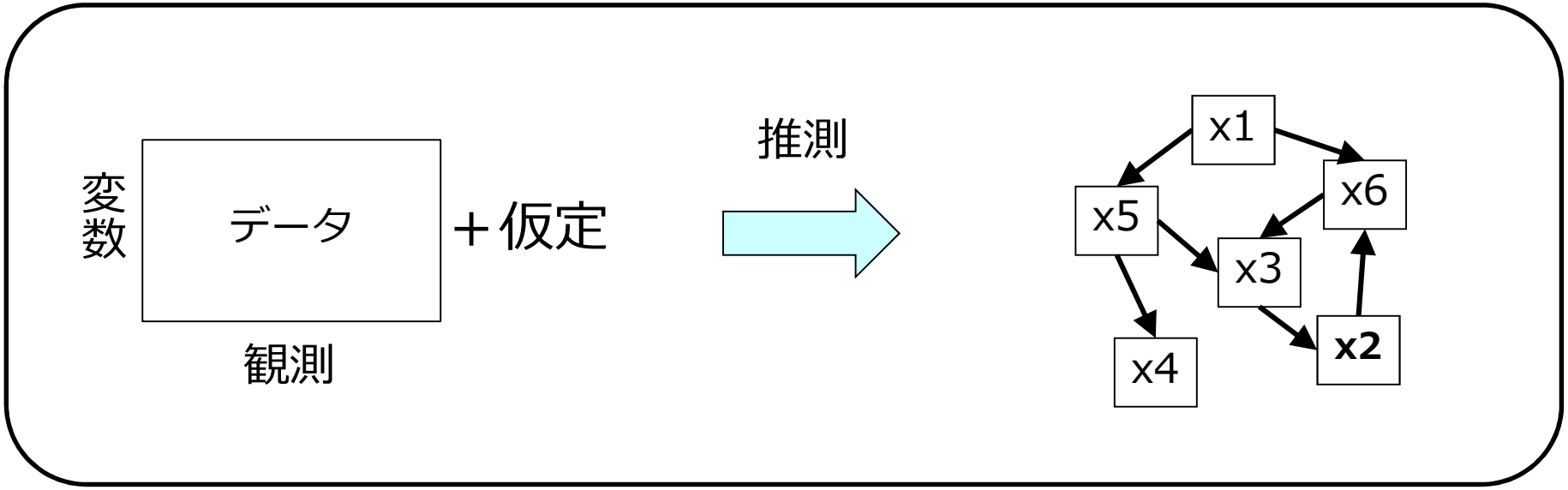
因果探索への招待

清水昌平

滋賀大学 データサイエンス学部
大阪大学 産業科学研究所
理化学研究所 革新知能統合研究センター(AIP)

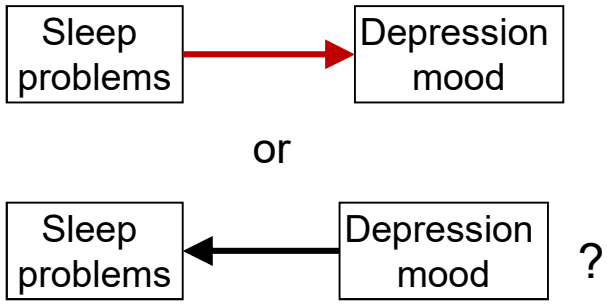
因果探索とは

- ランダム化実験する前に有望そうな仮説
- 因果グラフ(因果構造)の教師なし学習



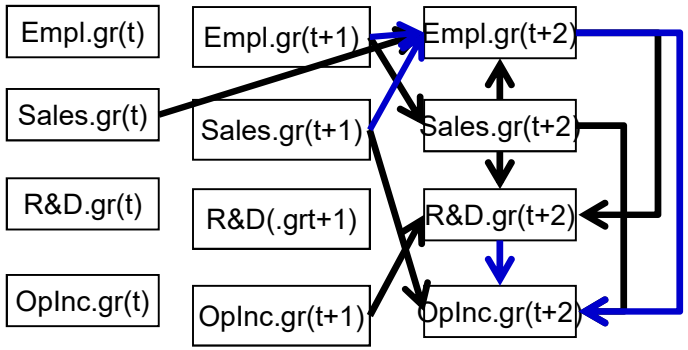
応用先

疫学



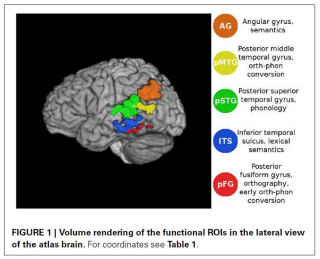
(Rosenstrom et al., 2012)

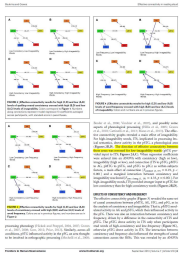
経済学



(Moneta et al., 2012)

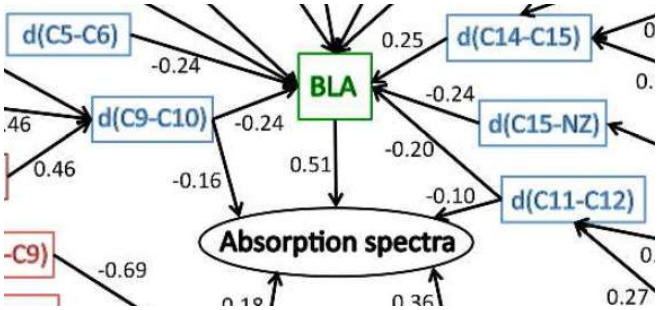
神経科学





(Boukrina & Graves, 2013)

