УДК 519.5:681.3.00

А.С. БАЛАБАНОВ

ЛОГИКА МИНИМАЛЬНОЙ СЕПАРАЦИИ В КАУЗАЛЬНЫХ СЕТЯХ

Ключевые слова: *марковские свойства, циклический и ациклический орграфы, m-сепарация, неизбыточный сепаратор, коллайдер, идентификация ребер модели.*

В настоящей работе анализируются парные марковские свойства систем зависимостей, структурированных ориентированными графами. Результаты характеризуют модели с ориентированно-ациклической структурой [1–5], а также более общие классы моделей, в том числе на основе смешанных графов, и структуры с ориентированными циклами [1, 2, 5, 6]. Марковские свойства сетей зависимостей определяются соответствующими графовыми критериями сепарации. Как показано далее, существует важное подмножество марковских свойств (широкого класса моделей), на котором выполняются более сильные импликативные правила и ограничения по сравнению с известными. Это подмножество марковских свойств определяется понятием локально-минимального (неизбыточного) сепаратора [7, 8]. Важная роль выделенных свойств объясняется, в частности, тем фактом, что какой-либо сепаратор для заданной пары вершин модели существует, если и только если существует некоторый неизбыточный (локально-минимальный) сепаратор для этой пары. Выполняя синтез или вывод структуры модели из данных, можно обойтись проверкой минимальных (неизбыточных) сепараторов. Применение импликативных правил подбора и формирования неизбыточных сепараторов позволяет значительно повысить эффективность алгоритмов вывода структуры модели [9–11].

СЕТИ ЗАВИСИМОСТЕЙ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Вероятностные модели зависимостей на основе графов — актуальное направление исследований на стыке многомерного статистического анализа, аппарата графов, теории вероятностей, каузального моделирования и др. Наиболее популярны модели на основе ациклических ориентированных графов (АОГ), к которым относятся байесовы, гауссовы и гибридные сети. АОГ-модели привлекают компактностью, способностью отображать причинно-следственные связи и развитой техникой вероятностных рассуждений [1–3]. Модели этого класса применяются для решения ряда задач (каузальный анализ, диагностика, прогнозирование, классификация и т.п.) из самых разных областей. Ввиду взаимно однозначного соответствия термины «вершина» (графа) и «переменная» (модели) употребляются как взаимозаменяемые (по контексту). АОГ-модель (в узком смысле) определяется как (G, θ); здесь G — АОГ, а θ — совокупность локально заданных параметров, т.е. условных распределений переменных $p(X \mid \mathrm{F}(X))$, где $\mathrm{F}(X)$ — множество родителей (причин) переменной X. АОГ-модель определяет совместное распределение вероятностей переменных.

Выразительность и эффективность ориентированных сетей зависимостей обусловлены их марковскими свойствами, которые можно обосновать каузальным марковским условием и аксиомами условной независимости [1, 2, 12]. Марковские свойства модели — множество таких фактов условной независимости переменных, которые инвариантны к параметризации модели и определяются исключительно графовым критерием на структуре G модели. Для АОГ-моделей таким критерием является d-сепарация [1]. Факт d-сепарации влечет соответствующую условную независимость [12].

Напомним элементарные понятия, необходимые для описания структуры модели. В сетях зависимостей могут использоваться ребра трех типов: ориентированные (одноориентированные) $X \to Y$ (или дуги); неориентированные; биориентированные (двусторонне ориентированные) $X \leftrightarrow Y$. Вершины называются смежными, если они соединены ребром любой ориентации. В случае дуги $X \to Y$ вершина X называется родителем (причиной) вершины Y, а вершина Y — ребенком (эффектом) вершины X. Биориентированное ребро $X \leftrightarrow Y$ отображает эффект скрытого общего родителя вершин X и Y. Путь в орграфе — последовательность ребер (без повторения промежуточных вершин), где вторая вершина каждого очередного ребра является первой вершиной следующего ребра. (Очевидно, что если между X и Y существует «путь» с повторением промежуточной вершины, то можно получить другой путь между X и Y, удовлетворяющий указанному выше определению.) Если первая и последняя вершины пути совпадают, этот путь называют циклом. Орпуть (т.е. строго ориентированный путь) — это путь, на котором все ребра ориентированы в направлении одного и того же конца пути $X \to \cdots \to Y$. Тогда вершины X и Y называются соответственно предком и потомком друг друга. Орпуть вида $X \to \cdots \to X$ называется орциклом (циклоном). Ациклический ориентированный граф — это орграф, в котором нет циклонов.

Коллайдером (коллизором) в графе называется фрагмент вида $X \to Y \leftarrow Z$, $X \leftrightarrow Y \leftarrow Z$, $X \to Y \leftrightarrow Z$ или $X \leftrightarrow Y \leftrightarrow Z$. Все варианты коллайдера обозначают $* \to Y \leftarrow *$. Вершину Y, входящую в состав коллайдера $* \to Y \leftarrow *$, назовем **кол-вершиной** на том пути, на котором лежит данный коллайдер. Бесколлайдерный (бесколлизорный) путь, или цепь, — это путь, не содержащий ни одного коллайдера.

АОГ в узком смысле, т.е. оАОГ (одноориентированный), строится исключительно из одноориентированных ребер. Обобщением и расширением оАОГ-моделей являются модели со структурами в классе анцестральных графов, которые строятся из ребер трех указанных типов [4, 5]. Однако в анцестральных графах запрещены (не допускаются) определенные виды циклов (помимо циклонов) [4]. В частности, между вершинами, которые связаны орпутем, по определению запрещено биориентированное ребро. Модели на анцестральных графах позволяют адекватно отобразить эффекты скрытых (латентных) переменных и селекции данных.

Для дальнейшего изложения целесообразно сосредоточиться на подмножестве моделей, которые не содержат неориентированных ребер (свойства неориентированных структур — значительно проще). Поэтому далее обозначение вида $X—Y$ следует понимать как ребро некоторой ориентации, кроме тех, которые исключаются по контексту. Нерекурсивными каузальными сетями (НРКС) назовем подкласс анцестральных моделей, в котором не используются неориентированные ребра. (Заметим, что оАОГ называют рекурсивными каузальными сетями.) Дальнейшим расширением являются модели на смешанных графах (с ориентированными и биориентированными ребрами), в которых запрещены только циклоны. Такие графы назовем МАОГ (сМешанные АОГ). Основные результаты статьи сохраняют силу также для моделей с циклонами. Циклический орграф (ЦОГ) — это граф из одноориентированных ребер (циклоны допускаются, но петли $X \to X$ обычно не используются).

