

ベイジアンネットワークの 統計的推論の数理

工学博士 田中 和之 著

コロナ社

ま え が き

J. Pearl が確率伝搬法を提案してから、今年でちょうど20年になる。その後の誤り訂正符号などでの成功を契機に、確率伝搬法とベイジアンネットワークは20年間でさまざまに発展し、確率的情報処理という新しい研究分野を創出するにいたる。特に、2000年12月にバンクーバーで開催された国際会議 Neural Information Processing Systems 2000 (NIPS2000) では、Yedidia, Weiss and Freeman によって統計力学の近似手法の一つのクラスター変分法(菊池近似)を使うことで、確率伝搬法がさらに一般化された形に拡張できることが指摘された。これにより統計力学、情報科学、統計科学の学術的融合が大きく進み、数学的に大きく深化したことを実感した研究者は少なくないと思う。そして多くの研究者が、符号理論、画像処理、人工知能、計算理論、スピングラス理論、臨界現象などのさまざまな立場から切り込み、確率的情報処理における近似アルゴリズムというキーワードからたくさんの新しい展開が生み出されている。

その過程で日本の30~40歳代の若手研究者を中心とした文部科学省科学研究費補助金特定領域研究「確率的情報処理への統計学的アプローチ」(研究期間：2002~2005年度、領域代表：田中和之)、同特定領域研究「情報統計力学の深化と展開」(研究期間：2006~2009年度、領域代表：榊島祥介)という二つのプロジェクトが連続して進行し、世界に向けてこの分野における日本のトップレベルの研究成果を大きく印象づけることにも成功した。

本書では、ベイジアンネットワークと確率伝搬法についてのアルゴリズム設計とプログラム作成に必要な基礎事項を段階的にまとめた。特に、確率伝搬法については、具体的な例題に対して紙面の許す限り途中の式を省略しないで記述した。また、途中で読者に理解を深めてもらうためにいくつかの問題を入れた。残念ながら、後半部分では紙面の関係で略解を省略せざるを得なかったが、

多くの問題はその後書かれた例題と類似の議論で解答できるものばかりなので、余力があれば取り組んでいただきたい。

著者は大学院生から助手にかけての時代に、クラスター変分法で世界的に有名であった守田徹氏(現在は東北大学名誉教授)から研究指導を受け、一緒に研究させていただく機会に恵まれた。そのなかで統計力学とクラスター変分法についてたくさんのお話を教えていただいた。その教えていただいたことが本書のあらゆる部分で基礎となっている。また、本書の執筆にあたり、東京工業大学の樺島祥介氏、京都大学の田中利幸氏、東北大学の安田宗樹氏にはさまざまな相談にのっていただいた。東北大学で著者の研究室に学生として在籍した成田和弥君には多くの修正点の指摘をいただいた。また、コロナ社の方々には最後まで著者を見はなさずに本書の執筆に根気強くおつきあいいただいた。

最後に、本書の執筆を陰でささえてくれた妻と娘にこの場をかりて感謝の気持ちを送りたい。

2009年9月

田中 和之

<http://www.smapip.is.tohoku.ac.jp/~kazu/>

目 次

1. 確率的情報処理における ベイジアンネットワークと確率伝搬法

1.1 確率推論としてのベイジアンネットワーク	1
1.2 確率伝搬法	2
1.3 確率伝搬法から情報統計力学への深化と展開	3
1.4 本書の構成	4

2. 集合と確率の基礎

2.1 集 合	6
2.2 試行・標本点・事象	9
2.3 確 率	14

3. ベイジアンネットワーク

3.1 一般的な結合確率と確率的因果関係	28
3.2 簡単なベイジアンネットワークの例	34
3.3 少し複雑なベイジアンネットワークの例	44
3.4 もう少し複雑な構造をもつベイジアンネットワークの例	49

4. グラフィカルモデル

4.1	グ ラ フ	56
4.2	ベイジアンネットワークからグラフィカルモデルへ	64

5. 確 率 分 布

5.1	確率変数と確率分布	68
5.2	結合確率分布	71
5.3	簡単な結合確率分布のさまざまな計算例	73
5.4	確率分布の表現	84
5.5	確率分布とエネルギー関数	92