化学



(Campomanes et al., 2014)

Network alarm analysis

- Zhang et al. 2018 Control Engineering Practice
- アラーム間の因果関係: 大元はどこか
  - High CPU occupation of POP3 process alarm
  - High CPU utilization alarm

Server Name	Summary	Time
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 100%	10:33:10
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 70.360000%, too high	10:36:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 68.480001%, too high	10:42:37
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 89%	10:46:10
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 68.250000%, too high	10:48:38
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 66.930000%, too high	10:55:37
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 92%	10:56:10
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 72.490000%, too high	11:02:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 69.360000%, too high	11:07:37
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 94%	11:11:10
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 67.510000%, too high	11:18:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 71.330000%, too high	11:22:37
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 86%	11:26:10
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 68.620000%, too high	11:27:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 66.120000%, too high	12:08:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 66.190000%, too high	14:34:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 75.990000%, too high	15:18:37
Domino Server 2	The cpu utilization ratio is excessively high, ID=-1, 99%	15:21:20
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 71.160000%, too high	15:24:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 75.310000%, too high	15:34:37
Domino Server 2	Process /opt/lotus656/lotus/notes/65060/sunspa/pop3 CPU occupation 70.500000%, too high	15:38:38

疑似相関？

「相関の大きさ」と「因果の大きさ」
が対応しない

相関があるからと言って因果関係があるとは限らない

Messerli, (2012), New England Journal of Medicine

ノーベル賞受賞者の数

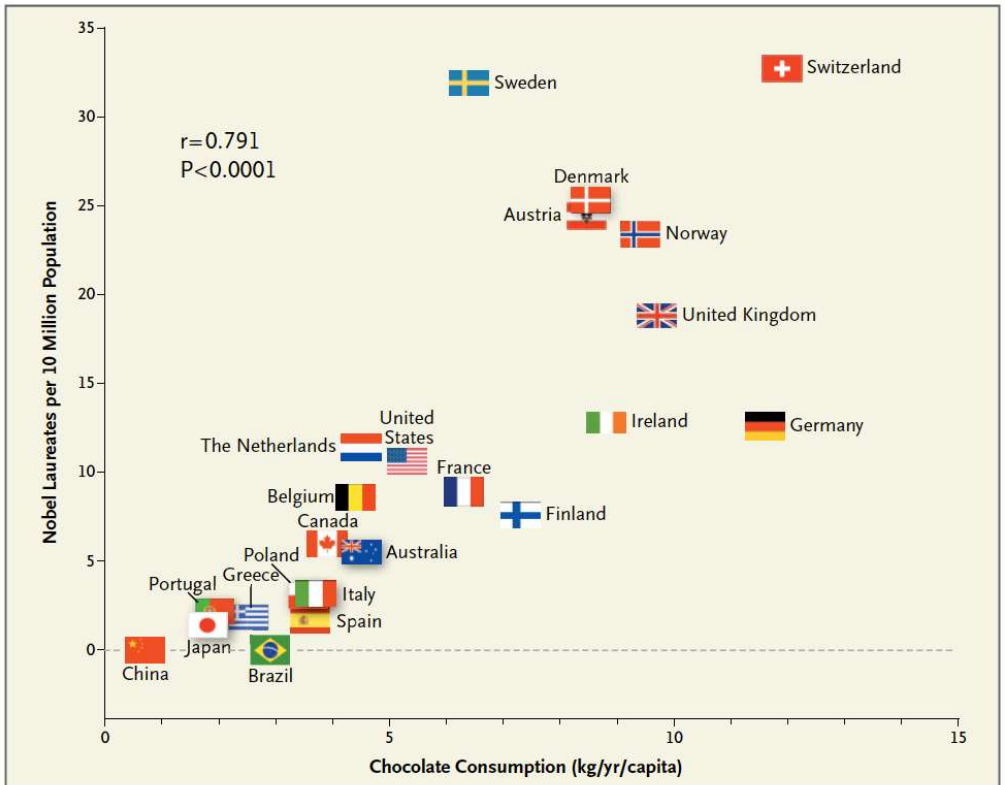
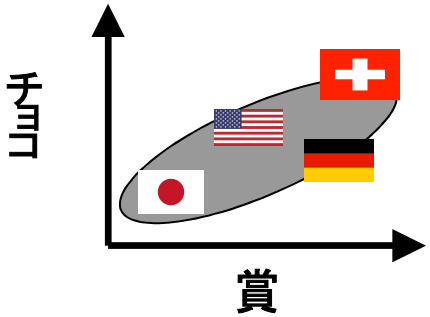


Figure 1. Correlation between Countries' Annual Per Capita Chocolate Consumption and the Number of Nobel Laureates per 10 Million Population.