Для анцестральных графов определен критерий m-сепарации, который является естественным расширением критерия d-сепарации и выполняет аналогичную роль [2, 4]. В формулировке критерия m-сепарации термин «кондиционирование» можно понимать как введение вершины в условие. Известно, что критерий d-сепарации применим также в орграфах с циклонами [6, 13].

Определение 1 (m-сепарация). Путь π в орграфе называют m-перекрытым (m-блокированным) с использованием (кондиционирования) множества вершин **S**, если и только если на пути π имеется дуга $Z \to$ (или $\leftarrow Z$), где $Z \in \mathbf{S}$, или на пути π лежит хотя бы один коллайдер $* \to Y \leftarrow *$, причем $Y \notin \mathbf{S}$ и не существует никакой вершины $Q \in \mathbf{S}$, такой, что имеется орпуть $Y \to \cdots \to Q$.

Если путь между вершинами X и Y не является m-перекрытым, значит, он m-открыт (активен). Если при кондиционировании множества вершин **S** существует хотя бы один m-открытый путь между вершинами X и Y, то эти вершины являются m-соединенными (m-зависимыми), иначе они m-сепарированы (m-независимы).

Для фактов m-сепарации сохраним обозначение, принятое в [7, 8] для d-сепарации: запись $\mathrm{Ds}(X;\mathbf{S};Y)$ (где $X, Y \notin \mathbf{S}$) означает, что множество **S** m-сепарирует вершины X и Y. В этом случае множество **S** называется m-сепаратором (или просто сепаратором) для пары (X, Y). Когда множество **S** пусто, m-сепарация записывается как $\mathrm{Ds}(X;;Y)$. Если множество **S** не является m-сепаратором для пары (X, Y), то это выражается в виде $\sim \mathrm{Ds}(X;\mathbf{S};Y)$.

ЗАДАЧА ВЫВОДА СТРУКТУРЫ. ЛОКАЛЬНО-МИНИМАЛЬНЫЙ И НЕИЗБЫТОЧНЫЙ СЕПАРАТОРЫ

Для решения познавательных, исследовательских и прогнозно-аналитических задач требуется выводить структуру модели зависимостей из статистической выборки данных наблюдений за моделируемой системой. В рамках так называемого constraint-based (сепарационного) подхода [2, 3, 5–10] задача вывода модели сводится к задаче поиска и подбора сепараторов (или установления фактов их отсутствия). Основной этап вывода структуры модели — построение ее скелета — состоит в идентификации всех ребер (без ориентации). Синтез модели — это вывод структуры, исходя из фактов m-сепарации.

Для всех классов моделей тривиально имеем

$$(\exists\, \mathbf{Z}(X, Y \notin \mathbf{Z})\colon \mathrm{Ds}(X;\mathbf{Z};Y)) \Rightarrow \text{ отсутствует } (X—Y).$$

Для оАОГ верна также обратная импликация [2, 3, 7]

$$(\forall\, \mathbf{Z}(X, Y \notin \mathbf{Z})\colon \sim \mathrm{Ds}(X;\mathbf{Z};Y)) \Rightarrow (X—Y). \tag{1}$$

Иными словами, в оАОГ существование ребра эквивалентно отсутствию сепаратора. Однако импликация (1) неверна в более общих случаях, в частности в анцестральных графах и графах с циклонами.

Условную независимость переменной X от переменной Y при кондиционировании множества переменных $\mathbf{Z}$ $(X, Y \notin \mathbf{Z})$ обозначим $\Pr(X;\mathbf{Z};Y)$. Эта условная независимость означает, что $\forall\, x, y, \mathbf{z}\colon p(xy\,|\,\mathbf{z}) = p(x\,|\,\mathbf{z}) \cdot p(y\,|\,\mathbf{z})$. При этом множество переменных $\mathbf{Z}$ будем называть статистическим сепаратором для пары (X, Y).

Переход от языка графов к распределениям вероятностей (через критерий m-сепарации) обеспечивается ориентированным марковским свойством модели. В любом распределении вероятностей, генерированном из графа G модели зависимости, выполняется импликация

$$\forall\, X, Y, \mathbf{Z}\ (X, Y \notin \mathbf{Z})\colon [\mathrm{Ds}(X;\mathbf{Z};Y) \Rightarrow \Pr(X;\mathbf{Z};Y)]. \tag{2}$$

Обратная импликация выполняется не всегда (только асимптотически, за исключением особых случаев). Импликация, обратная к (2), рассматривается как предположение каузальной необманчивости (faithfulness) распределения вероятностей переменных относительно структуры модели [2, 3, 8, 9].

Когда структура модели выводится из статистических данных, отыскивают статистические сепараторы. Для сложных структур это трудная переборная задача, особенно когда неизвестна не только структура модели, но и темпоральный порядок переменных. Наличие или отсутствие ребер верифицируется тестированием статистических фактов условной независимости переменных в выборке данных. Возрастание кардинальности условия $\mathbf{Z}$ ведет к усложнению вывода и снижению надежности тестов. Поиск статистических сепараторов наиболее трудоемкий в случаях, когда зависимости нелинейные, когда переменные дискретные или разнотипные. Поэтому предпочтительно находить минимальные сепараторы и как можно раньше выявлять факты отсутствия предполагаемых сепараторов.

Определение 2 [7, 14, 15]. **Локально-минимальным** m-сепаратором (ЛоМС) для пары вершин (X, Y) называется такой сепаратор $\mathbf{Z}$, что если исключить из $\mathbf{Z}$ любой его член, то полученное множество вершин не будет сепаратором для (X, Y). Формально это записывается так: $\mathrm{Ds}(X; \mathbf{Z}; Y)$; $\forall W \in \mathbf{Z}: \sim \mathrm{Ds}(X; \mathbf{Z} \setminus \{W\}; Y)$.

