

Antal Péter

Jelölések*

Felhasznált jelölések

| | |
|--|--|
| $x, \underline{x}, \underline{x}$ | skalár, (oszlop)vektor vagy halmaz, mátrix |
| $X, x, p(X)$ | véletlen változó X , érték x , valószínűségi tömegfüggvény/sűrűségfüggvény X |
| $E_{X,p(X)}[f(X)]$ | $f(X)$ várható értéke $p(X)$ szerint |
| $\text{var}_{p(X)}[f(X)]$ | $f(X)$ varianciája $p(X)$ szerint |
| $I_p(\underline{X} \underline{Z} \underline{Y})$ | \underline{X} és \underline{Y} megfigyelési függetlensége \underline{Z} feltétellel p esetében |
| $(X \perp\!\!\!\perp Y Z)_p$ | $I_p(\underline{X} \underline{Z} \underline{Y})$ |
| $(X \not\perp\!\!\!\perp Y Z)_p$ | $\neg I_p(\underline{X} \underline{Z} \underline{Y})$ |
| $CI_p(\underline{X}; \underline{Y} \underline{Z})$ | \underline{X} és \underline{Y} beavatkozási függetlensége \underline{Z} feltétellel p esetében |
| \prec | (részleges) sorrendezés |
| \prec^c | a változók egy teljes sorrendezése |
| \prec^G | adott G irányított körmentes gráffal kompatibilis sorrendek halmaza |
| $\prec(n)$ | n objektum sorrendjeinek (permutációinak) a halmaza |
| $G, \underline{\theta}$ | Bayes-háló struktúrája és paraméterei |
| G^\sim | G irányított körmentes gráf esszenciális gráfja |
| $\mathcal{G}(n)/\mathcal{G}^k(n)$ | n csomópontú maximum k szülőjű DAG-ok halmaza |
| \mathcal{G}^\prec | adott \prec sorrenddel kompatibilis DAG-ok halmaza |
| \mathcal{G}^G | adott G DAG-gal megfigyelési ekvivalens DAG-ok halmaza |
| \sim | kompatibilitási reláció |
| $\text{pa}(X_i, G) \sim \prec$ | $\text{pa}(X_i, G)$ szülői halmaz kompatibilis \prec sorrendezéssel |
| $\text{MB}_p(X_i)$ | Markov-takarója X_i -nek p -ben |
| $\text{pa}, \text{pa}(X_i, G)$ | szülői változók halmaza, X_i szüleinek halmaza G -ben |
| pa_{ij} | a j . konfigurációja a szülői értékeknek egy sorrendben |
| $\text{bd}(X_i, G)$ | X_i szüleinek, gyerekeinek és gyerekei egyéb szüleinek halmaza G -ben |
| $\text{MBG}(X_i, G)$ | a Markov-takaró algráfja X_i -nek G -ben |
| $\text{MBM}(X_i, X_j, G)$ | a Markov-takaróbeliség relációja |
| n | valószínűségi változók száma |
| k | maximális szülőszám DAG-okban |
| N | mintaszám |
| V | összes valószínűségi változók száma |
| Y | válasz, kimeneteli, függő változó |

*További konvenciók az egyes fejezetekben jelöltek.

| | |
|--|--|
| $N_+/N_{...,+,...}$ | $N_i/N_{...,i,...}$ megfelelő összegei |
| $D X$ | X változóhalmazra szűkített adathalmaz |
| $\ $ | kardinalitás |
| $1()$ | indikátorfüggvény |
| f', f'' | f függvény első és második deriváltjai |
| A^T | A mátrix transzponáltja |
| $\underline{x} \cdot \underline{y}$ | \underline{x} és \underline{y} vektorok skalárszorzata |
| ξ^+/ξ^- | informatív/neminformatív információs kontextus |
| $\neg, \wedge, \vee, \neq, \rightarrow$ | standard logikai operátorok |
| $\cap, \cup, \setminus, \Delta$ | standard halmazműveletek |
| $KB \vdash_i \alpha$ | α bizonyíthatósága KB -ből |
| Γ | a Gamma függvény |
| $\text{Beta}(x \alpha, \beta)$ | a Béta eloszlás sűrűségfüggvénye (pdf) |
| $\text{Dir}(x \underline{\alpha})$ | a Dirichlet eloszlás sűrűségfüggvénye |
| $N(x \mu, \sigma)$ | az egyváltozós normál eloszlás sűrűségfüggvénye |
| $N(x \underline{\mu}, \underline{\Sigma})$ | a többváltozós normál eloszlás sűrűségfüggvénye |
| BD, BD_e | Bayesian Dirichlet prior, megfigyelési ekvivalens BD prior |
| BD_{CH} | Bayesian Dirichlet (BD) prior 1 hiperparaméterekkel |
| BD_{eu} | megfigyelési ekvivalens és uniform BD prior |
| $L(\underline{\theta}; D_N)$ | $p(D_N \underline{\theta})$ likelihood függvénye |
| $H(X, Y)$ | X és Y entrópiája |
| $I(X; Y)$ | X és Y kölcsönös információjaja |
| $\text{KL}(X Y)$ | X és Y Kullback–Leibler divergenciája |
| $H(X Y)$ | X és Y keresztentrópiája |
| $L_1(,), L_2(,)$ | az abszolútértékbeli (Manhattan) négyzetes (euklidészi) távolságok |
| $L_0(,)$ | 0-1 veszteség |
| $\mathcal{O}()/\Theta()$ | aszimptotikus, nagyságrendi felső és alsó határ |

Rövidítések

| | |
|---------------|---|
| ROC | Receiver Operating Characteristic (ROC) görbe |
| AUC | ROC-görbe alatti terület |
| BMA | bayesi modell átlagolás |
| BN | Bayes-háló |
| DAG | irányított körmentes gráf |
| FSS | jegy kiválasztási probléma |
| MAP | maximum a posteriori |
| MI | kölcsönös információ |
| ML | maximum likelihood |
| MBG | Markov-határ gráf |
| MB | Markov-takaró |
| MBM | Markov-takaróbeliség |
| (MC)MC | (Markov-láncos) Monte Carlo |
| Naive-BN/N-BN | naiv Bayes-háló |

Tartalomjegyzék

| | |
|--|----------|
| . Jelölések | 3 |
| 1. Oksági modellek | 9 |
| 1.1. Bevezető | 9 |
| 1.2. Bayes-hálók ekvivalencia-osztályai | 12 |
| 1.3. Oksági Bayes-hálók | 14 |
| 1.4. Az oksági értelmezés nehézségei | 16 |
| 1.4.1. Tisztán magasabbrendű függések | 16 |
| 1.4.2. Intranszitiv függések | 16 |
| 1.4.3. Simpson paradoxona | 17 |
| 1.4.4. Ellenérvek | 17 |
| 1.5. Bayes-hálók a Bayes-statisztikai keretben | 18 |
| 1.5.1. Paraméter priorok Bayes-hálókhoz | 18 |
| 1.5.2. Struktúra priorok Bayes-hálókhoz | 20 |
| 1.6. Megfigyelés, beavatkozás, spekuláció | 21 |
| 1.7. Tudásmérnökség | 21 |
| 1.8. Bayes-háló kiterjesztések | 23 |

1. fejezet

Oksági modellek

A fejezetben összefoglaljuk a passzív megfigyelésekből származtatható függetlenségi modellek és a Bayes háló kapcsolatait. Bevezetjük a Bayes háló strukturák felett definiált megfigyelési ekvivalencia relációt és az ebből adódó kényszerített él fogalmát, amely az oki relációk elégségességi feltevése mellett és modellminimalitási feltevések mellett a passzív megfigyelésekből elérhető oksági következtetéseknek egy fontos határa. Ismertetjük a megfigyelési ekvivalencia osztályokon belül a priorokra vonatkozó ekvivalenciakényszereket és az ezekből származó parametrikus megkötéseket, az ezek miatt adódó Dirichlet eloszlásokat. Bemutatjuk a passzív megfigyelések felett definiált valószínűségi következtetéseken túli oksági következtetések típusait. Végezetül ismertetjük a valószínűségi szakértői rendszerekhez kapcsolódó tudásmérnökség munkafolyamatát és egyes fázisait.