チョコレート消費量

相関係数: 0.79
P値 < 0.0001

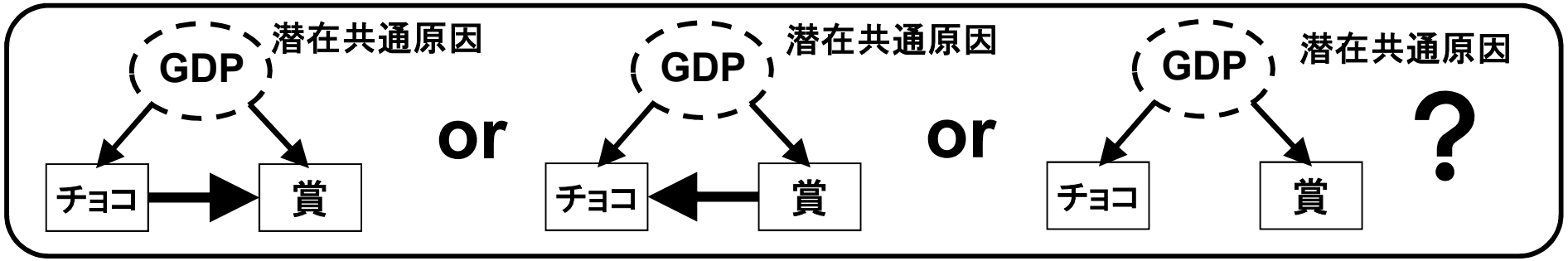
相関関係と因果関係のギャップ



相関係数 0.79
P値 < 0.0001

ギャップ

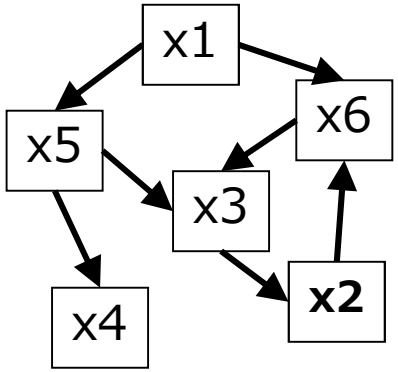
複数の*因果関係*が
同じ*相関関係*を与える

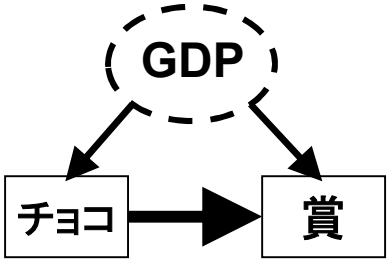


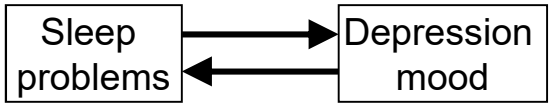
フレームワーク

因果関係をグラフで表す

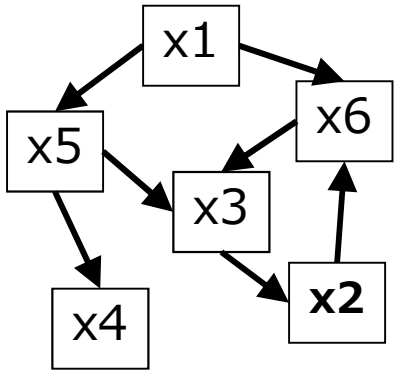
- 矢印の元が原因で先が結果







グラフに方程式を対応させる



例えば

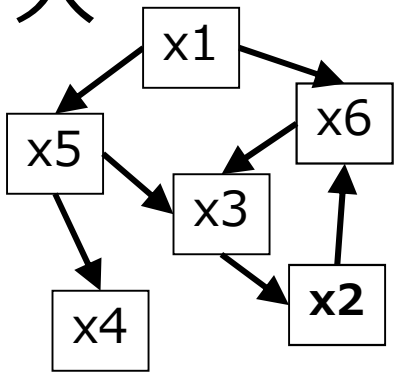
$$x_6 = f_6(x_1, e_6)$$

$$x_3 = f_3(x_5, x_6, e_3)$$

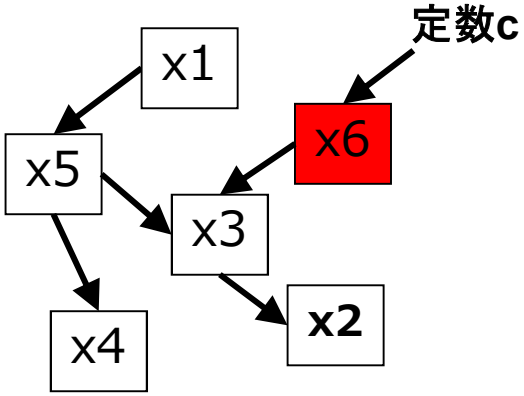
$$\vdots$$

介入によって因果を定義

- 介入



x6に介入して
x6=cに固定
do(x6=c)



$$x_6 = f_6(x_1, e_6)$$

$$x_3 = f_3(x_5, x_6, e_3)$$

$$x_6 = c$$

$$x_3 = f_3(x_5, c, e_3)$$

- 介入による変化があれば因果あり

$$p(x_3 | do(x_6 = c)) \neq p(x_3 | do(x_6 = d))$$

構造的因果モデル (Pearl, 2000)