Минимальным сепаратором для пары вершин (X, Y) естественно назвать такой сепаратор $\mathbf{Z}^*$, что для (X, Y) не существует сепаратора меньшей кардинальности. Иными словами, если $\mathbf{Z}^*$ — минимальный сепаратор для пары (X, Y), то для всех других сепараторов $\mathbf{Z}$ для (X, Y) верно $|\mathbf{Z}| \geq |\mathbf{Z}^*|$. Если структура графа модели известна, задача поиска минимальных сепараторов решается методами, известными из теории графов.

Поскольку в класс анализируемых моделей включены сети с циклонами, необходимо ввести новое понятие.

Определение 3. Неизбыточным m-сепаратором (НИС) для пары вершин (X, Y) называется такой сепаратор $\mathbf{Z}$, что никакое его подмножество не является сепаратором для пары вершин (X, Y). Формально: $\mathrm{Ds}(X; \mathbf{Z}; Y)$ и для всех $\mathbf{Z}' \subset \mathbf{Z}$ имеем $\sim \mathrm{Ds}(X; \mathbf{Z}'; Y)$.

Обозначим сепараторы для пары (X, Y): локально-минимальный — $\mathrm{S}_{\mathrm{lom}}(X, Y)$; неизбыточный — $\mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X, Y)$; минимальный — $\mathrm{S}_{\min}(X, Y)$. Каждый член любого ЛоМС $\mathbf{Z}$ не является кол-вершиной на том пути (тех путях), который он блокирует, причем этот путь (как минимум, один из тех путей) не блокируется никаким другим членом сепаратора $\mathbf{Z}$.

В рамках аппарата ориентированных графов понятие неизбыточного d-сепаратора (названного «минимальным») определено в [16], где изучены также некоторые его свойства. В [5] это понятие используется для обоснования процедур вывода скелета модели. В этих работах установлено свойство, отраженное во втором пункте сформулированной в следующем разделе базовой теоремы. Позже, независимо от указанных работ, автор настоящей статьи дал определение локально-минимальных сепараторов и показал их роль в выводе модели [15]. Использование ЛоМС позволило разработать эффективные правила подбора сепараторов и верификации ребер в оАОГ [7, 8, 14].

Для класса АОГ-моделей понятия ЛоМС и НИС совпадают [16]. Однако в ориентированно-циклических графах не каждый ЛоМС является неизбыточным сепаратором. На рис. 1 представлен пример ЦОГ, где для пары вершин (X, Y) имеется шесть локально-минимальных сепараторов: $\{R\}$, $\{Q, V\}$, $\{R, Z, W\}$, $\{Q, V, Z, W\}$, $\{R, T, U, W\}$, $\{Q, V, T, U, W\}$. Неизбыточными являются первый и второй из этих сепараторов, а минимальным — только первый.

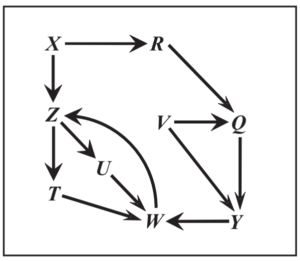

Рис. 1. Граф с циклонами

Для всех классов моделей имеет место вложенность множеств сепараторов названных видов:

$$\mathbf{S} = \mathrm{S}_{\min}(X, Y) \Rightarrow \mathbf{S} = \mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X, Y) \Rightarrow \mathbf{S} = \mathrm{S}_{\mathrm{lom}}(X, Y),$$

где знак равенства понимается как «… является некоторым …».

Утверждения относительно ЛоМС или НИС не переносятся полностью на минимальные сепараторы (тем более на любые сепараторы). Тем не менее совокупность фактов о локально-минимальных или избыточных сепараторах иногда позволяет получать выводы касательно минимальных сепараторов или ребер. Каждый минимальный сепаратор является также локально-минимальным. Если не существует ни одного ЛоМС для (X, Y), то не существует никакого сепаратора для (X, Y). Установленные в работах [7, 8] правила взаимосвязи между составами «сопряженных» ЛоМС позволяют направлять и (адаптивно) оптимизировать поиск сложных минимальных сепараторов, исходя из знания уже найденных в «окрестности» простых сепараторов и паттернов зависимостей.

ОСНОВНОЙ РЕЗУЛЬТАТ

Сформулированная ниже теорема является развитием результатов, полученных ранее. Первая (неточная) формулировка требований к члену ЛоМС и идея доказательства были приведены в [15]. Корректная формулировка теоремы и доказательство для случая оАОГ-моделей представлены в [14]. Эта теорема повторена в [7] с добавлением уточняющих утверждений. Доказательство теоремы из [14] при незначительном уточнении легко распространяется на класс НРКС и класс ЦОГ (с заменой ЛоМС на НИС). Приведем расширенную формулировку теоремы и доказательство.

Базовая теорема о члене неизбыточного сепаратора. Пусть в графе зависимостей, образованном из ориентированных и биориентированных ребер, вершина Z входит в состав некоторого неизбыточного сепаратора $\mathbf{S}$ для пары вершин (X, Y). В таком случае верно следующее:

1) вершина Z перекрывает некоторый путь между вершинами X и Y, причем на этом пути есть по крайней мере одна вершина, которая лежит на цепи между вершинами X и Y;

2) существует некоторый орпуть от вершины Z до вершины X, который не проходит через Y, или существует некоторый орпуть ρ от вершины Z до вершины Y, который не проходит через X;

3) если не существует ни одной цепи между X и Z, которая не проходит через Y, то тогда:

3а) существуют по меньшей мере две некоторые цепи λ_1 и λ_2 между Z и Y, которые не проходят через X и заканчиваются дугами $\to Y$;

3б) существует некоторая цепь λ_0 между вершинами X и Y, которая не проходит через вершину Z и заканчивается дугой $\to Y$; часть π' цепи λ_0, прилегающая к вершине X, является частью некоторого пути π между вершинами X и Y, причем вторая часть π'' пути π проходит через вершину Z и существует дуга $Z \to$ на π''; все коллайдеры на π'' открыты при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$; пусть пути λ_0 и π расходятся на вершине Q; тогда ближайшим к X коллайдером на пути π будет $\to Q \leftarrow$, а частью цепи λ_0, прилегающей к вершине Y, будет орпуть вида $\to Q \to \cdots \to Y$.

