-либо иному ФЗ из набора.

Таким образом, первичной структурой АБС, построенной над алфавитом A, называется набор МФЗ, построенных над подалфавитами алфавита A, образующими его покрытие. Обозначим первичную структуру над алфавитом A как PS_A. *Протоструктурой* АБС для заданной первичной структуры АБС над алфавитом A, называется ненаправленный граф, построенный над тем же алфавитом, в котором вершины соответствуют атомам алфавита и две вершины связаны ребром, в том случае, если они лежат в одном ФЗ первичной структуры.

Первичная структура АБС используется, чтобы производить локальный логико-вероятностный вывод, например распространять свидетельства внутри одного фрагмента знаний. Для осуществления глобального вывода, заключающегося, например, в распространении полученного свидетельства между фрагментами знаний, необходимо построить связи между ними. Вторичная структура АБС [13] является графом, вершинами которого служат фрагменты знаний, а ребра отражают возможность передачи свидетельства между фрагментами знаний.

Нагруженный граф — тройка $\langle G, A, W \rangle$, где G — граф, A — алфавит, а W — функция нагрузки, заданная на вершинах и ребрах G и принимающая значения из множества подалфавитов алфавита A:

$$W: V(G) \cup E(G) \to 2^A.$$

Сепаратором двух вершин называется пересечение нагрузок соответствующих вершин: $\mathrm{Sep}(\{v, u\}) = W(v) \cap W(u)$. Согласованным нагруженным графом называется нагруженный граф, в котором нагрузка ребра между вершинами равна их сепаратору.

Во введенном формализме A соответствует подалфавиту, над которым задается первичная структура АБС, а нагрузка вершин соответствует подалфавитам, над которыми построены фрагменты знаний.

Если сепаратор двух вершин непуст, то такие вершины называются *сочлененными*.

Графом максимальных фрагментов знаний (графом МФЗ) над данной первичной структурой PS_A мы будем называть граф, построенный над подалфавитами, входящими в PS_A, и такой, что ребра в нем возможны только между сочлененными вершинами. Обозначим множество таких графов, как $\mathrm{MKPG}(\mathrm{PS}_A)$.

Если между двумя сочлененными вершинами в графе существует путь, в котором нагрузка каждой вершины содержит сепаратор концов этого пути, то эти вершины *магистрально связны*. Граф называется *магистрально связным*, если в нем каждая пара сочлененных вершин магистрально связна. Множество магистрально связных графов над первичной структурой PS_A обозначим как $\mathrm{BBcon}(\mathrm{PS}_A)$.

Граф смежности — магистрально связный граф МФЗ. Множество графов смежности над первичной структурой PS_A обозначим как $\mathrm{JG}(\mathrm{PS}_A)$: $\mathrm{JG}(\mathrm{PS}_A) = \mathrm{MKPG}(\mathrm{PS}_A) \cap \mathrm{BBcon}(\mathrm{PS}_A)$.

Максимальный граф смежности $G_{\max}(\mathrm{PS}_A)$ — граф смежности с максимальным числом ребер: $G_{\max}(\mathrm{PS}_A) = \mathrm{argmax}_{G \in \mathrm{JG}(\mathrm{PS}_A)} |E(G)|$. Определение корректно, поскольку над заданной первичной структурой существует единственный максимальный граф смежности [15].

Минимальным графом смежности называется граф смежности, число ребер которого минимально. Множество минимальных графов смежности над первичной структурой PS_A будем обозначать как $\mathrm{MJG}(\mathrm{PS}_\mathrm{A})$. В общем случае минимальных графов смежности может быть несколько [12 , 15].

Вторичной структурой АБС может выступать какой-либо граф смежности. Обычно в качестве вторичной структуры рассматривают минимальный граф смежности. Задача обучения вторичной структуры сводится к построению вторичной структуры, оптимальной (или хотя бы приемлемой в определенном смысле) с точки зрения применения алгоритмов глобального логико-вероятностного вывода в АБС [8].

3. Ацикличность первичной структуры. Как уже отмечалось, корректная работа известных алгоритмов апостериорного логико-вероятностного вывода требует ацикличности вторичной структуры АБС [6, 16]. Однако не каждая первичная структура допускает построение ациклической вторичной структуры [11]. Первичная структура называется *связной*, если она допускает построение графа смежности, который бы являлся связным. Известно [11], что все минимальные графы смежности над первичной структурой связны или несвязны одновременно, а также, что графы смежности являются циклическими или ациклическими одновременно. Вообще говоря, существует алгоритм апостериорного вывода, не использующий вторичную структуру [17], но для его работы также требуется ацикличность первичной структуры.

Как уже отмечалось, существует два подхода к приведению вторичной структуры АБС к ациклическому виду. В настоящей работе рассмотрен более широкий подход, который заключается в преобразовании первичной структуры АБС таким образом, чтобы она допускала построение ациклического графа смежности.

Задача устранения ацикличности первичной структуры может быть сведена к задаче устранения ацикличности минимального гиперграфа. Свойство ацикличности последнего эквивалентно хордальности первичного графа и совпадению его максимальных клик с ребрами гиперграфа.