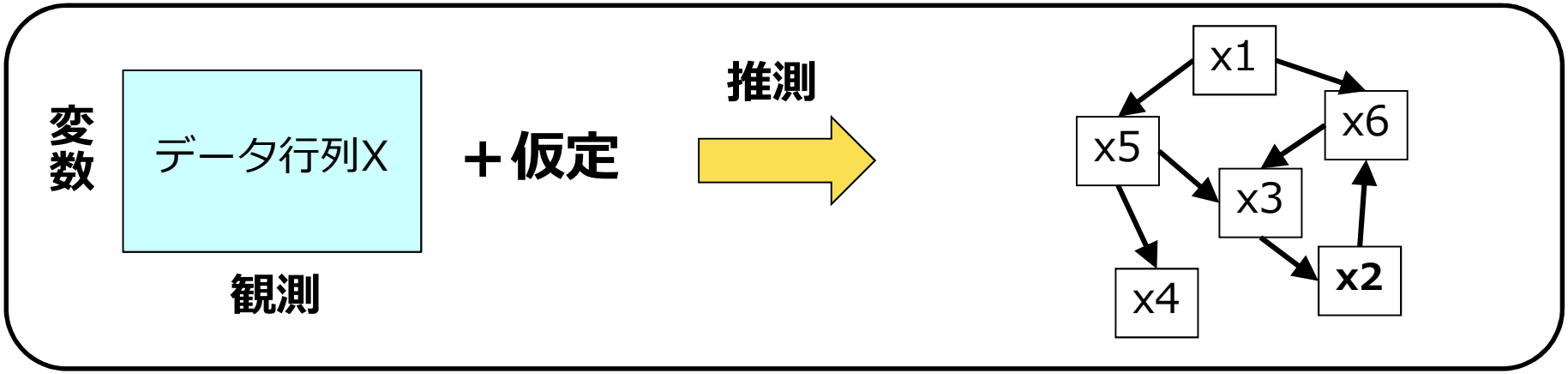
- 定性的関係: 因果グラフで表現
- 関数関係: $x_i = f_i(\text{それ以外の変数}, e_i)$
- 誤差分布: $p(e_1, \cdots, e_p)$
- 介入によって因果を定義

$$p(x_i \,|\, do(x_j = c)) \neq p(x_i \,|\, do(x_j = d))$$

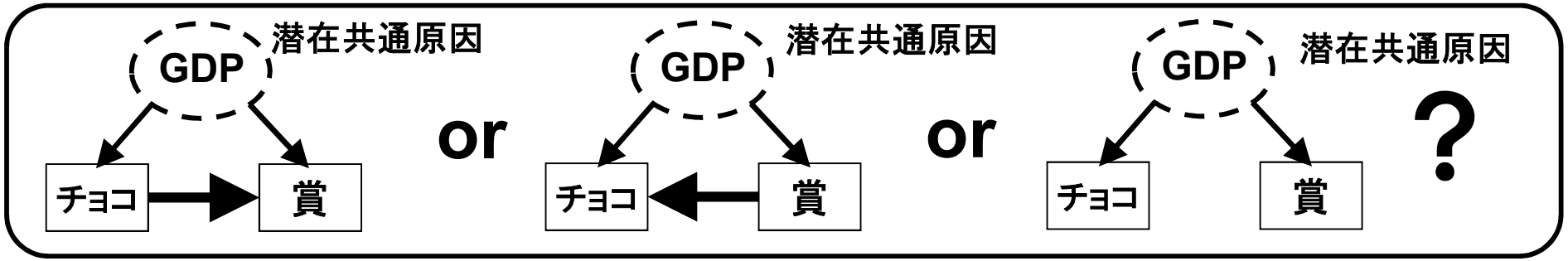
因果探索：因果グラフの教師なし学習

- 事前知識が足りない
- 仮説が十分ない
- データの助けがほしい

- データから因果グラフを推測



探索アプローチ



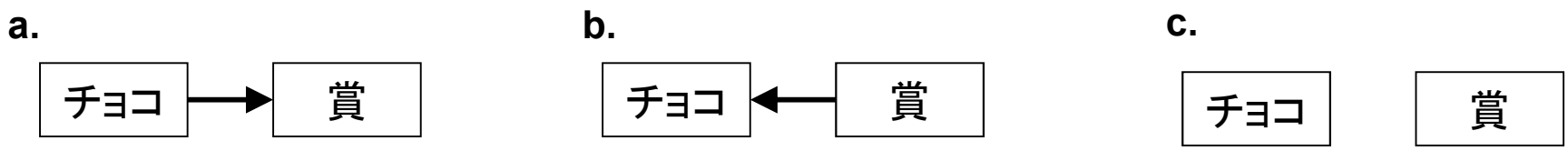
データ駆動型アプローチ

1. 因果関係について仮定を入れる

2. データに成り立つはずの制約を理論的に導出

3. 実際のデータで成り立つ制約を最も満たす
   モデルを見つける

三つの候補

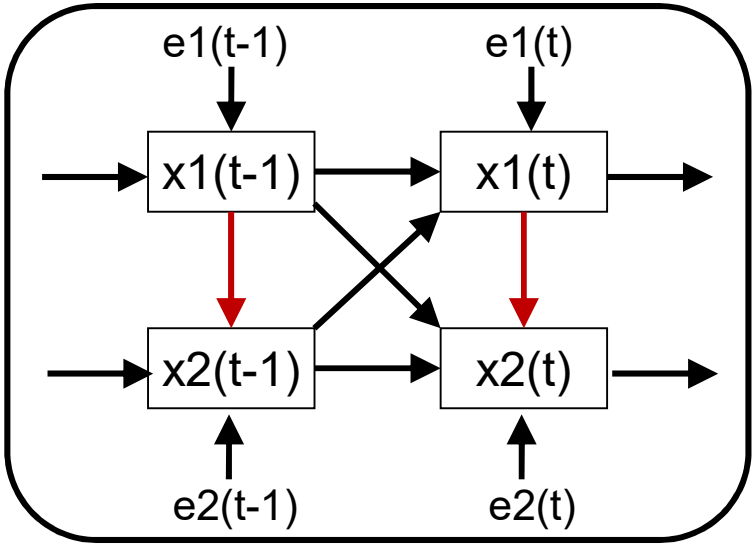


チョコと賞が独立なら、一番右のグラフを選ぶ

共通原因がすべて観測済み

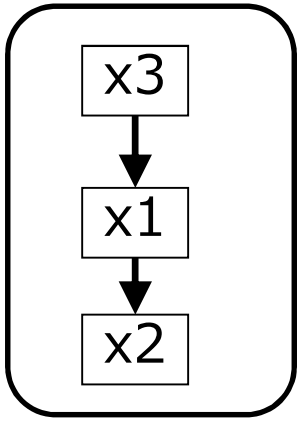
- 時間情報ありの場合の従来法
  - Granger causality等
  - 「予測が良い方が原因」という仮定