Доказательство. Сначала рассмотрим п. 2. Доказательство строится по итеративной схеме. Если вершина Z лежит на некоторой цепи между вершинами X и Y, то сразу получаем требуемое. Иначе, пусть вершина Z не лежит ни на какой цепи между вершинами X и Y. Вершина Z перекрывает по крайней мере один некоторый путь π между X и Y, причем Z не является кол-вершиной на пути π. Будем продвигаться по π, начиная с дуги $Z \to$. Ясно, что, проходя дуги согласно их ориентации, либо достигнем вершины X или Y (и тогда доказательство завершено), либо натолкнемся на некоторый коллайдер $\to Q_1 \leftarrow$ (ближайший к вершине Z) на пути π. Поскольку Z является членом НИС $\mathbf{S}$ и перекрывает путь π, коллайдер $\to Q_1 \leftarrow$ m-открыт при кондиционировании множества вершин $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$. Значит, либо имеем $Q_1 \in \mathbf{S}$, либо $\mathbf{S}$ включает некоторого потомка вершины Q_1, скажем T_1 (пусть это ближайший такой потомок). Соответственно получим орпуть $Z \to \cdots \to Q_1$ или $Z \to \cdots \to Q_1 \to \cdots \to T_1$. Рассмотрим T_1 (или Q_1) как члена НИС аналогично тому, как рассматривали вершину Z. Теперь из достигнутой вершины продвигаемся далее по тому пути между X и Y, который перекрывается с помощью T_1 (начиная с дуги $T_1 \to$). Повторяя изложенные рассуждения итеративно, продлеваем орпуть от Z до очередного члена Q_2 (или T_2) сепаратора $\mathbf{S}$ и т.д. (Для определенности возьмем $T_i \in \mathbf{S}$, имея в виду, что возможно $Q_i \equiv T_i$.) Если допустить, что в этом процессе будем повторно возвращаться в ту же самую вершину, т.е. нет ни одной дуги $T_i \to$, которая выводит из циклона в сторону X или Y, то это означало бы, что нет ни одного орпути, выходящего из какой-либо пройденной кол-вершины Q_i и ведущего к X, или к Y, или к другим членам множества вершин $\mathbf{S} \setminus \{T_1, \ldots, T_i\}$. Отсюда вытекало бы, что ни один из встреченных коллайдеров $\to Q_i \leftarrow$ не открывается при кондиционировании членов множества $\mathbf{S} \setminus \{T_1, \ldots, T_i\}$. Значит, нет ни одного пути между X и Y через $T_1, \ldots, T_i$, открытого при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{T_1, \ldots, T_i\}$. Тогда множество $\mathbf{S} \setminus \{T_1, \ldots, T_i\}$ было бы сепаратором для пары (X, Y). Это противоречит неизбыточности $\mathbf{S}$. Следовательно, необходимо признать, что существует орпуть от Z до вершины X или Y. Пункт 2 доказан.

Переходим к п. 3а. Вершина Z перекрывает некоторый путь π между X и Y; будем двигаться по этому пути от Z в сторону вершины X; продвижение приведет к некоторому коллайдеру $\to Q_1 \leftarrow$, открытому при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$. Вершина Q_1 или некоторый ее потомок входит в состав $\mathbf{S}$. Следовательно, существует орпуть $Q_1 \to \cdots \to Y$. (В противном случае, согласно п. 2 теоремы, придется предположить существование орпути $Q_1 \to \cdots \to X$, и тогда получим цепь $Z — \cdots \to Q_1 \to \cdots \to X$, что противоречит условию п. 3.) Таким образом, имеем первую искомую цепь $\lambda_1 : Z — \cdots \to Q_1 \to \cdots \to Y$. Напомним, что вершина Z перекрывает путь π между X и Y, поэтому существует путь π_{ZY} от Z в сторону вершины Y, который начинается дугой, отличной от дуги, ведущей в сторону вершины X. Если начнем продвигаться по этому пути π_{ZY} от вершины Z в сторону вершины Y, то либо дойдем до Y, не встретив коллайдера (что завершает доказательство), либо натолкнемся на некоторый коллайдер $\to W \leftarrow$. Ввиду неизбыточности $\mathbf{S}$ этот коллайдер открыт при кондиционировании $\mathbf{S}$. Следовательно, аналогично показанному выше должен быть орпуть $W \to \cdots \to Y$. Таким образом, получаем вторую искомую цепь $\lambda_2 : Z - \cdots \to W \to \cdots \to Y$.

Докажем п. 3б. Вершина Z перекрывает некоторый путь (пути) между X и Y, скажем π. (Ясно, что все коллайдеры на пути π открыты при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$, иначе вершина Z не была бы членом никакого НИС для пары вершин (X, Y).) Начнем продвигаться по пути π от Z в сторону вершины X, рассматривая кол-вершины на этом пути. Пусть первым (ближайшим к Z) встретился коллайдер $\to Q_1 \leftarrow$.

Если между Q_1 и X существует некоторая цепь δ, не проходящая через Y, то δ (и каждая такая цепь) имеет вид $X - \cdots \to Q_1$ (иначе получим противоречие условию п. 3). Поскольку коллайдер $\to Q_1 \leftarrow$ на пути π открыт, существует орпуть $Q_1 \to \cdots \to R$, где $R \in \mathbf{S} \setminus \{Z\}$. (В частности, возможно $R \equiv Q_1$.) Ясно, что не существует ни одного орпути вида $R \to \cdots \to X$, иначе получили бы цепь $Z — \cdots \to Q_1 \to \cdots \to R \to \cdots \to X$, не проходящую через Y, что противоречит условию п. 3. Следовательно, согласно п. 2 должен существовать орпуть вида $R \to \cdots \to Y$. Тогда конкатенация цепи δ (между Q_1 и X) с орпутем $Q_1 \to \cdots \to R$ и орпутем $R \to \cdots \to Y$ дает цепь λ_0 между вершинами X и Y, требуемую для п. 3б. Часть цепи λ_0 налагается на часть пути π между вершинами X и Y, который проходит через вершину Z.

Пусть теперь между Q_1 и X не существует цепи, не проходящей через Y. Коллайдер $\to Q_1 \leftarrow$ на пути π открыт при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$. Продолжим продвигаться по пути π в сторону вершины X, рассматривая кол-вершины на этом пути. Ввиду конечности пути π обязательно встретится такая кол-вершина Q, которая соединена с X цепью π', не проходящей через Y, причем все пройденные коллайдеры открыты при кондиционировании $\mathbf{S} \setminus \{Z\}$. Существование орпути $Q \to \cdots \to Y$ следует из того, что вершина, кондиционирование которой открывает коллайдер $\to Q \leftarrow$ на пути π, принадлежит НИС для пары (X, Y). Получены все необходимые для п. 3б выводы.