1.1. Bevezető

A Valószínűségi gráfos modellek című fejezetben ismertett megközelítés a bizonytalanság kezelésére, modellezésére mind tudománytörténeti, mind gyakorlati szempontból sikeresnek mondható, aminek eredményeképpen a bayesi statisztika, a bayesi döntéelmélet, illetve a valószínűségi gráfos modellek, ezen belül a Bayes-háló és a Markov-háló megjelentek és széles körben elterjedtek szinte minden tudományterületen, de ipari és kereskedelmi alkalmazásokban is. Az oksági kutatás sok tekintetben eltérő helyzetben van, mivel az okozatiság

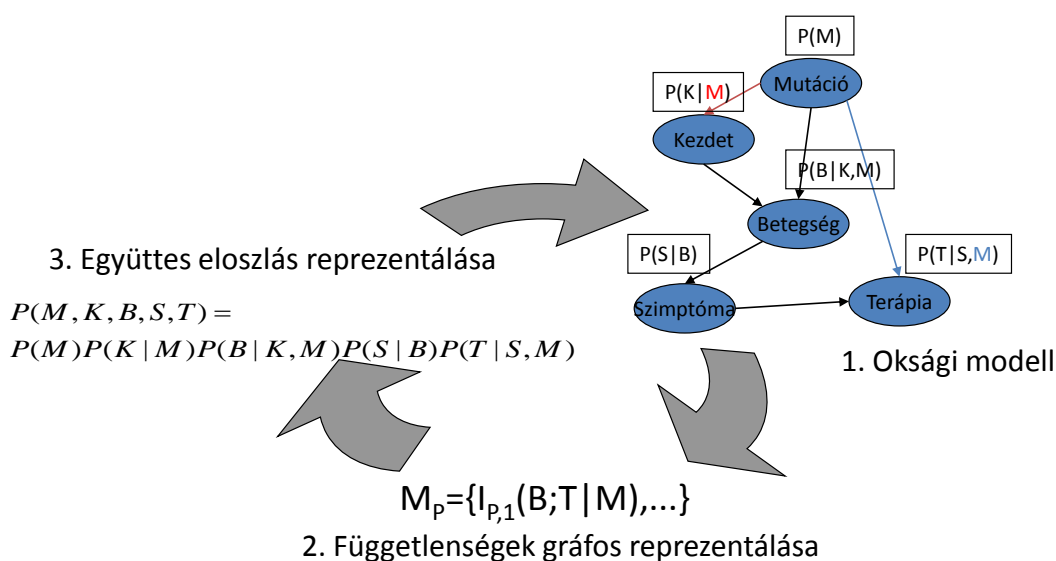
1. inkább a determinisztikus és nem bizonytalan világgéphez tartozik,
2. aszimmetrikus, szemben az információs, asszociációs bizonytalansággal,
3. aktív cselekvések, beavatkozások következményeihez kapcsolódik, és nem passzív megfigyelésekhez,
4. mechanizmusokhoz kapcsolódik, amelyek autonómok, modulárisok az őket terhelő zajok és a beavatkozások viszonylatában,
5. idői-aspektussal is rendelkezik.

A bizonytalanság modellezésében az asszociációs relációk és az oksági relációk megkülönböztetésére több szempontrendszer is megfogalmaztak, ilyen például az orvosbiológiai kutatásokból származó következő lista, mely az oksági relációkkal szemben támasztott követelményeket sorolja fel [33]:

1. Erő. Erős statisztikai asszociáció.
2. Konzisztencia, specifikusság, koherencia. Például az ok megszüntetésével a hatás is szűnjön meg (szükségesség), és az ok bekövetkeztével a hatás is erősödjön (elégesség).
3. Gradiens. Legyen a következmény arányos a hatással (dózis–hatás elv).
4. Temporalitás. X időben előzze meg Y -t.
5. Plauzibilitás és analógia. Létezzen magyarázat, és ne legyenek alternatív, zavaró tényezőre is építő alternatív magyarázatok.
6. Kísérleti adatok léte.

Jelen fejezetben csak az oksági modellek szakértői tudáson alapuló létrehozását és felhasználását vizsgáljuk, a tanulásukat az *Intelligens adatelemzés* című jegyzet egyik fejezete tartalmazza.

Kiindulópontként elfogadjuk a Bayes-statisztikai keretet. Célunk egy olyan modell létrehozása, amely összegzi az eddigi ismereteket és megfigyeléseket, s amely lehetővé teszi a beavatkozások hatásainak automatizált kikövetkeztetését is. Elsőként azt vizsgáljuk meg, hogy a Valószínűségi gráfos modellek című fejezetben ismertetett Bayes-hálók mennyiben felelnek meg az oksági modellekkel kapcsolatos intuíciónknak, nevezetesen annak az oksági szemantikának, hogy az élek közvetlen oksági ráhatást reprezentálnak. Az irányított körmentes gráfok, a DAG-ok, remélt hármass felhasználását az 1.1 ábra illusztrálja.



1.1. ábra. Bayes-hálók reprezentációjának három aspektusa.

Az experimentális oldalról közelítve bevezethető az ideális beavatkozáshoz tartozó (empirikus) eloszlás fogalma.

1.1.1. Definíció. [] Jelölje $do(X = x)$ az X változó beállítását x értékre, és jelölje $\hat{p}(Y|do(x))$ az ehhez a beavatkozáshoz tartozó eloszlást (elméleti kontextusban az empirikus voltát jelölő \hat{p} nem jelölt).

Természetesen a megfigyelési és beavatkozási eloszlások már a legegyszerűbb esetben is eltérhetnek. Fontoljuk meg a két X, Y változó alkotta rendszert, amelyeket egy $X \rightarrow Y$ oksági reláció köt össze indulálva a $p(X, Y)$ eloszlást. Az X esetében nincs különbség (passzív) megfigyelés és (aktív) beavatkozás között, de Y esetében már igen: $p(Y|do(x)) = p(Y|x)$, de $p(X|do(y)) = p(X)$ és nem egyenlő $p(X|y)$ -nal. A megfigyelési ekvivalencia analógiájára a *kauzális irrelevencia* fogalma is bevezethető [23, 12].