Таким образом, чтобы преобразовать циклическую первичную структуру к ациклической, необходимо изменить ее так, чтобы ее протоструктура стала триангулярной. Единственное доступное преобразование протоструктуры — это добавление ребер (удаление ребра в общем случае приводит к изменению вероятностной семантики такой структуры [9]). Добавление ребер к протоструктуре АБС называется *триангуляцией*.

Весом ФЗ называется мощность соответствующей ему нагрузки. Общий вид алгоритмов преобразования первичной структуры к ациклической с помощью триангуляции, выглядит следующим образом:

1. Построить по нагрузкам ФЗ первичной структуры АБС соответствующую ей протоструктуру.
2. Триангулировать протоструктуру.
3. Преобразовать триангулированную протоструктуру в набор нагрузок новой первичной структуры АБС.
4. Построить по набору нагрузок новую первичную структуру АБС на основе вероятностной семантики прежней первичной структуры [9].

Поскольку описанный алгоритм преобразования структуры сети (шаги 1-3) не учитывает вероятностную семантику, во время его исполнения достаточно обладать знаниями о нагрузках ФЗ, входящих в протоструктуру.

Первый этап алгоритма рассмотрен в [36], третий этап представлен в [30], сложность каждого из этих этапов полиномиальна. Основную проблему представляет второй этап алгоритма. Важность второго этапа обусловлена тем, что триангуляция может производиться неоднозначно, а от получаемой структуры напрямую зависит время выполнения логико-вероятностного вывода на АБС. Чтобы определить, какой из полученных графов предпочесть, вводятся метрики, опирающиеся на асимптотическую сложность вывода при заданной протоструктуре. Поскольку асимптотическая сложность вывода на вторичной структуре равна $\Omega(2^m)$, где m — максимальный вес ФЗ в полученной первичной структуре, для лучшей производительности сети нужно минимизировать такой вес. Таким образом, в качестве метрики как правило используются функции:

$$\mathrm{maxWidth}(\mathrm{PS}_A) = \max_{(\mathcal{C}(A'),\boldsymbol{p})\in\mathrm{PS}_A} |A'|,$$

$$\mathrm{expWidth}(\mathrm{PS}_A) = \sum_{(\mathcal{C}(A'),\boldsymbol{p})\in\mathrm{PS}_A} 2^{|A'|}.$$

В итоге для заданной первичной структуры задача состоит в том, чтобы построить из нее протоструктуру, определить, является ли она цикличной, и при положительном результате триангулировать, затем выделить из нее новую, уже ациклическую первичную структуру.

Максимальной кликой графа называется максимальная по включению клика (полный граф). В протоструктуре максимальные клики соответствуют фрагментам знаний первичной структуры. Тогда наибольшая по мощности максимальная клика в протоструктуре будет соответствовать фрагменту знаний с наибольшей нагрузкой для первичной структуры, соответствующей этой протоструктуре. Задача триангуляции графа (в нашем случае, протоструткуры) с минимизацией максимального веса (фрагмента знаний в соответствующей первичной структуре) в англоязычной литературе называется triangulation of minimum treewidth [19] и является NP-трудной [18], что говорит о необходимости использования эвристик.

4. Алгоритмы триангуляции. В дальнейшем будет использована базовая терминология и обозначения из теории графов согласно [30]. Подграф графа G, индуцированный его вершинами $v_0, v_1, .., v_n$, мы будем обозначать, как $G_{v_i, v_{i+1}, \dots, v_n}$. Вершина v ненаправленного графа G называется *симплициальной*, если множество смежных с ней вершин $\mathrm{Adj}(v)$ индуцирует полный подграф G. Для графа G последовательность всех его вершин $\mathrm{Seq} = (v_0, v_1, .., v_n)$ называется *идеальной элиминирующей последовательностью*, если каждая вершина v_i является симплициальной для подграфа $G_{v_i, v_{i+1}, \dots, v_n}$. Триангулярность графа эквивалентна существованию для такого графа идеальной элиминирующей последовательности [30].

4.1. Связь триангуляции и элиминирующей последовательности. Как правило, для триангуляции графа применяется следующий метод [26, 42]: берется какая-либо перестановка всех вершин графа, и с помощью соответствующим образом упорядоченной последовательности вершин граф преобразовывается таким образом, что заданная последовательность будет являться его идеальной элиминирующей последовательностью [30]. Ниже приведен алгоритм триангуляции графа по элиминирующей последовательности:

Даны граф $G = \langle V, E \rangle : |V| = n$, вершины которого пронумерованы и перестановка $\delta : \{1, \dots, n\} \to \{1, \dots, n\}$.

Для всех i от 1 до n

1. Для набора вершин S_i, смежных с $V_{\delta(i)}$, добавляем ребра между всеми несмежными парами вершин из S_i. Обозначим такой набор ребер через L_i.
2. Удаляем из графа вершину $V_{\delta(i)}$.
3. Добавляем в граф ребра из $L_i : i \in \{1, \dots, n\}$.