Докажем п. 1. Если вершина Z лежит на некоторой цепи между вершинами X и Y, то доказательство п. 1 завершено. Если вершина Z не лежит ни на одной цепи между X и Y, то без потери общности можно считать, что согласно п. 2 существует некоторый орпуть от вершины Z до вершины Y, который не проходит через X. Тогда выполняются условия п. 3 и требуемое доказательство содержится в доказательстве п. 3б. Доказательство теоремы завершено.

Изложенное доказательство охватывает все упомянутые выше классы моделей, включая НРКС и ЦОГ-модели. Теорему легко распространить также на другие случаи. Вопрос открыт для моделей с «флагами» и неориентированными петлями (для них нужно определить или выбрать соответствующий вариант марковских свойств). Если рассмотреть модель, построенную из подлинно неориентированных ребер, то все пути становятся цепями и понятие коллайдера теряет смысл. Тогда п. 2 теоремы также теряет смысл, условия п. 3 выполнить невозможно, а п. 1 примет следующую форму: вершина Z перекрывает некоторую цепь между X и Y.

Заметим, что базовая теорема предоставляет необходимые требования к членам НИС. Этим требованиям могут также удовлетворять некоторые вершины, не принадлежащие никакому НИС.

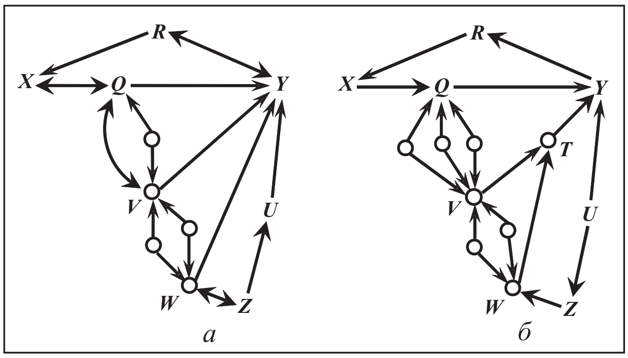

Рис. 2. Иллюстрация базовой теоремы: НРКС (*а*); ЦОГ с одним циклоном (*б*)

На рис. 2 изображены две модели, где Z входит в состав НИС и ЛоМС для пары (X, Y), причем п. 3 базовой теоремы выполняется. Рассматривая НРКС на рис. 2, *а*, находим $\mathrm{S}_{\mathrm{lom}}(X, Y) = \{R, Q, V, W, Z\} = \mathrm{S}_{\min}(X, Y)$. Вершина Z перекрывает пути между X и Y, которые проходят через Q, V, W, Z, U (и соответствующие непоименованные вершины, отображенные кружками). Каждый из путей π проходит через вершину Q, которая лежит на цепи между X и Y. Две цепи, λ_1 и λ_2, упомянутые в п. 2, — орпуть $\rho: Z \to U \to Y$ и цепь $Z \leftrightarrow W \to Y$. Цепь λ_0 — это $X \leftrightarrow Q \to Y$.

На рис. 2, *б* показан пример ЦОГ. Эта модель, в частности, отличается тем, что для сепаратора $\mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X, Y) = \{R, Q, T, Z\} = \mathbf{S} = \mathrm{S}_{\min}(X, Y)$ вершина Z перекрывает несколько путей, на которых все кол-вершины, кроме одной, не входят в состав $\mathbf{S}$. Эти кол-вершины открываются при кондиционировании вершины T. Кроме того, в отличие от случая на рис. 2, *а*, в этом ЦОГ существует зависимость $\sim \mathrm{Ds}(X;;Z)$.

ФОРМИРОВАНИЕ НИС И ЛоМС

Из базовой теоремы вытекают следствия.

Следствие 1. Если $Z \in \mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X, Y)$ и не существует ни одной цепи между X и Z, то все цепи между вершинами Z и Y заканчиваются дугами $\to Y$ и все цепи между X и Y заканчиваются дугами $\to Y$.

Следствие 2 (правило аппендикса). Если существует такая R, что верно $\mathrm{Ds}(X;R;Z)\& \mathrm{Ds}(Y;R;Z)$, то Z не принадлежит никакому $\mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X,Y)$.

(Логика этого правила подобна логике правила отстранения.)

Следствие 3 (правило получужого гена; semi-alien gene). Если верны факты $\mathrm{Ds}(X;;Z)$, $\sim \mathrm{Ds}(W;;Z)$ и $\mathrm{Ds}(W;;Y)$, то Z не принадлежит никакому $\mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X,Y)$.

Для всех известных классов сетей зависимостей верно следующее простое, но важное утверждение.

Принцип стержня сепаратора (necessity of separator's pivot). В состав каждого сепаратора для пары безусловно зависимых вершин (X,Y) входит, как минимум, одна вершина Z, которая лежит на некоторой цепи между вершинами X и Y. (Такая вершина Z называется стержнем сепаратора для (X,Y).)

Это утверждение доказывается просто (см., например, [14]). В п. 1 базовой теоремы содержится вариант принципа стержня для НИС. Предположительно, для принципа стержня можно найти универсальное основание — принцип общей причины (H. Reichenbach).

Для всех указанных выше классов моделей выполняется следующее правило.

Правило отстранения. Если в орграфе модели верно $\mathrm{Ds}(X;Y;Z)$, то вершина Z не входит в состав никакого НИС для пары вершин (X,Y).