A statisztikai és oksági kapcsolatok kutatásának legfőbb fogyasztója epidemiológia. E területen a következő mérőszámok használtak az oksági relációk kvantitatív jellemzésére, amelyek a *do* szemantikát felhasználva a következőképpen írhatóak (egy bináris X (pl. kitettség) és Y (pl. betegség) között): rizikóbeli különbség vagy oksági hatás (δ),

tulajdonítható/okozott rizikó (θ) és az esélyhányados(Ψ).

$$\delta = p(y|do(x)) - p(y|do(\neg x)) \quad (1.1)$$

$$\theta = \frac{p(y|do(x)) - p(y|do(\neg x))}{p(y|do(x))} \quad (1.2)$$

$$\Psi = \frac{p(y|do(x))/p(\neg y|do(x))}{p(y|do(\neg x))/p(\neg y|do(\neg x))} \quad (1.3)$$

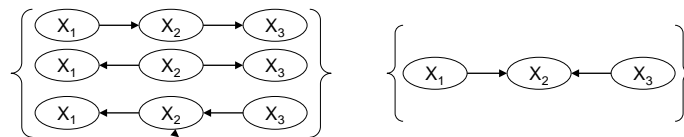
Természetesen ezeknek a mennyiségeknek a standard epidemiológiai definíciója nem a beavatkozással szemantikát használja, hanem az „adjustált” megfigyelési valószínűségeken alapulókat [24, 33, 32]. Az „adjustálás” (vagy „kontrollálás”) a zavaró tényezők Z eliminálására szolgál úgy, hogy X hatását Y -ra a potenciális zavaró tényezők azonos értékei mellett vizsgáljuk (azaz feltételbe emeljük és „fixen tartjuk” őket).

$$p(y|do(x)) = \sum_z p(y|x, z)p(z) \quad (1.4)$$

1.2. Bayes-hálók ekvivalencia-osztályai

Az eloszlás stabilitásának és szigorú pozitvitásának feltevése sem zárja ki, hogy az eloszlás függetlenségi modelljének több DAG is perfekt térképe legyen. Erre példa a következő.

1.2.1. Példa. [] Tekintsünk egy Markov-láncot $\mathcal{X} = \{X_1, \dots, X_n\}$, amelynek eloszlása stabil. Függetlenségi modellje definíció szerint tartalmazza a következőket $i=1, \dots, n$: $(X_i \perp\!\!\!\perp \{X_1, \dots, X_{i-2}\} | X_{i-1})$, és az implikált $(X_i \perp\!\!\!\perp \{X_1, \dots, X_{i-2}, X_{i+2}, \dots, X_n\} | \{X_{i-1}, X_{i+1}\})$. Ez a függetlenségi modell n darab azonos lineáris vázú Bayes-hálóval is egzakt módon reprezentálható (azok perfekt térképei), amelyekben nincs összetartó élpár. (Két speciális eset az „előrefele” és a „visszafele” irányított hálózat, lásd 1.2 ábra.)



1.2. ábra. Azon három X_1, X_3 változós Bayes-hálók ekvivalencia-osztályai, amelyekben direkt függés van X_1, X_2 és X_2, X_3 között, de nincs X_1, X_3 között.

A DAG-okból d-szeparációval indukált függetlenségi modellek lehetővé teszik egy DAG-ok feletti ekvivalencia-reláció bevezetését [22, 31, 21].

1.2.1. Definíció. []Két DAG G_1, G_2 megfigyelési ekvivalens, ha pontosan ugyanazokat a d-szeparációs relációkat definiálják, azaz $((X \perp\!\!\!\perp Y | Z)_{G_1}) \Leftrightarrow (X \perp\!\!\!\perp Y | Z)_{G_2}$.

Az így definiált ekvivalencia-osztályok igen eltérő számú DAG-ot tartalmaznak. A függések teljes hiányához tartozó ekvivalencia-osztály $n!$ számú DAG-ot tartalmaz, amelyek mindegyike egy változósorrend mentén tartalmaz minden élt. Ezzel szemben az teljes függetlenséghez tartozó ekvivalencia-osztály 1 darab DAG-ot tartalmaz, az üres gráfot. Experimentális vizsgálatok azt jelzik, hogy egy ekvivalencia-osztályba átlagosan 3 DAG tartozik [18]. A nagyságrendek érzékeltetése végett jelezzük, hogy a DAG-ok számosságára csak rekurzív képlet létezik [6]:

$$f(n) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+1} 2^{i(n-1)} f(n-i) \text{ with } f(0) = 1, \quad (1.5)$$

amelyre felső korlátot jelent n csomópontnál $2^{n(n-1)}$ élkombináció (a DAG-ság kényszere miatt ez kisebb). Ez azonban még akkor is szuper-exponenciális, ha a maximális szülőszámot k -ban maximáljuk. (Vegyük észre, hogy a lehetséges szülői halmazok száma egy adott változó-sorrend esetén is nagyságrendileg n^{kn} , azaz $2^{\mathcal{O}(kn \log n)}$ [11].) A sorrendek, a DAG-ok, és egy adott sorrenddel kompatibilis, szülőszámában korlátos DAG-ok számát az 1.1 táblázat mutatja.

1.1. táblázat. A sorrendek, a DAG-ok, és egy adott sorrenddel kompatibilis, szülőszámában korlátos DAG-ok száma. Az oszlopok sorban a következőket tartalmazzák: a változók számát (n), DAG-ok számát ($|DAG(n)|$), egy sorrenddel kompatibilis DAG-ok számát ($|G_{\prec}|$), egy sorrenddel kompatibilis DAG-ok számát maximálisan 4 szülőszámmal ($|G_{\prec}^{|\pi| \leq 4}|$), illetve 2-vel ($|G_{\prec}^{|\pi| \leq 2}|$), a sorrendek (permutációk) számát ($|\prec|$) a szülői halmazok összességét sorrend kompatibilis DAG-okban $|\pi^{\prec}|$ és DAG-okban ha a maximális szülőszám 4 ($||\pi^{\prec}| \leq 4|$), illetve 2 ($||\pi^{\prec}| \leq 2|$).

| n | $ DAG(n) $ | $ G_{\prec} $ | $ G_{\prec}^{ \pi \leq 4} $ | $ G_{\prec}^{ \pi \leq 2} $ | $ \prec $ | $ \pi^{\prec} $ | $ \pi^{\prec} \leq 4 $ | $ \pi^{\prec} \leq 2 $ |
|-----|------------|---------------|------------------------------|------------------------------|-----------|-----------------|--------------------------|--------------------------|
| 5 | 2.9e+004 | 1e+003 | 1e+003 | 6.2e+002 | 1.2e+002 | 30 | 30 | 24 |
| 6 | 3.8e+006 | 3.3e+004 | 3.2e+004 | 9.9e+003 | 7.2e+002 | 62 | 61 | 40 |
| 7 | 1.1e+009 | 2.1e+006 | 1.8e+006 | 2.2e+005 | 5e+003 | 1.3e+002 | 1.2e+002 | 62 |
| 8 | 7.8e+011 | 2.7e+008 | 1.8e+008 | 6.3e+006 | 4e+004 | 2.5e+002 | 2.2e+002 | 91 |
| 9 | 1.2e+015 | 6.9e+010 | 2.9e+010 | 2.3e+008 | 3.6e+005 | 5.1e+002 | 3.8e+002 | 1.3e+002 |
| 10 | 4.2e+018 | 3.5e+013 | 7.5e+012 | 1.1e+010 | 3.6e+006 | 1e+003 | 6.4e+002 | 1.7e+002 |
| 15 | 2.4e+041 | 4.1e+031 | 2.1e+027 | 3.1e+019 | 1.3e+012 | 3.3e+004 | 4.9e+003 | 5.7e+002 |
| 35 | 2.1e+213 | 1.3e+179 | 1.8e+109 | 8.5e+068 | 1e+040 | 3.4e+010 | 3.8e+005 | 7.2e+003 |

Az azonos ekvivalencia-osztályba tartozó DAG-ok tulajdonságainak megértése több szempontból is fontos. Egyrészt szükséges tisztázni a DAG-ok szándékolt, intuitív oksági szemantikájának fenntarthatóságát, nevezetesen azt, hogy milyen korlátok között maradhatna érvényes ez az oksági értelmezés (mint a Markov-láncok 1.2.1 példája mutatja bizonyos esetekben az éleknek semmilyen irányítást nem tulajdoníthatunk). Másrészt azonos megfigyelési ekvivalencia-osztályba tartozó DAG-ok Bayes-hálóit azonos módon kellene felparaméterezni, ami akauzális megközelítésben is fontos következményekhez fog vezetni.