6. 扱いやすい確率分布の計算

6.1	独立な確率変数による結合確率分布	95
6.2	一次元鎖グラフの結合確率分布	101
6.3	カクタス木構造のハイパグラフの結合確率分布	115
6.4	カクタス木構造のハイパグラフの確率伝搬法の一般公式	128

7. 確 率 伝 搬 法

7.1	閉路を含むグラフと確率伝搬法	139
7.2	カクタスネットワークの確率伝搬法の一般公式	140
7.3	因子グラフによる確率伝搬法の表現	162

8. 確率伝搬法の情報論的解釈

8.1	確率分布間の近さとしてのカルバック・ライブラー情報量	171
8.2	離散確率分布の変分原理	172
8.3	カルバック・ライブラー情報量の最小化と変分原理	176
8.4	カルバック・ライブラー情報量最小化からの確率伝搬法の一般公式 の導出	191
8.5	確率伝搬法の閉路による影響	196

9. 確率伝搬法から情報統計力学への深化

9.1	グラフィカルモデルとイジングモデル	202
9.2	自由エネルギーとカルバック・ライブラー情報量	205
9.3	平均場法	208
9.4	完全グラフ上のイジングモデル	212
9.5	確率伝搬法の情報統計力学的解釈	218

10. 確率伝搬法から確率的情報処理へ

10.1	隠れマルコフモデル	223
10.2	誤り訂正符号	231
10.3	組合せ最適化問題	247

引用・参考文献	252
---------	-----

索引	255
----	-----

確率的情報処理における ベイジアンネットワークと確率伝搬法

1.1 確率推論としてのベイジアンネットワーク

近年、インターネットとコンピュータの処理能力の急速な発達により、これらの応用のために組み立てられる予測・推論システムは大規模化し、収集できるデータの量も膨大になりつつある。データが膨大になるということは、これまで気にならなかったことも気になり出し、これまで見えなかった要因も見出すために、データをどの切り口で見るかが重要なポイントとなってくる。考えられる要因をすべて盛り込んでシステムを網羅的に作ることが、必ずしも性能の改善に結びつくとも限らない。しかも、データはランダムネスをどうしても伴うため、得られたデータのとおりシステムを作り込んだからといってあらゆる場合に対応できるとは限らず、むしろ柔軟性の失われたシステムになってしまうことすらある。

ベイジアンネットワーク (Bayesian network) は人工知能における**確率推論** (probabilistic inference) の一つのツールである^{1)~13)}。その応用範囲はシステムの故障診断、危険の予知から医療診断などにいたるまで多岐にわたる。確率推論は多くの命題の生起する可能性を確率として記述することから始められる。命題の種類が増えることで命題間の因果関係が生じるが、これは条件付き確率として定式化される。この定式化は条件付き確率と結合確率を一つずつつなぎ合わせることで段階的に構成される。

推論に確率を用いることで、データの不確定性は系統的に取り扱うことがで

きるようになるが、そこには代償がある。確率は、よく起こることもめったには起こらないことも計算においては同じように扱う必要がある。このことが計算量の増加をまねくのである。しかし、このめったに起こらないたぐさんのことが関連し合うことで、全体として高い可能性をもって起こり始めることがある。これは確率を使わない人工知能による推論では、取扱いの難しかった部分である。ベイジアンネットワークは、そのようなたぐさんのことが関連し合って起こることを取り扱うことを得意とする確率モデル (probabilistic model) なのである。

1.2 確率伝搬法

不確定性を伴うデータを扱う確率モデルとしてのベイジアンネットワークを、効率よくアルゴリズム化し、計算モデルとして作り込むために提案された処方箋の一つに確率伝搬法 (belief propagation)[†]がある。この確率伝搬法は、システムサイズとともに指数関数的に計算量が増加していく大規模確率モデルの統計量の計算を、ある反復計算アルゴリズムに帰着させるための手法である。すべての確率モデルに対して万能の方法ではなく、ベイジアンネットワークの構造によっては、計算された統計量が厳密な値からずれている場合もある。しかし、このアルゴリズムを近似アルゴリズムとして用いることで、ベイジアンネットワークの応用範囲を飛躍的に拡大することができる。近年の多くのベイジアンネットワークの研究の展開は、この点に着目したことから急速に進んでいる。

確率伝搬法は、確率推論に限らずいくつかの情報処理の問題に応用されている。その一つに誤り訂正符号 (error correcting codes) がある。誤り訂正符号は情報通信理論の重要な要素技術の一つである。この誤り訂正符号を統計科学を用いて定式化することで確率モデルとして構成される。その際、各ビットに