С помощью приведенного алгоритма для произвольного графа G можно получить любую его триангуляцию [30]. Другими словами, для любой триангуляции T найдется такая последовательность вершин графа Seq_T, что для нее алгоритм выдаст триангулированный граф $T(G)$. Благодаря тому, что сложность этого алгоритма полиномиальна [30], вместо задачи триангуляции графа обычно рассматривается задача поиска такой последовательности, триангуляция графа по которой будет минимальна согласно метрике $\mathrm{maxWidth}$ [30, 36]. Более подробно теоретические аспекты этого метода рассмотрены в [43].

4.2. Задача поиска элиминирующей последовательности. *Шириной* первичной структуры АБС называется максимальный вес ФЗ её первичной структуры. Сложность алгоритмов логико-вероятностного вывода (как временная, так и емкостная) в АБС экспоненциальна относительно ширины ее первичной структуры [3, 7]. Это замечание объясняет введенные выше метрики $\mathrm{maxWidth}$ и $\mathrm{expWidth}$.

Как правило, для поиска элиминирующей последовательности используются эвристики. Константное приближение к наименьшему результату за полиномиальное время, если рассматривать в качестве метрики $\mathrm{maxWidth}$, согласно [19] — открытый вопрос; известен детерминированный, работающий за полиномиальное время алгоритм логарифмической аппроксимации, что практически бесполезно на практике [19]. Обычно эвристики сравниваются на каких-либо тестовых наборах, поскольку точные оценки эффективности труднодостижимы.

Довольно часто для поиска элиминирующей последовательности используется следующий подход:

1) вводится функция стоимости $\mathrm{Cost}: V \times \{G\} \to Z$;
2) на i-той итерации выполнения алгоритма определяется вершина v, такая что на (v, G) достигается минимум функции Cost, номер данной вершины определяет i-тый элемент элиминирующей последовательности;
3) после выполнения шага 2) вершина v удаляется из графа, и на следующей итерации алгоритм работает с уже модифицированным графом.

Более подробный обзор таких эвристик представлен в [26], в нашей статье мы рассмотрим некоторые из них с учетом специфики структуры АБС.

Для простых эвристик [36] в качестве функции Cost выступают:

- Min-neighbors(v, G) — степень v вершины в графе G. Соображения об эффективности этой эвристики приведены в [22].
- Min-fill(v, G) — число ребер, которые добавляются в граф G перед элиминацией вершины v, т.е. число ребер, которые проводятся между вершинами, смежными с v, для того, чтобы подграф, состоящей из соседей v, стал полным.

Алгоритмы, основанные на этих эвристиках, наиболее просты в реализации и достаточно быстро работают, но результаты их работы часто бывают значительно хуже по сравнению с остальными алгоритмами, рассматриваемыми в данной статье [26].

Ниже приведем эвристику, показывающую наилучшие результаты среди эвристик, представленных в [26]:

$$\mathrm{Cost}(X_i, G) = S\,(i, G)/C\,(i, G),$$

где $S(i, G)$ — размер наибольшей клики, остающейся после удаления некоторой вершины X_i, а $C(i, G)$ — сумма размеров клик подграфа, состоящего из X_i и смежных с ней вершин.

Эта эвристика показывает лучшие результаты в среднем, но алгоритмы на её основе сложнее в реализации и имеют худшую производительность [26].

4.3. Стохастические алгоритмы. Задача поиска идеальной элиминирующей последовательности может быть рассмотрена как задача поиска в пространстве перестановок наиболее подходящей перестановки, соответствующей лучшей в указанном смысле последовательности. Такая постановка задачи сходна с постановкой задачи коммивояжера, где также происходит поиск лучшей перестановки вершин в графе [1]. Для решения задачи коммивояжера на практике часто используются стохастические алгоритмы, такие как метод имитации отжига, и генетические алгоритмы, поэтому аналогичные подходы применялись и к задаче триангуляции графа.

Методом имитации отжига [39] называют эвристический алгоритм поиска, итеративно и вероятностно улучшающий решение. Поиск решения задачи триангуляции графа с минимальной шириной методом отжига рассмотрен в статьях [33, 34].

Генетическими алгоритмами называется класс алгоритмов поиска [31, 39]. Алгоритмы, принадлежащие к данному классу, генерируют начальный набор решений (популяцию), затем с использованием fitness-функции, предназначенной для оценки качества решений, из набора выбираются решения, на основе которых будет сгенерирована новая популяция. Такие алгоритмы зачастую носят вероятностный характер, так как немаловажную роль в них играют случайные изменения решений (мутации). Решение задачи триангуляции с помощью генетических алгоритмов [21, 39] было рассмотрено в [37, 38].

На основе предыдущих попыток применения стохастических алгоритмов для задачи триангуляции, с учетом их недостатков и достоинств, в статье [44] был изложен двухэтапный генетический алгоритм поиска лучшей элиминирующей последовательности.