Az azonos ekvivalencia-osztályba tartozó DAG-ok jellemzése két észrevételen nyugszik. Az első, hogy az azonos megfigyelési ekvivalencia-osztályba tartozó DAG-ok irányítatlan váza azonos, mivel a DAG-ban egy él egy közvetlen függést reprezentál, amelynek minden Markov kompatibilis DAG-ban meg kell jelennie [22]. A második észrevétel, hogy ha X, Y és Y, Z közötti közvetlen függések léteznek, úgy, hogy nincs közvetlen függés X, Z között és nincs olyan függetlenség, hogy $(X \perp\!\!\!\perp Z | \{Y, S\})$, azt mindenképpen egy összetartó élpárral kell jelezni $X \rightarrow Y \leftarrow Z$, egy úgynevezett *v-struktúrát* létrehozva.

Az azonos ekvivalencia-osztályba tartozó DAG-ok jellemzését a következő tétel biztosítja.

1.2.1. Tétel. [[22, 5]] Két DAG G_1, G_2 pontosan akkor *megfigyelési ekvivalens*, ha az irányítatlan vázuk megegyezik és ugyanazon *v-struktúrákat* tartalmazzák (azaz konvergáló éleket, amelyek talpánál nincs él) [22]. Ha a Bayes-hálók (G_1, θ_1) és (G_2, θ_2) diszkrét változókat tartalmaznak és lokális modelljeik multinomiális eloszlások, akkor G_1, G_2 megfigyelési ekvivalenciája egyenlő dimenzionalitást és bijektív leképezhetőséget jelent a θ_1 és θ_2 paraméterezések között, amit *eloszlásbeli ekvivalenciának* neveznek [5]).

Mint látható, ha elfogadjuk az Ockham-elv által diktált modellminimalitás elvét, és egy eloszlásmodellezésnél (az egyszerűség kedvéért stabil eloszlást feltételezve) a függetlenségi modelljét minimális módon reprezentáló DAG-okat tekintjük, akkor bizonyos élek irányítása önkényes, így oksági értelmezése, a priori információk hiányában értelmetlen. Azonban az 1.2.1 tételben szereplő *v-struktúráknál* több élre jelenthet megkötést a megfigyelési osztályba tartozás, hiszen bizonyos élek irányítása azért lehet egyértelmű, mert amúgy *v-struktúrát* hoznának létre (ami kivezetne az ekvivalencia-osztályból). Ez a következő definícióhoz vezet el.

1.2.2. Definíció. [Az *esszenciális gráf* a megfigyelési ekvivalens DAG-ok halmazát reprezentálja egy részlegesen irányított DAG-gal (PDAG), amely gráfban csak azok az úgynevezett kényszerített élek irányítottak, amelyek az ekvivalenciaosztálybeli DAG-okban azonosan irányítottak. A többi él irányítatlansága az (élszintű) eldönthetetlenséget jelzi.

Az esszenciális gráf meghatározására hatékony algoritmust közölt Meek [21].

1.3. Oksági Bayes-hálók

A klasszikus kérdés, hogy hogyan lehet megkülönböztetni az oksági kapcsolatokat a függésektől („korreláció versus kauzalitás”), azaz, hogy hogyan lehetne meghatározni az oksági státuszát passzívan megfigyelt X és Y közötti statisztikai függésnek, az felbontható a valószínűségi Bayes-hálós reprezentációkhoz tartozó fogalmakkal, mint stabilitás és az esszenciális gráf. Elsőként megfontolandó, hogy vajon az összes közvetlen függés oksági-e. Ez erősen vitatható feltevés volna, amelyre hosszabban kitérünk. Másodsorban a stabilitás feltevése is megfontolható, hiszen annak hiányában (a Bayes-hálós reprezentáció definíciója szerint) nem fennálló függéseket is implikálni fog a struktúra. Harmadsorban, meg lehet fontolni, hogy az esszenciális gráf és a kényszerített élek definiálásánál használt „Boolean”

Ockham elv (amely szerint csak a minimális, konzisztens modelleket vettük figyelembe) a bayesi kontextusban nem terjeszthető-e ki?

Ezen kérdések megfontolásához vezessük be az oksági modell fogalmát, amely a korábbi, Bayes-hálókra alapuló intuíciót formalizálja.

1.3.1. Definíció. [] Egy DAG-ot a *oksági struktúrának* nevezünk változók V halmaza felett, ha minden csomópont egy változót reprezentál, az élek pedig közvetlen ráhatást szimbolizálnak. Egy *oksági modell* olyan oksági struktúra *lokális valószínűségi modellekkel* $p(X_i | \text{pa}(X_i))$ minden egyes csomóponthoz, amely leírja az adott X_i csomópont sztochasztikus függését a $\text{pa}(X_i)$ szüleitől. Mivel a feltételes modellek gyakran parametrikus modellecsaládból származnak, az X_i -hez tartozó feltételes modell paramétereit $\underline{\theta}_i$ jelöli, és $\underline{\theta}$ jelöli a teljes modell paraméterezését.

A stabilitás feltevésével az esszenciális gráf egzakt módon reprezentálja a függetlenségi relációkat, és a Boolean Ockham elv szerinti modellminimalitásnak megfelelően maximális mértékben jelzi a potenciális oksági relációkat, így elfogadásával az oksági relációk rendszer-alapú kikövetkeztetésére láthatnánk példát. A feltevések jogosságának vizsgálatához vezessük be az alábbi formális feltételt, amely egy oksági struktúra validitását és elégségességét biztosítja.

1.3.2. Definíció. [] Egy G oksági struktúra és p eloszlás teljesíti az *oksági Markov-feltételt* (CMA, ha p -ben teljesül a G szerinti lokális Markov-feltétel).

Az oksági Markov-feltétel Reichenbach „közös ok elv”-én alapul, amely szerint X és Y események közötti függés azért áll fenn, mert vagy X okozza Y -t, vagy Y okozza X -t, vagy közös ok befolyásolja X -t és Y -t is [23, 14]. Ennek megfelelően az oksági Markov-feltétel akkor áll fenn (p, G) párra, ha a V változóhalmaz *okságilag elégséges*, azaz nincs rejtett, nem V -beli, közös ok (vagy másképpen fogalmazva: minden közös ok $X, Y \in V$ párokra V -beli). Ez természetesen nem azt jelenti, hogy nem lehetnek rejtett változók, hiszen ez egy adott absztrakciós szinten elkerülhetetlen, de csak azon változóknak szükséges V -ben szerepelni, amelyek két vagy több változót is közvetlenül befolyásolnak.

Az oksági Markov-feltétel összekapcsolja az oksági relációkat és a függéseket, és az oksági modell (modellezés) elégségességét követeli meg a megfigyelt függésekhez (mondhatni úgy is, hogy az élek elégségesek). Érdeemes észrevenni, hogy a stabilitás feltevése éppen az élek szükségességét jelenti (mondhatni úgy is, hogy nincsen felesleges él). Ez a két feltevés biztosíthatja, hogy a Bayes-háló által implikált függetlenségek valóban fennállnak és a függések is egzakt módon reprezentáltak az oksági modellben [12]. Az oksági Markov-feltétel lehetővé teszi továbbá a beavatozások modellezését *do()* művelet (1.1.1) bevezetésével a „manipulációs tétel” ([28]) avagy „gráf csonkolás” ([23]) szerint.