- 時間情報なしでも
  - 条件付き独立性
  - 誤差の独立性
  - 「介入により因果を定義」



条件付き独立性を用いて探索

正



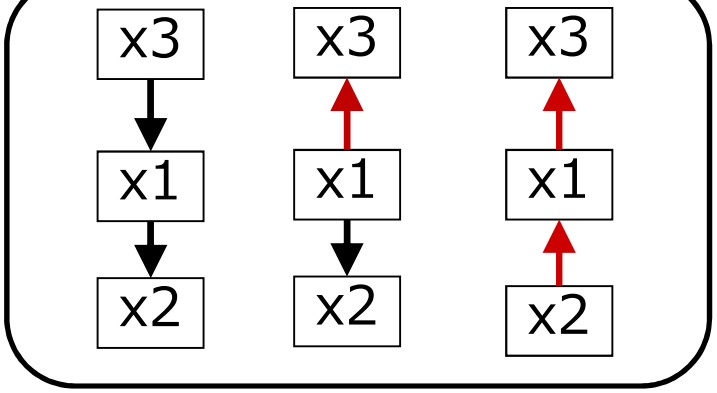
データ**X**が
生成される

成り立つ条件付き独立性

「x_2とx_3が独立 | x_1」

のみ

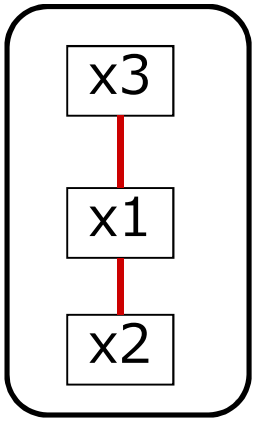
同じ条件付き独立性を
与える因果グラフを列挙



復元できない
(識別できない)

まとめる

ここまで
が限界

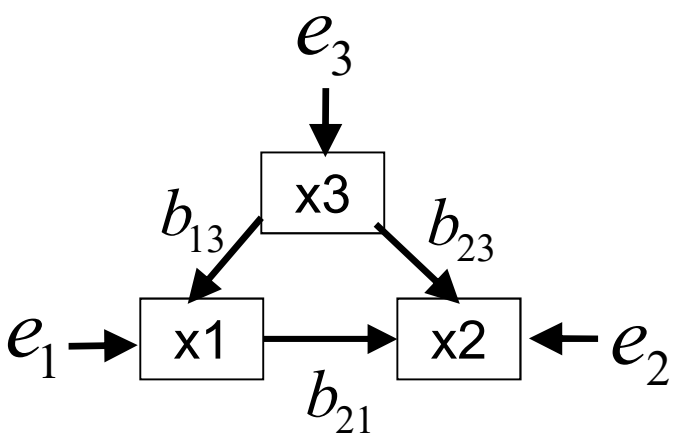


LiNGAMモデル

(Shimizu+06JMLR)

- 線形性、非巡回、誤差の非ガウス性

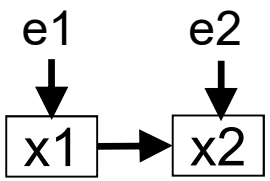
$$x_i = \sum_{j \neq i} b_{ij} x_j + e_i$$

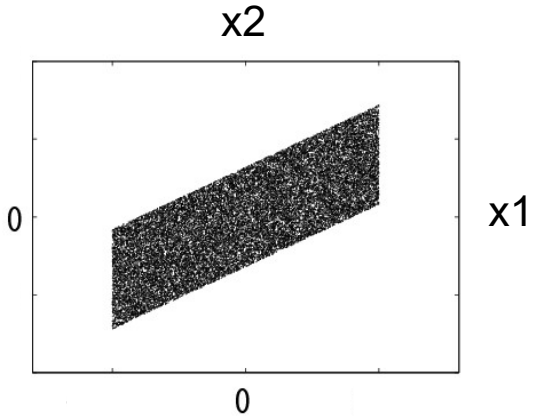


- 因果構造が識別可能: 因果方向(と係数)
- 拡張
  - 非線形性 (Hoyer+08NIPS, Zhang+09UAI)
  - 巡回 (Lacerda+08UAI)
  - 潜在共通原因 (Hoyer+08IJAR; Henao+10JMLR; Shimizu+14JMLR)

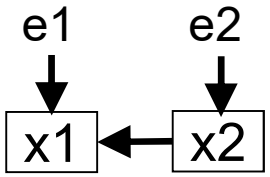
因果方向が異なるとデータ分布が異なる

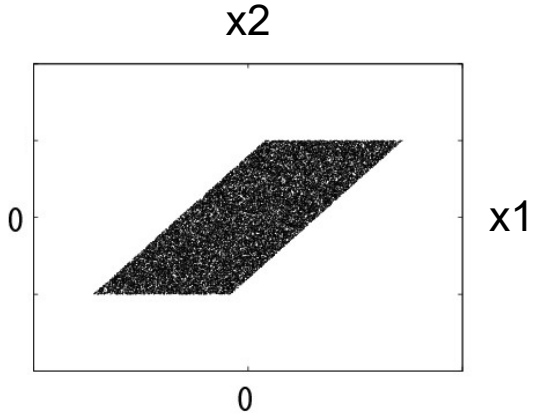
- ブラインド信号原分離の応用(ICA:独立成分分析)