4.4. Асимптотически близкие к решению алгоритмы. Задача поиска триангуляции с минимальной шириной NP–трудна. Существование алгоритма триангуляции с константным фактором (это означает, что гарантирован результат $\mathrm{factor} \cdot \mathrm{OPT}$, где OPT — это размер оптимального решения, а factor — константа) полиномиальной сложности является открытой проблемой.

Наилучшее приближение достигнуто в [19], это приближение с множителем $\log(k)$, где k — это размер наибольшей клики при оптимальной триангуляции. В той же работе представлены несколько алгоритмов триангуляции с постоянными множителями, имеющие экспоненциальную, относительно k, сложность, и показана возможность их применения для реальных задач.

Существуют полиномиально-сложные алгоритмы поиска константного приближения к решению для отдельных классов графов, таких, как планарные [20, 41], AT-free [25] и single-crossing minor-free [27].

4.5. Алгоритмы предварительной обработки графа. В [23] был рассмотрен вопрос, актуальный для многих труднорешаемых на практике задач в применении к задаче триангуляции графов: как можно эффективно предварительно обработать входные данные так, чтобы свести задачу к меньшей по объему, не теряя при этом в качестве получаемого решения.

Для указанного графа G вычисляется константа low, которая снизу ограничивает значение функции $\mathrm{TREEWIDTH}(G)$ [24, 35] (как уже было упомянуто, задача нахождения точного значения NP-трудна). Авторы предлагают и доказывают корректность нескольких возможных правил для преобразования графа:

1. Удаление симплициальных вершин.
2. Удаление почти симплициальных вершин (т.е. тех, все смежные вершины которых кроме одной индуцируют полный граф) степени $d \leq \mathrm{low}$. После удаления все несмежные соседи удаленной вершины соединяются ребрами.
3. Если $\mathrm{low} \geq 3$, то удаляются пары вершин степени 3, имеющие одних и тех же соседей. Между несмежными соседями удаленных вершин проводятся ребра.

После произведенных удалений полученный граф триангулируется, и удаленные вершины восстанавливаются и связываются ребрами с теми вершинами, с которыми были связаны изначально.

На основе полученных преобразований многие практически используемые байесовские сети были идеально триангулированы (в смысле minwidth-метрики) только за счет предварительной обработки графа [23].

5. Устранение цикличности на основе устранения небратских полусиблинговых простых циклов. Основная проблема описанного выше подхода состоит в том, что изменяя структуру, мы заранее не знаем, как будут выглядеть получающиеся фрагменты знаний. В теории АБС предложен подход для устранения цикличности первичной структуры, который мы разовьем в этой статье, опирающийся на добавление новых фрагментов знаний в первичную структуру. Введем ряд формальных определений, следуя [11, 14, 16].

Сужением на сепаратор U называется граф, который состоит из вершин и ребер максимального графа смежности, нагрузки которых содержат U. Для краткости *вершинами сепаратора* будем называть вершины сужения на этот сепаратор.

Родительским графом над некоторым подмножеством сепараторов называется ориентированный граф, в котором ребро проведено от сепаратора c к сепаратору s в том и только том случае, если $c \subset s$ и не существует другого сепаратора c' из этого подмножества, что $c \subset c' \subset s$. Другими словами, родительский граф соответствует диаграмме Хассе для частичного порядка, заданного отношением включения. Если ребро проведено от c к s, то c называется *родителем* s, а s — *сыном* c.

Рассмотрим родительский граф над множеством сепараторов (в том числе над пустым сепаратором). У такого графа для каждого непустого сепаратора существует родитель.

Выберем произвольный сепаратор c и рассмотрим его сыновей. Два сына s и s' называются *братьями*, если их вершины пересекаются. *Полусиблинговыми графом* для сепаратора c называется граф, вершины которого соответствуют его сыновьям, а ребра проведены между братьями.

Цикл в полусиблинговом графе называется *полусиблинговым*. Если пересечение всех вершин, входящих в такой цикл, непусто, то цикл называется *братским*, а ином случае — *небратским*.

Теорема (1-я теорема о циклах в минимальных графах смежности) [14]. Для фиксированной первичной структуры АБС любой минимальный граф смежности является ациклическим тогда и только тогда, когда не существует полусиблинговых небратских простых циклов в полусиблинговых графах, построенных над нагрузками данной первичной структуры.

Устранение полусиблинговых небратских простых циклов лежит в основе подхода к устранению цикличности первичной структуры. На текущий момент предложено два метода устранения таких циклов [16]: первый состоит в добавлении к полусиблинговому небратскому простому циклу фрагмента знаний, построенного на подалфавитом, объединяющим нагрузки все фрагментов знаний, входящих в этот цикл и удалением тех фрагментов знаний, которые после этой операции перестали быть максимальными. Второй же подход состоит в добавлении фрагмента знаний, который построен над объединением нагрузок не только всех фрагментов знаний, входящих в цикл, но и нагрузок всех потомков этих клик. Последнее позволяет устранять полусиблинговые небратские простые циклы без перестроения множества сепараторов и соответствующих им полусиблинговых графов после добавления каждого нового фрагмента знаний.