1.3.3. Definíció. [] Egy $G, \underline{\theta}$ oksági modell esetén $p(Y|z, \text{do}(X = x))$ jelölje azt az eloszlást, amelyet úgy kapunk, hogy a (perfekt) beavatozáshoz tartozó X változók bemenő éleit töröljük és ezeket a változókat az előírt értékre beállítjuk (azaz a következtetés során a beállított változókhoz tartozó faktorok nem szerepelnek).

A beavatkozások formális modellje jelzi, hogy egy oksági modell, amely teljesíti az oksági Markov-feltételt, minden lehetséges (perfekt) beavatkozáshoz tartozó eloszlást a fenti gráf csomólásos szemantikával képes reprezentálni [23]. Az oksági modellek és a beavatkozások kapcsolata tovább is vihető, ami elvezet az autonóm, lokális „mechanizmusok” rendszeréhez, amelyek beavatkozásokra függetlenül reagálnak, és zajjal való terheltségük is független. A „*funkcionális Bayes-háló*” ezen zajjal terhelt determinisztikus mechanizmusokon alapulnak, kapcsolódva a strukturális egyenletek formalizmusához is [9, 23]. A funkcionális Bayes-háló a beavatkozásokon kívüli kontrafaktuális következtetésekben is felhasználhatóak, ami egy elképzelt múltbeli beavatkozás jelen következményeinek következtetését jelenti.

1.4. Az oksági értelmezés nehézségei

Az oksági értelmezés kritikája előtt érdemes összefoglalni a valószínűségi modellezés számára is kihívást jelentő lehetőségeket.

1.4.1. Tisztán magasabbrendű függések

Tegyük fel, hogy X, Y, Z bináris változók, X, Y függetlenek, egyenletes eloszlásúak, Z pedig a $Z = XOR(X, Y)$ logikai függvényvel meghatározott. Ekkor $(X \perp\!\!\!\perp Z)$ és $(Y \perp\!\!\!\perp Z)$, de $(\{X, Y\} \not\perp\!\!\!\perp Z)$, azaz az együttesüktől már függ. A függések (asszociációk) tehát nem feltétlenül monotonak.

Függések iránya

Egy Markov-lánc $\mathcal{X} = \{X_0, X_1, \dots, X_n\}$, amely a $p(X_i|X_{i-1})$ átmeneti valószínűségekkel adott, átírható $p(X_{i-1}|X_i)$ alakba is, azaz a lánc irányítása esetleges.

1.4.2. Intranszitiv függések

Tegyük fel, hogy X, Y, Z közül legalább egy nem bináris változó, például Y . Ekkor létezik egy olyan $p(X, Y, Z)$ eloszlás, amelyre $(X \not\perp\!\!\!\perp Y)$ és $(Y \not\perp\!\!\!\perp Z)$, de $(X \perp\!\!\!\perp Z)$, azaz a függések (asszociációk) nem feltétlenül tranzitívak. Azonban ha feltesszük, hogy az eloszlásunk függetlenségi viszonyai stabilak, azaz a kvalitatív függési viszonyok nem változnak infinitizimális perturbációkra, akkor az intranszitiv hármas függési modellt egyedül az úgynevezett v-struktúra magyarázhatja $(X \rightarrow Y \leftarrow Z)$, amelyben $(X \not\perp\!\!\!\perp Z|Y)$ (és nem $(X \perp\!\!\!\perp Z|Y)$). Azaz ekkor kivételesen adódik, hogy Y a következménye két őt befolyásoló független eseménynek, amelyek tapasztalataink szerint mindig korábbiak (innen ered a filozófiában „idő nyila” elnevezés).

1.4.3. Simpson paradoxona

Lehetséges olyan eloszlás, amelyben $p(Y|X) > p(Y|\bar{X})$, de $p(Y|X, Z) < p(Y|\bar{X}, Z)$ és $p(Y|X, \bar{Z}) < p(Y|\bar{X}, \bar{Z})$, azaz az asszociáció hatása rétegenként (Z szerint) és összesítve ellenkező is lehet.

1.4.4. Ellenérvek

Az oksági értelmezéssel szemben felhozott ellenérvek egy része a fenti, a valószínűségi modellezést is érintő kérdésekhez kapcsolódik, más része a magának a Bayes-hálós megközelítésnek a problémájára világít rá (például az okság fogalma visszacsatolt vagy emergens rendszerekben). Mivel ezek tárgyalása meghaladja a jegyzet kereteit, csupán felsorolásban jelezzük őket [14, 28].

1. A direkt függések nem mindegyike oksági (hanem például szemantikai).
2. Adott eloszlás esetén a hozzátartozó megfigyelési ekvivalencia-osztály egyértelműségéhez fel kell tételnie a stabilitást (ami logikai függéseknél nem teljesül, ahogyan azt a XOR-t tartalmazó példa mutatta).
3. Az esszenciális gráf definíciója csak a minimális, konzisztens modellekre támaszkodik (egyáltalán nem véve figyelembe a kissé komplexebb konzisztens modellek irányítást).
4. Rejtett zavaró tényezők, stabilitás, modell minimalitás.
5. Kiválasztási bias, amikor is a megfigyelés akár független események kombinációjától függ, így okozva az adatokban akauzális függést.
6. Oksági modellek keveréke, azaz ha X befolyásolja Y -t és fordítva. Hasonló probléma a visszacsatolás.
7. Globális fizikai és szemantikai kényszerek a változók között.
8. Az asszociációk, a függetlenségek, a függések és így az induktívan kikövetkeztetett oksági viszonyok viszonylagosak az elemzett változók halmazához képest, sőt még az értéktartományukhoz (diszkrétizálásukhoz) képest is.

Mindazonáltal kijelenthető, hogy a többváltozós elemzések miatt és a Bayes-statisztikai megközelítés miatt az oksági következtetést ma már széles körben alkalmazzák, meghaladva a korábbi két-változós „correlation (association) \neq causation” zsákutcs igaz/hamis szemléletet.

1.5. Bayes-hálók a Bayes-statisztikai keretben

A nagy dimenziós, viszonylagosan kis mintás orvosbiológiai alkalmazások az egyik fő terpe a Bayes-hálók Bayes-statisztikai keretrendszerben való alkalmazásának. Természetesen a modellosztály választása a statisztikai kerettől független dimenzió, de az oksági modellek feletti átlagolás igénye a többi modellosztály használatával egyidőben felvetődött [8]. Ez megjelent a valódi ok kényszerített éleken alapuló bayesi megközelítésében (lásd például [17, 10]) vagy a hatáserősség struktúrák feletti átlagolást is magába foglaló becslésésében [23]), illetve az optimális intervención alapuló adatgyűjtésben [34].

Azonban a Bayes-statisztikai megközelítés alkalmazása Bayes-hálókra rengeteg megoldatlan kérdést vet fel a modellhez kapcsolódó a priori ismeretek sokfélesége miatt. Ez természetesen a modell értelmezésének sokféleségével is összefügg, azonban ezek egységes kvantitatív formába történő transzformálása, azaz az őket tükröző informatív a priori eloszlások konstruálása jelenleg is aktív kutatás alatt áll, részben a „transfer” learning részeként is. Logikai kényszerek felhasználása [29, 6, 19, 4], kvalitatív monotonitási relációk felhasználása [30, 15] sok egyéb mellett már megjelent tudományos közleményekben mint prior eloszlások információforrása [26, 1, 6, 16, 2].