$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ b_{21} & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{s}}$$





$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & b_{12} \\ \mathbf{0} & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{s}}$$

時系列と組み合わせ

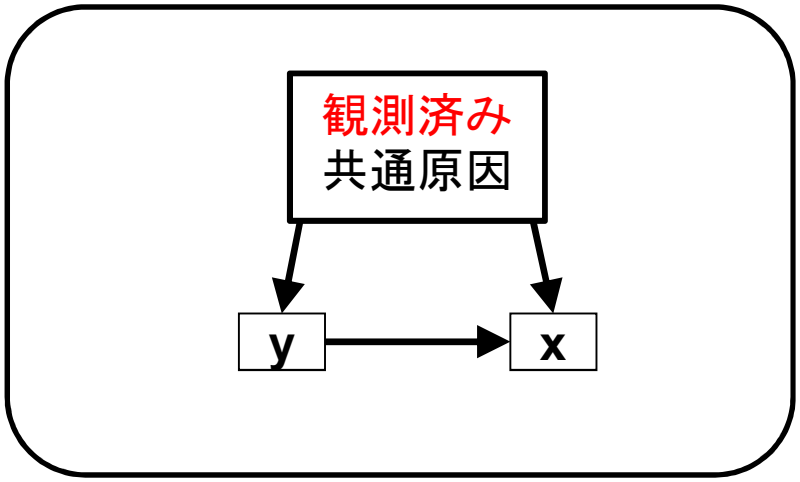
- サブサンプリング: 低解像度データ
  - SVAR: 構造型自己回帰モデル (Swanson & Granger, 1997)

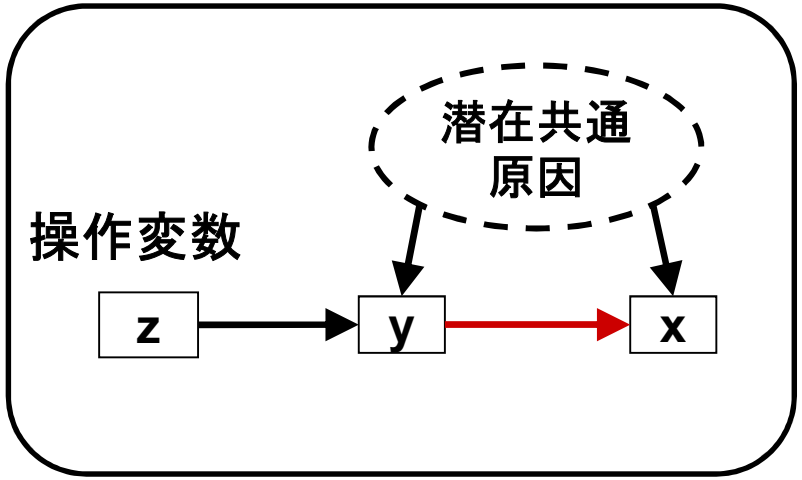
$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\underline{\tau=0}}^{k} \mathbf{B}_{\tau}\mathbf{x}(t-\tau) + \mathbf{e}(t)$$

    - 非ガウス独立 (Hyvarinen et al., 2010, JMLR)
  - 「間」を復元 (Gong et al., ICML15)
- 非定常 (Huang et al., IJCAI15)
  - 平均や係数が時間的に滑らかに変化

潜在共通原因がある可能性

- 分析者は事前に判断
  - 潜在共通原因がない
- かんたんではない





(操作変数法)

潜在共通原因ありの場合

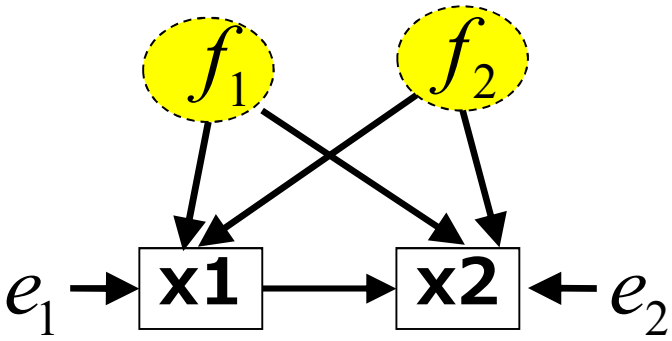
- 識別性の問題
  - 理論的に同定可能か否か
- 従来
  - 未観測共通原因がある部分は識別性がない
  - 識別性がないと無理やり推定しても不安定(事前分布依存)
- 関数形に仮定を入れると識別可能な場合がある

潜在共通原因がある場合のLiNGAMモデル (Hoyer+08IJAR)

- 潜在共通原因 f_q を追加 (非ガウス)