Преимущество подобного подхода состоит в том, что он позволяет контролировать то, какие фрагменты знаний добавляются к сети и учитывать максимальный вес фрагмента знаний. Последнее, в свою очередь, позволяет не добавлять фрагменты знаний, вес которых больше заданного, в том случае, если ограничения на вес фиксированы.

6. Заключение. В работе были рассмотрены практически используемые эвристики для решения задачи триангуляции графов, которые могут быть применены к задаче приведения первичной структуры АБС к ациклическому виду. Приведенные эвристики используются для элиминации переменных в байесовских сетях доверия [36]. Кроме того, были рассмотрен подход к удалению циклов, предложенный в рамках теории АБС, основанный на устранении полусиблинговых небратских простых циклов. В дальнейшем необходимо провести сравнение результатов работы указанных алгоритмов на наборе тестовых примеров, что позволит выработать наиболее эффективные подходы в задаче преобразования структуры АБС к виду, допускающему эффективный вероятностный вывод. Такое сравнение следует производить по двум аспектам: скорости работы алгоритмов преобразования, а также характеристик результирующей первичной структуры. Помимо приведенных в работе функций maxWidth и expWidth, можно указать и другие характеристики, оценивающие эффективность работы алгоритмов глобального апостериорного логико-вероятностного вывода, в частности, минимальную длину диаметра минимального графа смежности, который можно построить над первичной структурой. Кроме того, в число значимых характеристик входит также скорость работы алгоритмов построения вторичной структуры. Наконец, еще одним аспектом, который мог бы использоваться для сравнения, является степень отличия результирующей первичной структуры от исходной. Указанное различие важно в первую очередь при обучении АБС на основе извлечения знаний из экспертов, поскольку именно они в этом случае будут задавать параметры для вновь появившихся связей.

Литература

1. *Кормен, Т.Х.* Алгоритмы: построение и анализ, второе издание : пер. с англ // Кормен, Т.Х. Лейзерсон, Чарльз И., Ривест, Рональд Л. Штайн, Клиффорд. 2-е изд. М.: Вильямс, 2005. 1296 с.
2. *Крейнович В.Я., Нгуен Х.Т., Городецкий В И., Нестеров В.М., Тулупьев А Л.* Применение интервальных степеней доверия: аналитический обзор // Информационные технологии и интеллектуальные методы. СПб.: СПИИРАН, 1999. Т. 3. С. 6–61.
3. *Сироткин А.В.* Вычислительная сложность алгоритмов локального апостериорного вывода в алгебраических байесовских сетях // Труды СПИИРАН. 2011. Вып. 18. С. 188–214.
4. *Тулупьев А.Л.* Алгебраические байесовские сети. Логико-вероятностный подход к моделированию баз знаний с неопределенностью, СПИИРАН, СПб, 2000, 292 с.
5. *Тулупьев А.Л.* Алгебраические байесовские сети: логико-вероятностные графические модели баз фрагментов знаний с неопределенностью: Диссертация на соискание ученой степени д-ра физ.-мат. наук. СПб., 2009. 670 с. (Санкт-Петербургский государственный университет).

6. *Тулупьев А.Л.* Байесовские сети: логико-вероятностный вывод в циклах. Элементы мягких вычислений. СПб.: СПбГУ; ООО Издательство "Анатолия", 2008. 140 с.
7. *Тулупьев А.Л., Николенко С.И., Сироткин А.В.* Байесовские сети: логико-вероятностный подход. СПб.: Наука, 2006. 607 с.
8. *Тулупьев А.Л., Фильченков А.А., Вальтман Н.А.* Алгебраические байесовские сети: задачи автоматического обучения // Информационно-измерительные и управляющие системы. 2011. № 11, т. 9. С. 57–61.
9. *Тулупьев А.Л., Фильченков А.А., Тулупьева Т.В., Сироткин А.В., Пащенко А.Е., Фроленков К.В., Алексеев А.М., Азаров А.А., Мусина В.Ф., Суворова А.В.* Отчет о научно-исследовательской работе «Глобальные структуры алгебраических байесовских сетей. Логико-вероятностный вывод» (промежуточный), инвентарный № 02201351577 от 2013.01.09, по теме «Развитие теории алгебраических байесовских сетей и родственных им логико-вероятностных графических моделей систем знаний с неопределенностью», регистрационный № 01201259408. СПб.: СПИИРАН, 2013. 210 с.
10. *Фильченков А.Ф.* Иерархия глобальных структур Алгебраической Байесовской Сети как система графов гиперграфов // Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. 2013. Вып. 1 (83). С.75–81.
11. *Фильченков А.А., Тулупьев А.Л.* Анализ циклов в минимальных графах смежности алгебраических байесовских сетей. // Тр. СПИИРАН, 17 (2011), 151–173.
12. *Фильченков А.А., Тулупьев А.Л., Сироткин А.В.* Мощность множества минимальных графов смежности // Труды СПИИРАН. 2010. Вып. 4 (15). С. 136–161.
13. *Фильченков А.А., Тулупьев А.Л., Сироткин А.В.* Особенности анализа вторичной структуры алгебраической байесовской сети // Труды СПИИРАН. 2010. Вып. 1 (12). С. 97–118.
14. *Фроленков К.В., Фильченков А.А., Тулупьев А.Л.* Сиблинговый критерий цикличности минимальных графов смежности // Труды СПИИРАН. 2013. Вып. 25, С. 190–203.
15. *Фильченков А.А., Тулупьев А.Л.* Структурный анализ систем минимальных графов смежности // Труды СПИИРАН. 2009. Вып. 11. С. 104–127.
16. *Фильченков А.А., Фроленков К.В., Тулупьев А.Л.* Устранение циклов во вторичной структуре алгебраической байесовской сети на основе анализа ее четвертичной структуры // Труды СПИИРАН. 2012. Вып. 21. С. 143–156
17. *Фроленков К. В., Фильченков А. А., Тулупьев А. Л.* Апостериорный вывод в третичной полиструктуре алгебраических байесовских сетей // Труды СПИИРАН, 2012 т. 23, С. 343—356.
18. *Arnborg S., Corneil D.G., Proskurowski A.* Complexity of finding embebdings in a K-tree. // SIAM J. Alg. and Discr. Meth. 1987. vol. 8. P. 277–284.
19. *Amir E.* Efficient approximation for triangulation of minimum treewidth // Proc. UAI ’01. MK. 2001. P. 7–15.
20. *Amir E., Krauthgamer R., Rao S.* Constant factor approximation of vertexcuts in planar graphs // In Proc. 35rd ACM Symp. on Theory of Computing. ACM Press. 2003. P. 90–99.
21. *Barricelli N. A.* Symbiogenetic evolution processes realized by artificial methods. Methodos. 1957. P 143–182.
22. *Berry, P. Heggernes, and G. Simonet*. The minimum degree heuristic and the minimal triangulation process // Proceedings WG 2003 - 29th Workshop on Graph Theoretic Concepts in Computer Science, Lecture Notes in Computer Science. Springer Verlag. 2003. vol. 2880. P. 58–70.