A Bayes-statisztikai megközelítésben a prior eloszlás $p(G, \theta)$ a DAG-struktúrák és hozzájuk tartozó paraméterek felett definiált. A Bayes-háló reprezentáció univerzalitása miatt ez természetesen az eredeti tárgyterület feletti Bayes-háló kiterjesztésében is reprezentálható. Azonban ennek az együttes a priori eloszlásnak a specifikálása vagy akár csak a paraméterekre vonatkozó $p(\theta|G)$ feltételes eloszlásnak a specifikálása, mind elméleti, mind gyakorlati megfontolásokat igényel, egyrészt a modellter komplex és nagydimenziós volta, másrészt a struktúra- és paraméterekvivalenciák miatt. Elsőként a paraméterpriorokat tárgyaljuk, majd ezt követően a struktúrák feletti priorok kérdését.

1.5.1. Paraméter priorok Bayes-hálókhöz

A $p(\theta|G)$ paraméter prior specifikálása a következő kérdéseket veti fel: milyen eloszláscsaládot használjunk, mi a kapcsolata a prior dekomponálásának és a tárgyterületi eloszlás dekomponálásának, hogyan lehet konzisztens módon bizonyosságot definiálni a dekomponált prior felett az egész struktúrát tekintve, hogyan lehet konzisztens priort definiálni a megfigyelési ekvivalens struktúrák tekintetében. Ezeket a kérdéseket egy lentebb, több lépésben kifejtett, átfogó eredmény válaszolta meg, amely nem csak az oksági modellek Bayes-statisztikai felhasználásához, hanem a Bayes-hálók valószínűségi, akauzális felhasználásához is szükséges. Első része kimondja, hogy ha a paraméterprior a struktúra szerint dekomponálódik és a paraméterpriorok ekvivalensek megfigyelési ekvivalens struktúrák esetében, akkor a paraméterprior szükségszerűen Dirichlet eloszlású. Továbbá ha a dekomponált paraméterprior részei a struktúrára nézve invariánsak, akkor a $p(\theta|G)$ paraméterprior tetszőleges G struktúra esetén egyetlen pont-értékű θ_0 paraméterezésből és egyetlen a priori mintaszámként értelmezhető skalárból származtatható. Ennek a formális kimondásához és megértéséhez a következő fogalmakra van szükség. Elsőként a paraméter függetlenségre [27, 7]:

1.5.1. Definíció. [[Egy G Bayes-háló struktúra esetén, a *globális paraméter függetlenség* feltevése azt jelenti, hogy

$$p(\underline{\theta}|G) = \prod_{i=1}^n p(\underline{\theta}_i|G), \quad (1.6)$$

ahol $\underline{\theta}_i$ jelöli a paramétereket, amelyek $p(X_i|\text{Pa}(X_i))$ feltételes eloszláshoz tartoznak G -ben. A *lokális paraméter függetlenség* feltevése azt jelenti, hogy

$$p(\underline{\theta}_i|G) = \prod_{j=1}^{q_i} p(\underline{\theta}_{ij}|G), \quad (1.7)$$

ahol q_i a szülői konfigurációk számát jelenti ($\text{pa}(X_i)$) X_i -hez tartozik G -ben és $\underline{\theta}_{ij}$ a paramétereket jelöli a $p(X_i|\text{pa}(X_i)_j)$ feltételes eloszlásban valamely fix sorrendjében a $\text{pa}(X_i)$ konfigurációknak. A *paraméter függetlenség* feltevése mind a globális, mind a lokális függetlenség feltevését jelenti.

A likelihood ekvivalencia fogalma a megfigyelési ekvivalenciát terjeszti ki a struktúrákról a paraméterekre ([16, 13]).

1.5.2. Definíció. [[A *likelihood ekvivalencia* feltevés azt jelenti, hogy két megfigyelési ekvivalens Bayes-háló struktúra G_1, G_2 ,

$$p(\underline{\theta}_V|G_1) = p(\underline{\theta}_V|G_2), \quad (1.8)$$

ahol $\underline{\theta}_V$ a multinomiális paramétereknek egy nem redundáns halmazát jelenti a teljes V együttes eloszlásra nézve. (A lokális modellek multinomiális volta biztosítja az eloszlás ekvivalenciát és, azt, hogy Jacobi-paramétertranszformáció létezik.)

Ezek után a következő tétel mondható ki [13, 16].

1.5.1. Tétel. [[13, 16]] Pozitív sűrűségfüggvények, likelihood ekvivalencia és paraméter függetlenség feltevése G_c teljes struktúrákra azt implikálja, hogy $p(\underline{\theta}_V)$ szükségszerűen Dirichlet eloszlású N_{x_1, \dots, x_n} hiperparaméterekkel.

A $p(\underline{\theta}_i|G_i) = J_{G_i} p(\underline{\theta}_V)$, ahol J_{G_i} a Jacobi transzformáció $\underline{\theta}_V$ -ről $\underline{\theta}_{G_i}$ -re. Figyelemre méltó, hogy egy struktúrák szintjén megfogalmazott kényszer, a struktúrák likelihood ekvivalenciája multinomiális lokális modellekkel, ilyen erős paraméterszintű kényszert eredményez. A következő eredmény kimondásához írjuk át a hiperparamétereket, mint $N' = \sum_{x_1, \dots, x_n} N_{x_1, \dots, x_n}$, amit *prior vagy virtuális mintaméretnek* hívnak és $p(x_1, \dots, x_n|\xi^+) = N_{x_1, \dots, x_n}/N'$. Továbbá, szükséges még a következő fogalom:

1.5.3. Definíció. [[A *paraméter modularitás* feltevése azt jelenti, hogy ha $\text{pa}(X_i)$ azonosak két Bayes-háló struktúrában G_1, G_2 , akkor

$$p(\underline{\theta}_{ij}|G_1) = p(\underline{\theta}_{ij}|G_2), \quad (1.9)$$

ahol $\underline{\theta}_{ij}$ jelöli a paramétereket a kapcsolódó $p(X_i|\text{pa}(X_i)_j)$ feltételes eloszlásban a $\text{pa}(X_i)$ konfigurációk valamely fix sorrendje esetében.

Az oksági értelmezéshez közel álló paraméter modularitás feltevése lehetővé teszi paraméterprior származtatását a teljes modellekről nem teljes modellekre is .

1.5.2. Tétel. [[13, 16]] Ha N' a globális prior mintaméret, $p(\underline{\theta}_V)$ egy Dirichlet eloszlás $N_{x_1, \dots, x_n} = N'p(x_1, \dots, x_n)$ hiperparaméterekkel, továbbá feltesszük a paraméter modularitást, és minden G_c teljes DAG-ra, $p(G_c) > 0$, akkor bármely G struktúrára teljesül a paraméter függetlenség és likelihood ekvivalencia és a paraméterek dekomponált eloszlása Dirichlet eloszlásoknak a következő szorzata:

$$p(\underline{\theta}|G, \xi^+) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^{q_i} \prod_{k=1}^{r_i} \theta_{ijk}^{N'p(X_i=k, \text{pa}(X_i, G|\xi^+)=\text{pa}_{ij})-1}, \quad (1.10)$$

ahol r_i az X_i változó értékeinek száma, q_i a $\text{pa}(X_i, G)$ szülői halmaz lehetséges értékkonfigurációinak száma, és pa_{ij} jelöli a szülők értékeit a j -edik szülői konfigurációban, valamely fix sorrendjében a szülői konfigurációknak.