Доказательство. Предположим противное, т.е. пусть верно $\mathrm{Ds}(X;Y;Z)$ и $Z \in \mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X,Y)$. Тогда факт $\mathrm{Ds}(X;Y;Z)$ означает, что не существует никакой цепи между вершинами Z и X, которая не проходит через Y. Следовательно, ввиду факта $Z \in \mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X,Y)$ и в силу п. 3б базовой теоремы существует некоторая цепь λ: $X - \cdots \to Y$, которая не проходит через Z. Согласно п. 2 базовой теоремы существует орпуть ρ: $Z \to \cdots \to Y$, который не проходит через X. Конкатенация цепи λ и орпути ρ образует путь между Z и Y с одним коллайдером. При этом возможны два случая: 1) орпуть ρ и цепь λ не пересекаются, а стыкуются на вершине Y; 2) орпуть ρ и цепь λ пересекаются на некоторой вершине W. В первом случае (по определению m-сепарации) получаем $\sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z)$, что противоречит условию правила. Во втором случае легко видеть, что орпуть ρ и цепь λ сходятся к вершине W дугами $\to W$, т.е. имеют вид $Z \to \cdots \to W \to \cdots \to Y$ и $X - \cdots \to W \to \cdots \to Y$. (Действительно, если предположить альтернативную ориентацию дуг возле вершины W, то получим цепь между вершинами Z и X, которая не проходит через Y, что противоречит факту $\mathrm{Ds}(X;Y;Z)$). Следовательно, во втором случае (по определению m-сепарации) получим $\sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z)$, что также противоречит условию правила.

Данное доказательство лаконичнее предложенных ранее и охватывает класс ЦОГ-моделей. Вариант доказательства, изложенный в [14], использует запрет циклонов. (Вариант доказательства из [7] содержит неточности.) Для статистического тестирования целесообразнее использовать правило актуального отстранения [7, 14].

Тривиальным следствием из правила отстранения является **правило провокации**: если $Z \in \mathrm{S}_{\mathrm{nred}}(X,Y)$ и верно $\mathrm{Ds}(X;;Z)$, то $\sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z)$.

Базовая теорема использована для доказательства ряда правил. Все правила, предложенные в [7, 8] (а также правила, реализованные в алгоритме вывода модели [9, 11]), можно разбить на «семейства» согласно выполняемой ими функции (роли). Правила этих семейств распознают соответственно: присутствие ребра; отсутствие ребра; вершину как не члена никакого ЛоМС (НИС) для заданной пары вершин; вершину как обязательного члена всех ЛоМС (НИС) для пары вершин. (Существуют также правила с другими функциями.)

Хотя упомянутые правила были сформулированы для оАОГ-моделей, тем не менее многие правила сохраняют силу и в более общем случае. Некоторые из правил останутся корректными после уточнения формулировки. Например, в ходе доказательства нескольких правил, распознающих отсутствие ребра в оАОГ (в том числе непоглощения, изолятора, полуаппендикса, квазиинструментальной пары [7, 8]), неявно использовалась следующая логика рассуждений: «Поскольку невозможно ни ребро $X \to Y$, ни ребро $X \leftarrow Y$, то не существует никакого ребра между X и Y». Ясно, что для случая НРКС необходимо переписать окончание этого утверждения таким образом: «…, то нет однооориентированного ребра между X и Y». В доказательстве других правил также предполагалось, что отсутствуют биориентированные ребра. Поэтому для НРКС теряют силу такие правила: «множества изолированных общих ковариат» и «изолированной общей ковариаты в контексте» (см. предложения 4 и 5 в [8]). На класс НРКС нельзя распространить утверждение о существовании «генетически минимального» сепаратора (правило 3 в [17]). В ЦОГ-моделях правило чужого гена (alien gene) из [7, 11, 17] корректно для НИС, но для ЛоМС требует дополнительных условий. Для ЛоМС в ЦОГ-моделях неверны правило изолятора и факт 10 из [7].

В отличие от оАОГ-моделей в НРКС, смешанных сетях и ЦОГ импликация (1) не выполняется. Иными словами, бывают случаи, когда сепаратора не существует для пары вершин, не связанных ребром [1, 2, 4, 5]. На рис. 3 приведены простые примеры моделей, где для несмежных вершин X и Y не существует m-сепаратора. Случай ЦОГ на рис. 3, *б* парадоксален тем, что единственная цепь между X и Y проходит через Z, и при этом вершины X и Z можно сепарировать, а X и Y — нет.

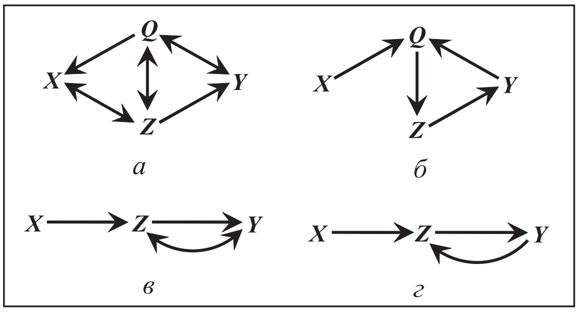

Рис. 3. Модели с несепарируемыми вершинами: НРКС (*а*); ЦОГ (*б*); МАОГ (*в*); ЦОГ с кратчайшим циклоном (*г*)

Заметим, что в анцестральных моделях и НРКС отсутствие сепаратора для несмежных вершин (X, Y) невозможно в том случае, если имеется только одна цепь между X и Y. Поэтому правила, записанные в [8] как предложение 6 (простой потенциальный стержень сепаратора) и предложение 10 (изоляция единственного возможного стержня сепаратора), остаются корректными для НРКС и анцестральных графов. Но для МАОГ эти правила становятся неверными в случае, когда единственный кандидат в стержни имеет только одного родителя.

Обратимся к вопросу об обязательных или условно-обязательных членах всех НИС (ЛоМС) для заданной пары вершин. Согласно принципу стержня в состав каждого непустого сепаратора для пары вершин (X, Y) должна входить хотя бы одна вершина Z, которая лежит на некоторой цепи между вершинами X и Y. Необходимые требования к стержню сепаратора сформулированы в [8] через понятие потенциального стержня сепаратора. Потенциальным стержнем сепаратора для пары (X, Y) названа вершина Z, удовлетворяющая условиям: $\sim \mathrm{Ds}(X;;Z)$, $\sim \mathrm{Ds}(Y;;Z)$, $\sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z)$ и $\sim \mathrm{Ds}(Z;X;Y)$. Можно ужесточить требования к стержню сепаратора, опираясь на базовую теорему. Сформулируем понятие «претендент в стержни» (пред-стержень; pre-pivot).