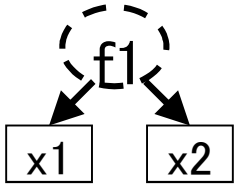
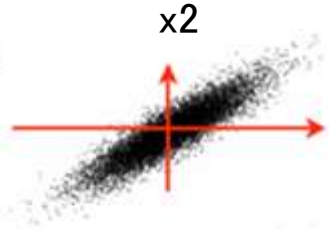
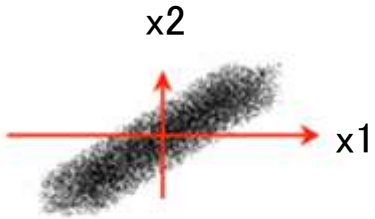
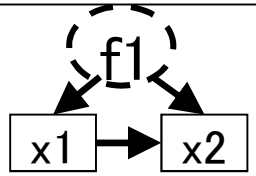
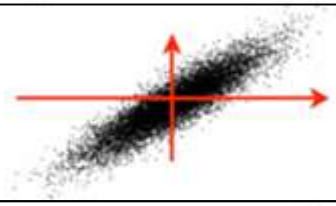
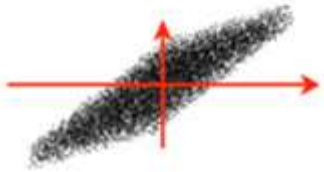
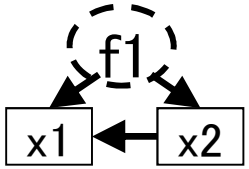
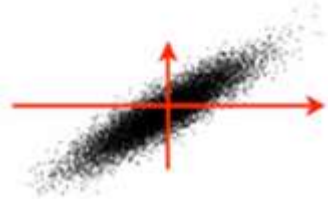
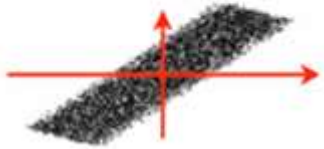
$$x_i = \sum_{q=1}^{Q} \lambda_{iq} f_q + \sum_{j \neq i} b_{ij} x_j + e_i$$

ただし $f_q \ (q = 1, \cdots, Q)$ は独立(WLG)



- **推定**
  - **潜在共通原因の数を陽に (Hoyer+08IJAR;Henao+10JMLR)**
  - **陰に (Shimizu+14JMLR)**

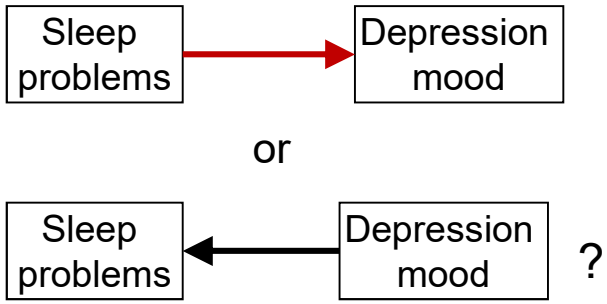
潜在共通原因がある場合のLiNGAMの散布図

モデル	A	e1,e2, f1がガウス	非ガウス（一様分布）
1. 	$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} * & 0 & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}$		
2. 	$\begin{bmatrix} * & 0 & * \\ * & * & * \end{bmatrix}$		
3. 	$\begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}$		

応用先

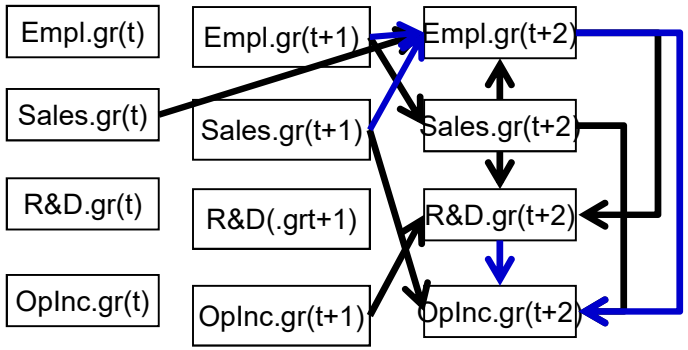
“標準的な”応用先

疫学



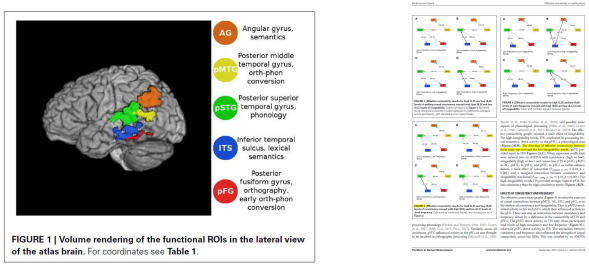
(Rosenstrom et al., 2012)

経済学



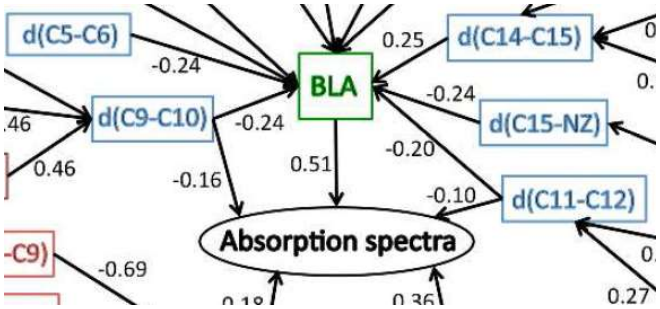
(Moneta et al., 2012)

神経科学



(Boukrina & Graves, 2013)

化学



(Campomanes et al., 2014)

“新しい”応用先

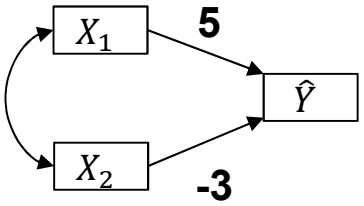
- 予測モデルの予測メカニズムの分析
  (Blobaum & Shimizu, MLSP2017)

- 深層学習などの予測モデル
  - 予測の仕組みはブラックボックス
  - 仕組みの理解 = 介入して何が起こるか

- 特徴量に介入した時にどうなるか
  - 例. チョコレートの消費量から賞の数を予測する予測モデルをつくったとして
  - チョコの量を介入して変えた時に、予測モデルはどう反応するか？予測値はどう変わるか