23. *Bodlaender H. L., A. Koster, van den Eijkhof F., van der Gaag L. C.* Preprocessing for Triangulation of Probabilistic Networks // UAI'01 Proceedings of the Seventeenth conference on Uncertainty in artificial intelligence. 2001. P. 32–39
24. *Bodlaender H. L.* Treewidth: Algorithmic techniques and results. In IgorPr´ıvara and Peter Ruzicka, editors. Mathematical Foundations of Computer Science 1997. Springer. vol. 1295. P. 19–36.
25. *Bouchitte V., Todinca I.* Treewidth and minimum fill-in: grouping the minimal separators // SIAM Journal on Computing. 2001. vol 31(1). P. 212–232.
26. *Cano A., Moral S.* Heuristic Algorithms for the Triangulation of Graphs // Proceedings of the Fifth IPMU Conference. Springer. 1995. P 166–171.
27. *Demaine E. D., Hajiaghayi M. T., Nishimura N., Ragde P., and Thilikos D. M.* Approximation algorithms for classes of graphs excluding singlecrossing graphs as minors // Journal of Computer and System Sciences. 2004. vol 69(2). P. 166–195.
28. *Fagin R., Halpern J.Y., Megiddo N.* A Logic for Reasoning about Probabilities. Report RJ 6190 (60900) 4/12/88. P. 1–41.
29. *Fagin R., Halpern J.Y.* Uncertainty, Belief, and Probability–2 // Proc. of the IEEE Symposium on Logic and Computer Science. 1991. Vol. 7. P. 160–173.
30. *Golumbic M.C.* Algorithmic Graph Theory and Perfect Graphs. NY: Academic Press. 1980. 286 p.
31. *Holland, J.* Adaptation in Natural and Artificial Systems. Cambridge. MA: MIT Press. 1992. 211 p.
32. *Halpern J.* Reasoning about Uncertainty. Cambridge. MA: MIT Press. 2003. 483 p.
33. *Kjaerulff U.* Triangulation of graphs-algorithms giving small total state space. Aalborg University. Tech. Rep. R-90-09, March 1990.
34. *Kjærulff U.* Optimal decomposition of probabilistic networks by simulated annealing. Statistics and Computing. 1992. vol. 2. P. 7–17.
35. *Kloks T.* Treewidth: computations and approximations // LNCS. Springer-Verlag. 1994. vol. 842. 218 p.
36. *Koller D., Friedman N.* Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques. MA:MIT Press. 2009. 1231 p.
37. *Larrañaga P., Kuijpers C., Poza M., Murga R.H.* Decomposing Bayesian Networks: Triangulation of Moral Graph with Genetic Algorithms // Statistics and Computing (UK). 1997. 7(1). P. 19–34,
38. *Łukaszewski T.* An evolutionary algorithm for Bayesian network triangulation // Operations Research Proceedings. 2002. P. 365-370.
39. *Luke S.* Essentials of Metaheuristics. A Set of Undergraduate Lecture Notes. Zeroth Edition. Online Version 1.2. July, 2011.
40. *Nilsson N.J.* Probabilistic Logic // Artificial Intelligence. 1986. Vol. 28. P. 71–87.
41. *Paul D.* Seymour and Robin Thomas. Call routing and the ratcatcher // Combinatorica. 1994. vol. 14(2). P. 217–241.
42. *Parter. S.* The use of linear graphs in Gauss elimination. // SIAM Review. 1961. vol. 3. P. 119–130
43. *Rose D. J., Tarjan R. E., Lueker G. S.* Algorithmic aspects of vertex elimination on graphs // SIAM J. Comput. 1976. vol. 5. P. 266–283.
44. *Wang H., Yu K., Wu X., Yao H.* Triangulation of Bayesian Networks Using an Adaptive Genetic Algorithm // ISMIS. volume 4203 of Lecture Notes in Computer Science, Springer. 2006. P. 127–136.