Определение 3. Вершина Z называется претендентом в стержни сепаратора для пары вершин (X, Y), если выполняются следующие условия:

1) $\sim \mathrm{Ds}(X;;Z) \& \sim \mathrm{Ds}(Y;;Z) \& \sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z) \& \sim \mathrm{Ds}(Z;X;Y)$;

2) не существует такой вершины R, что верно $\mathrm{Ds}(X;R;Z)\& \mathrm{Ds}(Y;R;Z)$;

3) не существует таких W и Q, что верно $\sim \mathrm{Ds}(W;;Z)\& \sim \mathrm{Ds}(Q;;Z)\&$ $\& \mathrm{Ds}(W;;X)\& \mathrm{Ds}(Q;;Y)$ (в частности, охватывается случай $W \equiv Q$).

Условие 3 объединяет правило чужого гена (когда $W \equiv Q$) и правило изолятора. Определение 3 не исчерпывает необходимых требований к стержням сепаратора (в частности, учтены не все свойства из [7, 8]). Заметим, что для модели на рис. 3, *б* для пары (X, Z) имеется только один стержень сепаратора (Q), однако претендентом в стержень является также Y. Интересно, что никакие факты (не)зависимости не помогают распознать, что Y не лежит ни на какой цепи между X и Z.

Охарактеризуем тех членов НИС (ЛоМС), которые не являются стержнями сепаратора.

Определение 4. Вершина Z называется нестержневым (non-pivotal), или вовлеченным (engaged), членом НИС для пары вершин (X, Y), если Z не лежит ни на одной цепи между вершинами X и Y и является членом хотя бы одного $\mathrm{S_{nred}}(X, Y)$.

В отличие от класса оАОГ в классах ЦОГ и МАОГ вершина Z, удовлетворяющая определению 4, может обладать свойством $\sim \mathrm{Ds}(Z;;X)\& \sim \mathrm{Ds}(Z;;Y)$. Иллюстрацией служит рис. 2, *б*. Отметим, что в ЦОГ возможен парадоксальный случай, когда для $Z \in \mathrm{S_{lom}}(X, Y)$ выполняется $\mathrm{Ds}(Z;;X)\& \mathrm{Ds}(Z;;Y)$. Пример представлен на рис. 4, где $\mathrm{S_{lom}}(X, Y) = \{R, Q, W, Z\}$, $\mathrm{S_{nred}}(X, Y) = \{R\}$.

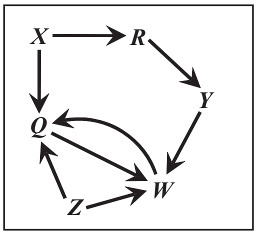

Рис. 4. Пример ЦОГ

Теперь скомпилируем некоторые необходимые требования к нестержневым членам НИС (ЛоМС).

Определение 5. Вершина Z называется претендентом в нестержневые (вовлеченные) члены НИС для пары вершин (X, Y), если она удовлетворяет следующим условиям:

1) $\sim \mathrm{Ds}(X;Y;Z)\& \sim \mathrm{Ds}(Z;X;Y)\& \{\sim \mathrm{Ds}(X;;Z)$ or $\sim \mathrm{Ds}(Y;;Z)\}$;

2) не существует такой R, что верно $\mathrm{Ds}(X;R;Z)\& \mathrm{Ds}(Y;R;Z)$;

3) не существует таких W и Q, что верно $\sim \mathrm{Ds}(W;;Z)\ \& \sim \mathrm{Ds}(Q;;Z)\&$ $\& \mathrm{Ds}(W;;X)\& \mathrm{Ds}(Q;;Y)$ (в частности, охватывается случай $W \equiv Q$);

4) если $\mathrm{Ds}(Z;;X)$, то не существует такой W, что верно $\sim \mathrm{Ds}(W;;Z)\&$ $\& \mathrm{Ds}(W;;Y)$.

Объединим указанные необходимые требования и охарактеризуем НИС в целом.

Принцип композиции НИС. Каждый (непустой) НИС для пары вершин (X, Y) состоит из непустого множества $\mathbf{V}$ претендентов в стержни сепаратора для пары (X, Y) и некоторого множества $\mathbf{L}$ (может быть, пустого) претендентов в нестержневые (вовлеченные) члены НИС для пары вершин (X, Y). Если множество $\mathbf{L}$ не пустое, то некоторая вершина $Q \in \mathbf{L}$ m-зависит от некоторой вершины $R \in \mathbf{V}$.

Процесс вывода (синтеза) скелета модели [2, 3, 5, 6, 8, 9] можно свести к поиску сепараторов. Для эффективности этого процесса необходимо сокращать множество кандидатов в члены сепаратора (отвергая кандидатов) и распознавать существование или отсутствие ребра как можно раньше. Например, известный алгоритм PC [2, 3, 5] рассматривает как кандидатов в члены сепаратора для пары (X, Y) все вершины, которые считаются (возможно) смежными к X или Y. Правила и требования, предложенные выше, а также в [7–9], существенно обогащают тактику вывода модели и повышают эффективность отсеивания кандидатов в сепараторы. Действительно, некоторые из разработанных правил иногда позволяют исключить из списка кандидатов в члены сепаратора для (X, Y) вершину, смежную с X или Y. Условие 3 определения 3 открывает возможность отклонять некоторых кандидатов в члены сепаратора для (X, Y), которые являются смежными одновременно с X и Y. Важно, что полученные результаты позволяют завершить процесс вывода модели намного раньше, чем традиционные методы. Принципы такого завершения вывода сформулированы в [7–9] как резолюции (не)смежности. Однако ввиду того что в общем случае отсутствие сепаратора не обязательно означает существование ребра, необходимо переформулировать некоторые резолюции.

Экспресс-резолюция смежности: если для пары зависимых вершин (X, Y) не осталось ни одного не отвергнутого претендента в стержни сепаратора, то существует ребро между X и Y. Таким образом, получаем сильное достаточное условие для идентификации ребра в модели. (Эта резолюция верна даже для общего класса смешанных графов. Также корректно правило Lack of separator's pivot [11].)

Традиционный принцип завершения поиска сепаратора принимает новую форму. Резолюция несепарабельности: если для пары зависимых вершин (X, Y) испытаны все «обязательные» варианты наборов не отвергнутых кандидатов в члены сепаратора (в соответствии с принципом композиции НИС) и независимости (сепарации) не найдено, то никакого сепаратора для (X, Y) не существует.

Во многих ситуациях несепарабельность влечет смежность, например, для анцестральных графов, при условии, что остался только один не отвергнутый претендент в стержни сепаратора. Кроме того, быстрая идентификация отсутствия орпути [8, 17] дает возможность идентифицировать отсутствие каузальной связи косвенно, без нахождения соответствующего факта независимости.