Az 1.5.2 tétel praktikus módszert kínál likelihood ekvivalens paraméterpriorok megadására minden struktúrára: egy maximálisan részletes modell esetében határozzuk meg a pontparametrizációt és az a priori mintaszámot, majd bármely más modell esetén marginálizáljuk az eloszlást, és számítsuk ki az ott releváns hiperparamétereket. Azonban az 1.5.2 tétel azt is jelzi, hogy nem teljes megfigyelések esetében a struktúra különböző részein eltérő bizonyosság fog jelentkezni, így nem lehetséges egyetlen mintaszámmal jellemezni azt [14].

1.5.2. Struktúra priorok Bayes-hálókhoz

A bayesi megközelítés Bayes-hálós modellek paramétereikhez az 1980-as évektől jelen van a szakirodalomban [25, 26, 7], és ez a kutatási irány részben megválaszolta a komplex valószínűségi modellek paraméterezésével kapcsolatos ellenvetéseket [3]. A struktúrák feletti bayesi megközelítés az 1990-es évek elején jelent meg, de a nagy számításigény sokáig gátolta az alkalmazását. Egy sorrendspecifikus, analitikus megközelítés [1], majd egy általános analitikai eredmény [6], ezt követően pedig 1995-ben, az MCMC-módszerek alkalmazása is megjelent [20]. 2000. óta a modellek feletti bizonytalanság kezelésére elterjedtté vált a struktúrák feletti bayesi megközelítés alkalmazása, azonban struktúrális háttérinformációk felhasználása a mai napig nem megoldott. Vegyük észre, hogy a $p(G)$ struktúra priorok kiegészítik a korábbiakban tárgyalt $p(\underline{\theta}|G)$ paraméterpriorok tárgyalását.

Referencia struktúrák és alstruktúrák felhasználása Az egyik alapvető módszer, az *eltérés alapú* priorok egy referencia struktúrától való eltérést büntetnek, felhasználva egy „referencia” struktúrát G_0 és egy κ büntető faktort a hiányzó vagy extra e_{ij} élek büntetésére [16]:

$$p(G) \propto \kappa^\delta, \text{ ahol } \delta = \sum_{1 \leq i < j \leq n} 1(1(e_{ij} \in G) \neq 1(e_{ij} \in G_0)).$$

A *jegy alapú priorok* az egyes jegyek jelenléte szerint definiáltak, ahol az F_i jegy (modelltulajdonság) G -beli értékeit $F_i(G) = f_i$ jelöli, $i = 1, \dots, K$ esetén,

$$p(G) = c \prod_{i=1}^K p(F_i(G)), \quad (1.11)$$

ahol a c normalizációs konstans az inkonzisztens jegykombinációk kezelésére szolgál. Lehetséges jegyek az irányítatlan vagy irányított vagy kényszerített élek, páronkénti vagy részleges sorrend szerinti sorrendezések fennállása, Markov-határbeliség vagy akár tetszőleges algráf megléte. Érdekes ügyelni a jegyek összefüggő voltára, ami a globális DAG-kényszer miatt lép fel, és torzítja az egyenletben szándékolt független hatást.

1.6. Megfigyelés, beavatkozás, spekuláció

A valószínűségi, oksági, és funkcionális Bayes-hálók a következtetés különböző szintjeit képesek támogatni, amit csupán felsorolásszerűen összegzünk (kifejtését lásd [23]):

1. Jelölje $p(Y = y|X = x)$ a (megszokott megfigyelési) feltételes valószínűségét $Y = y$ értéknek $X = x$ érték megfigyelése esetén.
2. Jelölje $do(x)$ az X változó x értékre történő beállításához tartozó beavatkozást és $p(Y|do(x))$ az ehhez tartozó beavatkozási eloszlást.
3. Jelölje $p(Y = y|do(X = x), Y = y', X = x')$ a kontrafaktuális valószínűségét annak, hogy $Y = y$, amikor $X = x', Y = y'$ és $do(X = x)$.

1.7. Tudásmérnökség

A Bayes-statisztikai keretben definiált Bayes-háló a tudásmérnökség eszközeként jelent meg a 1980-as években. Konstruálása jellemzően a szakértőktől származó adatokból történt manuálisan. A kézi konstruálás még napjainkban is jelentős súlyt képvisel a Bayes-hálók alkalmazásában. Azonban ahol az adathoz viszonyítva jelentős mennyiségű a priori tudás áll rendelkezésre, ott a Bayes-hálók tudásmérnöki alkalmazása prior konstruálás formájában is előfordul, a bayesi keretrendszer alkalmazásának egy kezdeti fázisaként. A tudásmérnökség metodikájára nagy hatással volt a nagy mennyiségű elektronikus tárgyterületi információ megjelenése, a megfelelő mennyiségű statisztikai adat elérhetősége, valamint a Bayes-statisztikai alapú gépi tanulási módszerek elterjedése. A modell konstruálása helyett érdemes a gyakorlatban tipikusan megjelenő egész tudásbázist tekintetbe venni, és annak konstruálására fókuszálni. Követelményként jelent meg a bayesi módszerek alkalmazásakor, hogy támogassa a priorok konstruálását, hiszen a valószínűségekkel leírt a priori tudás és a rendelkezésre álló adatok bayesi frissítéssel történő kombinációja szolgáltatja a végső tudásmodellt. Mindemellett fontos, hogy a tudásbázis segítse a komplex, akár szabad szöveges háttérismereteket is tartalmazó valószínűségi állítások megfogalmazását,

valamint tegye lehetővé a szakértőktől származó szubjektív információ tárolását, mely releváns lehet a bayesi a priori tudásmodell megalkotásánál. Egy tudásbázis megépítéséhez olyan környezetben, ahol rendelkezésre áll elektronikus tárgyterületi tudás, elegendő statisztikai adat, valamint a megfelelő bayesi módszerek, az alábbi lépések szükségesek (amelyekből a specifikusokat részletezzük):

1. Célok, alkalmazási terület és modellezési szintek identifikációja. Terminológia és ontológia elfogadása.
2. Nem rendszerezett tudás begyűjtése. Ehhez a lépéshez tartozik az összes releváns elektronikus és egyéb szövegalapú információforrás feldolgozása, amely magába foglalja az a priori információ kinyerését különféle szövegbányászati módszerek alkalmazásával.
3. Struktúra kinyerése. A G DAG struktúrák feletti $p(G)$ priorok konstruálása, melyek egyesítik a szakértők által megadott információkat az elektronikus forrásokból kinyert információkkal (a $p(G)$ a priori eloszlást többnyire normalizálatlan formában lehet előállítani).
4. Paraméter és hiperparaméter kinyerése. A valószínűségi paraméterek többféle módon nyerhetők: adatbázisok, szakirodalom vagy szakértők szubjektív véleménye alapján. A $p(\theta|G)$ paraméterprior specifikációja az általunk vizsgált diszkrét, véges esetben egy egyszerű módszerrel megvalósítható, ha feltehetjük az egyes változókhoz és szülői értékkonfigurációkhoz tartozó paraméterek függetlenségét. Egy szinte kizárólagosan használt eloszláscsalád az adott változó, adott szülői értékkonfigurációjához tartozó feltételes modellek megadására a Dirichlet eloszlás, amelyben a hiperparaméter a paraméterhez tartozó szülői értékkonfiguráció korábban megfigyelt eseteinek számait jelenti (Cowell1999). Ahogyan megmutattuk az 1.5.1 tételben, a Dirichlet család az egyetlen lehetséges választás, ha az ugyanazon megfigyelési ekvivalencia-osztályba tartozó G struktúrákhoz ekvivalens priorokat szeretnénk megadni, ami kauzális modellezésnél nem szükségszerű (Heckerman1995a).
5. Érzékenységi analízis, verifikáció és validáció. A modellek poszteriorjának vizsgálata magába foglalja egyrészt az a priori eloszlásokra való érzékenység vizsgálatát (ami különösen fontos a több szakértőt és tudásbázist is felölelő automatizáltan származtatott prioroknál), másrészt referencia priorokkal való összehasonlítást. A modellosztály komplexitása miatt mindkét esetben gyakran szükséges, hogy egyrészt modell jegyeket használjunk, másrészt hogy MAP-modellre alapozzuk a vizsgálatot.