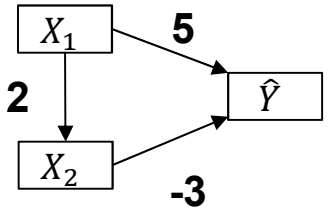
例

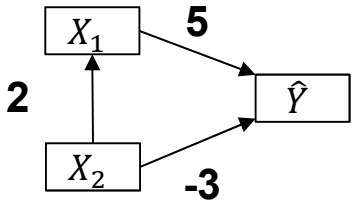
- 予測モデル: $\hat{y} = f(x_1, x_2)$



- 特徴量から予測への介入効果は因果構造に依存する

$$x_2 = 2x_1 + e_i$$



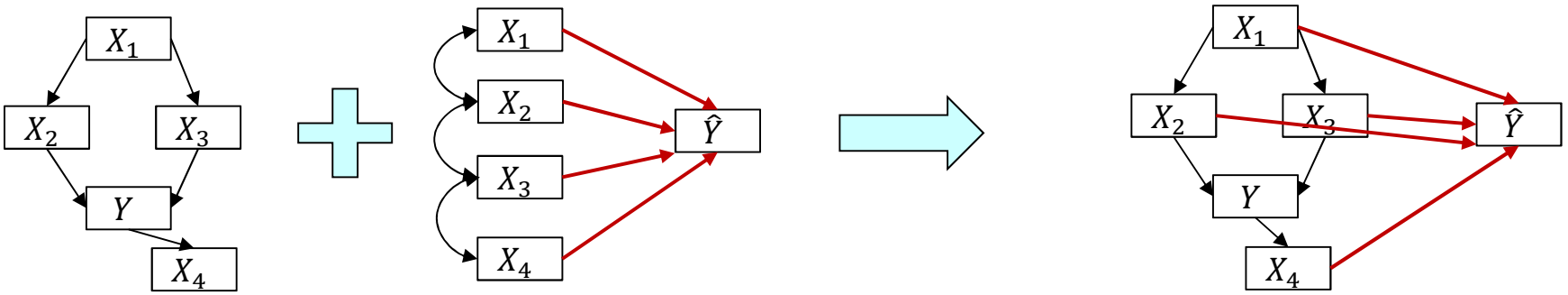


$\frac{\partial}{\partial X_1} E(\hat{Y}|\mathrm{do}(X_1))$= -1

$\frac{\partial}{\partial X_1} E(\hat{Y}|\mathrm{do}(X_1))$= 5

予測メカニズムの解析

- 因果モデルと予測モデルを組み合わせて、予測メカニズムのモデルを作る



因果モデル

$$x_4 = f_4(y, e_4)$$

$$\vdots$$

予測モデル

$$\hat{y} = f(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

Lasso, SVM, 決定木,
深層学習, etc.

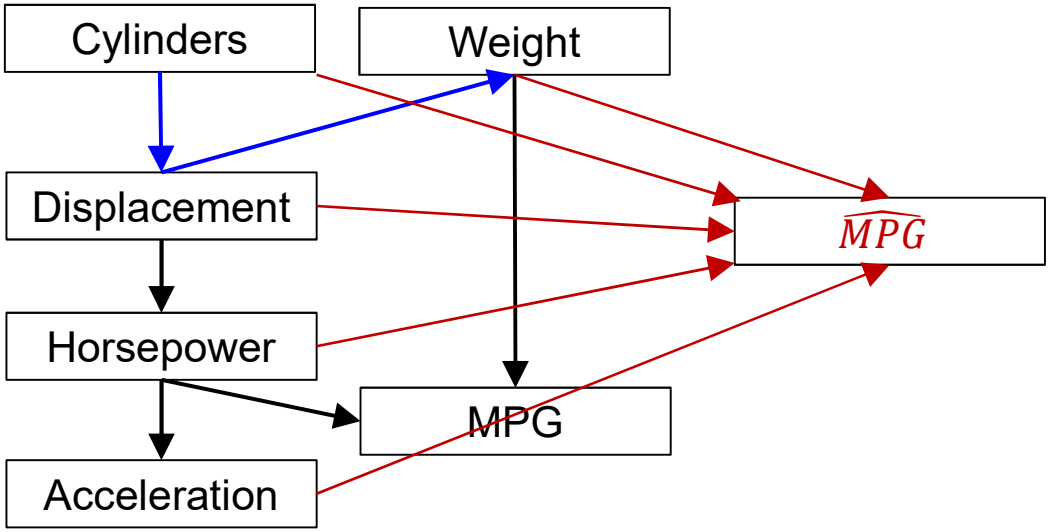
予測メカニズムのモデル

$$E(\hat{y} \mid do(x_i = c))$$

$$p(\hat{y} \mid do(x_i = c))$$

Illustrative example

- Auto-MPG (miles per gallon) dataset
- MPGの予測値への介入効果が最も大きい変数はどれ？
- 特定のMPGの予測値を得るにはどの変数に介入すべきか？(制御)



Desired MPG prediction	Suggested intervention on cylinders
15	8
21	6
30	4

おわりに

おわりに

- 因果探索
  - 因果関係の教師なし学習
  - 一定の仮定の下で因果グラフを推測可能
- 予測モデルの予測メカニズムの解析
  - “新しい”応用先
  - 因果モデルと予測モデルを組み合わせて、予測メカニズムをモデル化