[†] 信念伝搬法または和積 (sum-product) アルゴリズムとして参照されることもある。

対して確率変数が割り当てられるため、巨大なサイズをもつ確率モデルとなる。この確率モデルを使った復号アルゴリズムの構成部分に確率伝搬法が用いられることがある。情報通信技術の中でターボ符号 (turbo codes), 低密度パリティ検査符号 (low density parity check codes ; **LDPC Codes**) と呼ばれるものがそれにあたる^{14)~16)}。これらは次世代における携帯電話などのさまざまな通信技術の中で実装が進められている。

さらには、画像処理において確率モデルを使ったアルゴリズムが、マルコフ確率場 (Markov random fields) という形で提案されている^{17), 18)}。この確率モデルにおいては、各画素に確率変数が割り当てられるためにやはり巨大なサイズをもつことになるため、確率伝搬法が近似アルゴリズムを構成するうえで有力なツールとして用いられる。また計算理論の分野で大きなトピックスの一つである充足可能性 (satisfiability ; **SAT**) 問題への応用も積極的に進められている^{19), 20)}。

1.3 確率伝搬法から情報統計力学への深化と展開

従来、物理学の扱う研究対象はおもに自然現象であり、物質であった。物質は膨大な数の原子が集まって形成されている。自然現象もまたしかりである。このような巨大なシステムの性質を解明するために考案される物理モデル (physical model) は、そもそもが大規模システムである。19世紀末にボルツマン (Boltzmann) という物理学者が、それまでは熱力学の概念であったエントロピー (entropy) を原子・分子レベルのミクロな立場で定式化する方法論を構築することに成功し、物理モデルに確率という概念を導入する。その後、確率分布として定式化された物理モデルの平均、分散、共分散に対応する物理量を計算し、物質の性質を説明する試みが始まっていく。これが統計力学 (statistical mechanics) と呼ばれる学問体系である。

統計力学で扱われる物理モデルの物理量の計算は、膨大な数の原子一つひとつに確率変数が割り当てられていることになるので、最初から厳密に計算する

ことはあきらめざるを得ないという事情があった。そして、この大きな障害を克服するために多くの近似計算技法が提案される^{21)~24)}。じつは、20世紀末に確率推論の方法として提案された確率伝搬法は、この統計力学のある一つの近似アルゴリズムと構造がまったく同じなのである^{25), 26)}†。確率伝搬法とベイジアンネットワークを接点として、統計科学、統計力学という伝統的数理科学と情報処理という最先端の科学技術の融合した新しい学問体系が生み出されつつある。この学術的融合の流れの一つが情報統計力学 (statistical mechanical informatics) である^{27)~30)}。

情報統計力学は、統計力学の分野でスピングラス、古典スピン系と呼ばれる平衡統計力学の研究テーマの中で長年培われてきた、平均場理論 (mean field theory) をはじめとする計算技法の転用から創出された研究分野である。これらの計算技法の転用には、情報処理の諸問題の平衡統計力学の物理モデルによる再定式化が必要となる。情報通信技術 (information and communication technology) において、この取組みが特に成功している例が確率推論、誤り訂正符号、画像処理などであり、計算理論との関係から学術的に研究が進んでいるのが組合せ最適化問題である。そして、そのそれぞれの研究テーマにおいて、確率伝搬法は平均場理論との類似性からさまざまに中心的役割を果たしている。

1.4 本書の構成

本書は、全10章から構成され、2~5章が前半部分であり、確率とベイジアンネットワークについての基本的な事項を説明する。6章以降が後半であり、確率伝搬法に関する手順を段階を踏みながら説明する。

2章では、確率に関する基本的な項目を要約する。3章では、いくつかの確率推論の簡単な具体例を示しながらベイジアンネットワークについて説明する。

† 確率伝搬法と平均場理論が同じ構造をもつことは、樺島祥介氏らにより世界で初めて指摘されたものである (Europhysics Letters, 44, p.66 (1998))。これにより多くの平均場理論の情報科学への応用が急速に進んでいる。