Вяткин Андрей Валерьевич — студент кафедры информатики математико-механического факультета С.-Петербургского государственного университета (СПбГУ). Область научных интересов: графы смежности. dewshick@gmail.com; СПбГУ, Университетский проспект, д. 28, Старый Петергоф, г. Санкт-Петербург, 198504, РФ; р.т. +7(812)328-3337, факс +7(812)328-4450. Научный руководитель — А.Л. Тулупьев.

Vyatkin Andrey Valeryevich — student of Computer Science Department, SPbSU. Research area: join graphs. dewshick@gmail.com; SPbSU, Universitetsky pr., 28, Peterhof, St. Petersburg, 198504, Russia; office phone +7(812)328-3337, fax +7(812)328-4450. Scientific advisor — A.L. Tulupyev.

Фильченков Андрей Александрович — аспирант кафедры информатики математико-механического факультета С.-Петербургского государственного университета (СПбГУ), младший научный сотрудник лаборатории теоретических и междисциплинарных проблем информатики СПИИРАН. Область научных интересов: автоматическое обучение вероятностных графических моделей. Число научных публикаций — 93. aaafil@mail.ru, СПИИРАН, 14-я линия В.О., д. 39, г. Санкт-Петербург, 199178, РФ; р.т. +7(812)328-3337, факс +7(812)328-4450. Научный руководитель — А.Л. Тулупьев.

Filchenkov Andrey Alexandrovich — PhD student of Computer Science Department, SPbGU, junior researcher, Theoretical and Interdisciplinary Computer Science Laboratory, SPIIRAS. Research area: machine learning of probabilistic graphical models. The number of publications — 93. aaafil@mail.ru, SPIIRAS, 14-th line V.O., 39, St. Petersburg, 199178, Russia; office phone +7(812)328-3337, fax +7(812)328-4450. Scientific advisor — A.L. Tulupyev.

Тулупьев Александр Львович — д.ф.-м.н., профессор; заведующий лабораторией теоретических и междисциплинарных проблем информатики СПИИРАН, доцент кафедры информатики математико-механического факультета С.-Петербургского государственного университета (СПбГУ). Область научных интересов: представление и обработка данных и знаний с неопределенностью, применение методов математики и информатики в социокультурных исследованиях, применение методов биостатистики и математического моделирования в эпидемиологии, технология разработки программных комплексов с СУБД. Число научных публикаций — 250. ALT@iias.spb.su, www.tulupyev.spb.ru; СПИИРАН, 14-я линия В.О., д. 39, г. Санкт-Петербург, 199178, РФ; р.т. +7(812)328-3337, факс +7(812)328-4450.

Tulupyev Alexander Lvovich — PhD in Computer Science, Dr. of Sc. Professor; Head of Theoretical and Interdisciplinary Computer Science Laboratory, SPIIRAS, Associate Professor of Computer Science Department, SPbSU. Research area: uncertain data and knowledge representation and processing, mathematics and computer science applications in socio-cultural studies, biostatistics, simulation, and mathematical modeling applications in epidemiology, data intensive software systems development technology. Number of publications — 250. ALT@iias.spb.su, www.tulupyev.spb.ru; SPIIRAS, 14-th line V.O., 39, St. Petersburg, 199178, Russia; office phone +7(812)328-3337, fax +7(812)328-4450.

Мусина Валерия Фуатовна — младший научный сотрудник лаборатории теоретических и междисциплинарных проблем информатики СПИИРАН, студент магистратуры экономического факультета СПбГУ. Область научных интересов: случайные процессы, вероятностное и статистическое моделирование, биостатистика, вероятностные графические модели. Число научных публикаций — 13. ALT@iias.spb.su, www.tulupyev.spb.ru; СПИИРАН, 14-я линия В.О., д. 39, г. Санкт-Петербург, 199178, РФ; р.т. +7(812)328-3337, факс +7(812)328-4450.

Musina Valeriya Fuatovna — junior research fellow Theoretical and Interdisciplinary Computer Science Laboratory, St. Petersburg Institute for Informatics and Automation of the Russian Academy of Sciences (SPIIRAS), graduate student of Faculty of Economics at Saint Petersburg State University. Research area: stochastic processes, probabilistic and statistic modelling, biostatistics, probabilistic graphical models. Number of publications — 13.ALT@iias.spb.su, www.tulupyev.spb.ru; SPIIRAS, 14-th line V.O., 39, St. Petersburg, 199178, Russia; office phone +7(812)328-3337, fax +7(812)328-4450.