Когда идентифицирована несепарабельность вершин X и Y (но нет уверенности в присутствии ребра), возможны три варианта решения. Придерживаясь принципа, принятого в оАОГ, можно считать, что ребро существует. Иначе, вопрос о существовании ребра остается нерешенным. И наконец, можно прибегнуть к альтернативным методам верификации ребра (речь идет о выводе модели из данных). В частности, в составе МАОГ-модели для так называемой P-конфигурации отсутствие ребра проявляется как специальный паттерн (Verma constraint). Известны методы верификации инструментальности переменной, которые иногда могут подтвердить существование соответствующего ребра или предоставить асимптотически корректные свидетельства об его отсутствии.

Чтобы получить эмпирические «двойники» (counterparts) предложенных правил, предназначенные для вывода скелета модели из данных (или из распределения вероятностей), требуется в левой части соответствующего правила заменить графовые предикаты статистическими. В моделях без циклонов замена терма вида $\sim \mathrm{Ds}(A; B; C)$ термом $\sim \mathrm{Pr}(A; B; C)$ корректна в силу импликации (2). Для обоснования корректности замены $\mathrm{Ds}(A; B; C)$ на $\mathrm{Pr}(A; B; C)$ необходимо принять соответствующие версии предположения каузальной необманчивости. Поскольку в требованиях к членам НИС (ЛоМС) и в условиях предложенных правил использованы исключительно факты m-независимости нулевого и первого ранга, то и предположения требуются не очень «жесткие». Достаточно принять предположение «безусловной (маргинальной) цепной необманчивости» и предположение «необманчивости первого ранга» [8, 9]. Но можно ослабить и эти предположения. (Заметим, что условия 3 и 4 определений 3 и 5 порождают статистически ненадежные правила, так как полагаются на транзитивность зависимостей.)

В ЦОГ-моделях значения переменных могут многократно изменяться (возможна бесконечная осцилляция). Поэтому аналитик должен уточнить, какое совместное распределение вероятностей необходимо анализировать. (Распределение вероятностей, порождаемое выборкой данных, может не соответствовать равновесному состоянию циклической модели.) Кроме того, неясно, как в циклической модели описывать авторегрессионные связи. С практической точки зрения целесообразно «расшить» циклоны во времени, перейти к «спиралям». Если осцилляция быстро приходит в равновесие, резонно использовать модели на основе цепных графов [18].

Эксперименты показали, что оснащение алгоритма вывода оАОГ-модели из данных набором разработанных правил позволило резко сократить количество тестов условной независимости высокого ранга, а иногда и снизить максимальный ранг тестов [9, 11]. В результате снижается риск ложного принятия гипотезы независимости. В случае структур типа лес или полилес для алгоритма вывода модели, оснащенного только двумя правилами, будет достаточно тестов нулевого и первого ранга [10]. Основной эффект внедрения описанных средств в алгоритм вывода модели — значительное снижение суммарного количества выполняемых тестов и объема вычисления необходимых статистик.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pearl J. Causality: models, reasoning, and inference. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. — 526 p.
2. Spirtes P., Glymour C., and Scheines R. Causation, prediction and search. — 2nd ed. — New York: MIT Press, 2001. — 543 p.
3. The TETRAD project: Constraint based aids to causal model specification / R. Scheines, P. Spirtes, C. Glymour et al. // Multivar. Behavior. Res. — 1998. — **33**, N 1. — P. 65–118.
4. Richardson T., Spirtes P. Ancestral graph Markov models // Ann. Statistics. — 2002. — **30**, N 4. — P. 962–1030.
5. Spirtes P., Meek C., Richardson T. An algorithm for causal inference in the presence of latent variables and selection bias // Computation, Causation, and Discovery. — Menlo Park (CA): AAAI Press, 1999. — P. 211–252.
6. Spirtes P. Directed cyclic graphical representations of feedback models // Proc. of the 11th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (1995). — San Francisco (CA): Morgan Kaufmann, 1995. — P. 491–498.
7. Балабанов А.С. Минимальные сепараторы в структурах зависимостей. Свойства и идентификация // Кибернетика и системный анализ. — 2008. — № 6. — С. 17–32.
8. Балабанов А.С. Формирование минимальных d-сепараторов в системе зависимостей // Там же. — 2009. — № 5. — С. 38–50.
9. Балабанов А.С., Гапеев А.С., Гупал А.М., Ржепецкий С.С. Быстрый алгоритм вывода структур байесовых сетей из данных // Проблемы управления и информатики. — 2011. — № 5. — С. 73–80.
10. Балабанов О.С. Прискорення алгоритмів відтворення баєсових мереж. Адаптація до структур без циклів // Проблеми програмування. — 2011. — № 1. — С. 63–69.
11. Balabanov O.S. Acceleration of inductive inference of causal diagrams // Proc. of the 4th Intern. Workshop on Inductive Modelling (ICIM'2011), Kyiv, July 4–11, 2011. — Kyiv, 2011. — P. 16–21.
12. Verma T., Pearl J. Causal networks: Semantics and expressiveness // Proc. of the Fourth Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-88). — New York (NY): Elsevier Science, 1988. — P. 352–359.
13. Neal R.M. On deducing conditional independence from d-separation in causal graphs with feedback // J. Artif. Intellig. Res. — 2000. — **12**. — P. 87–91.
14. Балабанов О.С. Правила підбору сепараторів у баєсівських мережах // Проблеми програмування. — 2007. — № 4. — С. 22–33.
15. Балабанов А.С. Восстановление структур систем вероятностных зависимостей из данных. Аппарат генотипов переменных // Проблемы управления и информатики. — 2003. — № 2. — С. 91–99.
16. Tian J., Paz A., Pearl J. Finding minimal d-separators: (Tech. rep.) / Computer Sci. Dep., Univ. of California, LA. — R-254. — Los Angeles (CA), 1998. — 15 p.
17. Балабанов А.С. О логике независимости каузальных диаграмм // Компьютерная математика. — Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2009. — № 2. — С. 109–115.
18. Lauritzen S.L., Richardson T.S. Chain graph models and their causal interpretations // J. Royal Statist. Soc. — 2002. — **B-64**. — P. 321–361.

Поступила 22.02.2012