4章では、グラフの基礎知識と確率モデルのグラフ表現について概説する。特に、ハイバエッジ、ハイバグラフ、木構造などの概念について説明する。5章では、確率変数と確率分布の基本的な項目と統計量の計算について説明する。6章では、互いに独立な確率変数からなる結合確率分布や木構造のグラフ表現をもつ結合確率分布などの平均、分散をはじめとする統計量の計算について説明し、確率伝搬法による厳密な計算の手順について紹介する。7章では、近似アルゴリズムとしての確率伝搬法の一般公式を説明する。8章では、確率伝搬法の情報論的解釈、特にカルバック・ライブラー情報量による理解について紹介する。9章は、情報統計力学との関連について、10章では、確率的情報処理へのいくつかの応用についてそれぞれ概観する。

索引

【あ】			
誤り訂正符号	2, 223		
【い】			
イジングモデル	204		
因果独立	30		
因子グラフ	162		
【え】			
エッジ	56		
エネルギー	94		
エネルギー関数	92		
エントロピー	3, 206		
【か】			
外場	204		
確率	14		
確率推論	1		
確率的因果関係	29		
確率伝搬法	2, 95		
確率表	16		
確率分布	69		
確率分布表	69		
確率ベクトル変数	71		
確率変数	68		
確率モデル	2		
隠れマルコフモデル	223		
可約条件	126		
カルバック・ライブラー			
情報量	171		
完全グラフ	58		
完全無向グラフ	58		
完全有向グラフ	58		
【き】			
木	58		
規格化条件	69		
木構造をもつグラフ	58		
期待値	70		
ギブス分布	203		
ギャラガー符号	247		
キュムラント展開	202		
共通部分	6		
共役な場	205		
【く】			
空グラフ	63		
空事象	10		
空集合	7		
組合せ最適化問題	223		
クラスター変分法	211		
グラフ	56		
グラフィカルモデル	56		
クロネッカーのデルタ	142		
【け】			
結合確率	17, 28		
結合確率表	20		
結合確率分布	71		
結合確率分布表	71		
検査行列	232		
検査方程式	231		
【こ】			
公理的確率	15		
【さ】			
最大事後周辺確率	236		
差集合	7, 11		
算術的確率	14		
3-SAT	248		
【し】			
シグモイド関数	70		
試行	9		
試行自由エネルギー	206		
事後確率	21		
事象	9		
次数	62		
事前確率	21		
自由エネルギー	203, 206		
集合	6		
充足可能性	3		
充足可能性問題	247		
周辺化	19		
周辺確率	19		

【め】		余事象	11	【わ】	
メッセージ	103, 145	【り】		和事象	11
【ゆ】		離散確率変数	68	和集合	6
有向グラフ	57	隣接ノード対	56	和積	2
有効場	221	【れ】			
有向辺	57	連続確率変数	68		
【よ】		【ろ】			
要素	6	路	58		

【B】		【L】		【S】	
BSC	232	LDPC Codes	3, 162, 168, 247	SAT	3
【C】		【M】		SAT problem	247
CDMA	162	MPM	236		
CPT	20				

— 著 者 略 歴 —

- 1984年 東北大学工学部電子工学科卒業
1989年 東北大学大学院工学研究科博士課程修了(電子工学専攻)
工学博士
1989年 東北大学助手
1994年 室蘭工業大学助教授
1999年 東北大学大学院助教授
2007年 東北大学大学院教授
現在に至る

この間、1997～1998年、英国グラスゴー大学統計学科客員研究員(文部省在外研究員)、2002～2005年度、文部科学省科学研究費補助金 特定領域研究「確率的情報処理への統計力学的アプローチ」(領域番号 765) 領域代表

ベイジアンネットワークの統計的推論の数理

Mathematics in Statistical Inference of Bayesian Networks

© Kazuyuki Tanaka 2009

2009年10月28日 初版第1刷発行

★

2015年6月15日 初版第3刷発行

検印省略

著 者 た な か か ず ゆ き
田 中 和 之
発 行 者 株 式 会 社 コ ロ ナ 社
代 表 者 牛 来 真 也
印 刷 所 三 美 印 刷 株 式 会 社

112-0011 東京都文京区千石 4-46-10

発行所 株式会社 コロナ社

CORONA PUBLISHING CO., LTD.

Tokyo, Japan

振替 00140-8-14844・電話(03)3941-3131(代)

ホームページ <http://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-02441-8 (安達) (製本:愛千製本所)

Printed in Japan



本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられております。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めておりません。

落丁・乱丁本はお取替えいたします