Mint ahogy az látható, a tudásbázis építése a bayesi modellkiértékeléssel, modellfino-mítással, esetleg tanulással zárul. A kiértékelés tartalmazza az adat és a modell kompatibilitásának vizsgálatát és az a posteriori valószínűségek vizsgálatát, más esetekben a tudásmérnöki folyamat célja az a priori modell konstruálása a későbbi tanulási folyamat számára.

1.8. Bayes-háló kiterjesztések

A beavatkozásokkal történő következtetésekre formális lehetőséget kínálnak a döntési hálóknak, amelyekben a véletlen csomópontok mellett beavatkozás- és hasznosságcsomópontok is találhatóak. Használatukat és a valószínűségi, illetve az oksági Bayes-hálóknak egyéb kiterjesztéseit a Szekvenciális döntéstámogatás című fejezetben, illetve Bioinformatikai laboratórium jegyzet fejezeteiben tárgyaljuk.

Irodalomjegyzék

- [1] W. L. Buntine. Theory refinement of Bayesian networks. In *Proc. of the 7th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1991)*, pages 52–60. Morgan Kaufmann, 1991.
- [2] R. Castelo and A. Siebes. Priors on network structures. biasing the search for Bayesian networks. *International Journal of Approximate Reasoning*, 24(1):39–57, 2000.
- [3] P. Cheeseman. In defense of probability. In *Proceedings of the Ninth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-85)*, pages 1002–1009. Morgan Kaufmann, 1985.
- [4] J. Cheng, D. A. Bell, and W. Liu. Learning belief networks from data: an information theory based approach. In *Proc. of the 6th ACM International Conference on Information and Knowledge Management, CIKM'97*, pages 325–331, 1997.
- [5] D. M. Chickering. A transformational characterization of equivalent Bayesian network structures. In *Proc. of 11th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1995)*, pages 87–98. Morgan Kaufmann, 1995.
- [6] G. F. Cooper and E. Herskovits. A Bayesian method for the induction of probabilistic networks from data. *Machine Learning*, 9:309–347, 1992.
- [7] R. G. Cowell, A. P. Dawid, S. L. Lauritzen, and D. J. Spiegelhalter. *Probabilistic networks and expert systems*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [8] A. P. Dawid. Discussion of 'causal diagrams for empirical research' by j. pearl. *Biometrika*, 82(4):689–690, 1995.
- [9] M. J. Druzdzel and H. Simon. Causality in Bayesian belief networks. In David Heckerman and Abe Mamdani, editors, *Proceedings of the 9th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1993)*, pages 3–11. Morgan Kaufmann, 1993.
- [10] N. Friedman, M. Goldszmidt, and A. Wyner. On the application of the bootstrap for computing confidence measures on features of induced Bayesian networks. In *AI&STAT VII*, 1999.

- [11] N. Friedman and D. Koller. Being Bayesian about network structure. In *Proc. of the 16th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence(UAI-2000)*, pages 201–211. Morgan Kaufmann, 2000.
- [12] D. Galles and J. Pearl. Axioms of causal relevance. *Artificial Intelligence*, 97(1-2):9–43, 1997.
- [13] D. Geiger and D. Heckerman. A characterization of the Dirichlet distribution with application to learning Bayesian networks. In Philippe Besnard, Steve Hanks, Philippe Besnard, and Steve Hanks, editors, *Proc. of the 11th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1995)*, pages 196–207. Morgan Kaufmann, 1995.
- [14] C. Glymour and G. F. Cooper. *Computation, Causation, and Discovery*. AAAI Press, 1999.
- [15] A. J. Hartemink, D. K. Gifford, T. S. Jaakkola, and R. A. Young. Bayesian methods for elucidating genetic regulatory networks. *IEEE Intelligent Systems*, 17(2):37–43, 2002.
- [16] D. Heckerman, D. Geiger, and D. Chickering. Learning Bayesian networks: The combination of knowledge and statistical data. *Machine Learning*, 20:197–243, 1995.
- [17] D. Heckermann, C. Meek, and G. Cooper. A Bayesian approach to causal discovery. Technical Report, MSR-TR-97-05, 1997.
- [18] T. Kocka and R. Castelo. Improved learning of Bayesian networks. In Jack S. Breese and Daphne Koller, editors, *Proc. of the 17th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-2001)*, pages 269–276. Morgan Kaufmann, 2001.
- [19] W. Lam and F. Bacchus. Using causal information and local measures to learn Bayesian networks. In David Heckerman and Abe Mamdani, editors, *Proc. of the 9th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1993)*, pages 243–250. Morgan Kaufmann, 1993.
- [20] D. Madigan, S. A. Andersson, M. Perlman, and C. T. Volinsky. Bayesian model averaging and model selection for Markov equivalence classes of acyclic digraphs. *Comm.Statist. Theory Methods*, 25:2493–2520, 1996.
- [21] C. Meek. Causal inference and causal explanation with background knowledge. In *Proc. of the 11th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1995)*, pages 403–410. Morgan Kaufmann, 1995.
- [22] J. Pearl. *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems*. Morgan Kaufmann, San Francisco, CA, 1988.
- [23] J. Pearl. *Causality: Models, Reasoning, and Inference*. Cambridge University Press, 2000.

- [24] A. Rosenberg. *Philosophy of Science: A contemporary introduction*. Routledge, 2000.
- [25] D. J. Spiegelhalter. Local computations with probabilities on graphical structures and their application to expert systems. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 50(2):157–224, 1988.
- [26] D. J. Spiegelhalter, A. Dawid, S. Lauritzen, and R. Cowell. Bayesian analysis in expert systems. *Statistical Science*, 8(3):219–283, 1993.
- [27] D. J. Spiegelhalter and S. L. Lauritzen. Sequential updating of conditional probabilities on directed acyclic graphical structures. *Networks*, 20(.):579–605, 1990.
- [28] P. Spirtes, C. Glymour, and R. Scheines. *Causation, Prediction, and Search*. MIT Press, 2001.
- [29] S. Srinivas, S. Russell, and A. Agogino. Automated construction of sparse Bayesian networks for unstructured probabilistic models and domain information. In *Proc. of the 5th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-1990)*, pages 295–308. North-Holland, 1990.
- [30] A. Tanay and R. Shamir. Computational expansion of genetic networks. *Proc. of Int. Conf. on Intelligent Systems for Molecular Biology (ISMB'01)*, 17(Suppl. 1):270–278, 2001.
- [31] T. Verma and J. Pearl. *Equivalence and synthesis of causal models*, volume 6, pages 255–68. Elsevier, 1990.
- [32] J. Woodward. Scientific explanation. In E. N. Zalta, editor, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, 2003.
- [33] M. Woodward. *Epidemiology: Study design and data analysis*. Chapman&Hall, 1999.
- [34] Changwon Yoo and Gregory F. Cooper. An evaluation of a system that recommends microarray experiments to perform to discover gene-regulation pathways. *Artificial Intelligence in Medicine*, 31:169–182, 2004.