Фроленков Константин Владиславович — аспирант кафедры информатики математико-механического факультета С.-Петербургского государственного университета (СПбГУ), младший научный сотрудник лаборатории теоретических и междисциплинарных проблем информатики СПИИРАН. Область научных интересов: машинное обучение, вероятностный вывод. Число научных публикаций — 8. frolenk@mail.ru. СПИИРАН, 14-я линия В.О., д. 39, г. Санкт-Петербург, 199178, РФ; р.т. +7(812)328-3337, факс +7(812)328-4450. Научный руководитель — А.Л. Тулупьев.

Frolenkov Konstantin Vladislavovich — PhD student of Computer Science Department, SPbGU, junior researcher, Theoretical and Interdisciplinary Computer Science Laboratory, SPIIRAS. Research area: machine learning, probabilistic inference. The number of publications — 8. frolenk@mail.ru. SPIIRAS, 14-th line V.O., 39, St. Petersburg, 199178, Russia; office phone +7(812)328-3337, fax +7(812)328-4450. Scientific advisor — A.L. Tulupyev.

Поддержка исследований. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 12-01-00945-а, 12-01-31202-мол_а.

Рекомендовано ТиМПИ СПИИРАН, зав. лаб. А.Л. Тулупьев, д.ф.-м.н., доц.
Работа поступила в редакцию 01.03.2013.

РЕФЕРАТ

Вяткин А.В., Фильченков А.А., Тулупьев А.Л., Мусина В.Ф., Фроленков К.В. **Подходы к устранению цикличности первичной структуры алгебраической байесовской сети**.

Алгебраическая байесовская сеть (АБС) — вероятностная графическая модель, в основе которой лежит логико-вероятностный подход, введенный в искусственный интеллект Нильссоном, в формализации Хальперна, Фейгина и Меджиддо. Одним из основных преимуществ использования логико-вероятностного подхода к описанию неопределенности является возможность работать помимо скалярных, также и с интервальными оценками вероятностей, которые являются неотъемлемой частью экспертной информации.

Одним из условий эффективности алгоритмов логико-вероятностного вывода в алгебраической байесовской сети (АБС) является условие ацикличности представляющего её графа. Введение гиперграфового представления структур АБС позволило применять методы преобразования данного графа к ациклическому виду, основывающиеся на методах теории древовидной декомпозиции. Рассмотрена общая схема метода приведения сети к ациклическому виду, использующего элиминирующие последовательности.

Указана связь задачи преобразования АБС к ациклическому виду с задачей нахождения триангуляции минимальной ширины заданного графа.

Приведены основные классы эвристических алгоритмов поиска элиминирующих последовательностей, применимых в контексте преобразования АБС, такие как генетические алгоритмы, алгоритмы имитации отжига.

Описан подход к устранению цикличности первичной структуры на основе устранения полусиблинговых небратских простых циклов за счет добавления фрагментов знаний к первичной структуре. Последнее позволяет контролировать вес добавляемого фрагмента знаний.

Введены две функции, позволяющие оценить качество сети, полученной в результате применения описываемого метода, дано обоснование их использования на этапе поиска элиминирующих последовательностей.

SUMMARY

Vyatkin A.V., Filchenkov A.A., Tulupyev A.L., Musina V.F., Frolenkov K.V.
Approaches for algebraic Bayesian networks primary structure cyclicity elimination.

Algebraic Bayesian network (ABN) is a probabilistic graphical model, which is based on logic and probabilistic approach introduced in the field of artificial intelligence by Nilsson and formalized by Halpern, Fagin and Megiddo. One of the major advantages of using logic and probabilistic approach for uncertainty representation is ability to use not only scalar, but also the interval estimates of probabilities that are an integral part of an expert information.

One of the conditions for the effectiveness of the algorithms of logical and probabilistic inference in algebraic Bayesian network (ABN) is an acyclicity of its graphical representation. Introduction of hypergraphic representation of ABN structures allowed to transform such a graph into acyclic one basing on the methods of the theory of tree decomposition. The general scheme of the method for transforming the network into acyclic one with the help of elimination sequences is considered. The main classes of heuristic elimination sequence search algorithms which are appropriate in the context of the transformation of the ABN are presented.

The relation between the problem of transforming ABN into acyclic network and triangulation of minimum treewidth problem is shown.

The main classes of heuristic search algorithms using elimination sequences which are appropriate in the context of the ABN transformation, such as genetic algorithms, simulated annealing algorithm are presented.

The approach to transform ABN into acyclic network based on eliminating half-sibling non-brotherly prime cycles. With this approach only new knowledge patter should be added, so the knowledge pattern weight can be controlled.

Two functions for evaluation the quality of the network, resulting from the described method are defined, a justification for their use in the phase of elimination sequences search is provided.