

人間の因果的直感に基づく因果探索アルゴリズム

A causal discovery algorithm based on human causal intuition

樋口 滉規[†], 高橋 達二[†]

Kohki Higuchi, Tatsuji Takahashi

[†] 東京電機大学

Tokyo Denki University

tatsujit@mail.dendai.ac.jp

概要

本研究は、ベイジアン・ネットワークの構造学習の際に行われる条件付き独立性検定を、適応的合理性の観点において優れた儉約性と効率性を有する指標である $pARIs$ (proportion of assumed-to-be rare instances) で代替したアルゴリズムを提案した。 $pARIs$ は、人間の因果的直感と高い相関を示すことが明らかになっている指標であり、適応的合理性の観点から、スモールサンプル、事象の生起確率の稀少性など幾つかの仮定を設けた場合には、統計学的に規範的とされている指標よりもなお、非独立性の優れた近似として振る舞うことが計算機シミュレーションにより明らかになっている。因果推論の単純化された認知科学的な知見をベイジアン・ネットワークの枠組みへと統合することにより、現実的かつ複雑な状況下における人間の因果推論過程の説明と、ベイジアン・ネットワークの重要な課題の一つである効率的な構造学習の実現を試みた。また、提案した指標の性能の評価は、人工データ生成とパラメータ・リカバリーの確認の組からなる計算機シミュレーションによって行った。

キーワード：因果帰納，因果発見，ベイジアン・ネットワーク

1. 序論

人類は種の誕生以来、多様な自然環境へと適応・生存することに成功し、現在の繁栄を迎えている。そのような成功の要因の一つは、人間が因果関係を効率的に学習（すなわち、帰納的に構築）し、それを活用する能力を有していたことにある。学習した因果関係の活用により、原因の観察に基づく未来の予測、結果の観察に基づく原因の診断、更には原因の生起の操作による間接的な未来の操作が可能となる。具体的には、食物の安全性の判断、狩りや植物栽培の効率化、食物の長期保存方法の発見、病気の予防・診断・治療、天候や災害の予測など、生存に不可欠な数多くの要素は因

果関係の学習に基づいている。人間の因果推論はしばしば誤りを含むものの、データが少ない状況でも往々にして適切な因果関係を学習できるといった点では、現状の人工能にはない優れた性質を有している。その認知過程のモデリングは人間を理解するという科学的な価値だけではなく、有用なシステムのデザインに繋がる工学的な価値をも有する。複雑な因果関係を表現するための有力な枠組みとして、ベイジアン・ネットワークがある。これは現実世界における意思決定への応用という点では深層学習よりも優れた面があるものの、ネットワークの構造探索の際に用いる条件付き独立性の検定において考慮する要因（ノード）の数に応じて計算量が指数的に増大するために、実践的な課題への適用が困難であった。その問題を解決すべく、これまでに様々な探索アルゴリズムが提案されており、特に PC アルゴリズムと呼ばれる手法の登場は探索の飛躍的な効率化を実現した [3] しかし、そのような探索アルゴリズム自体の研究に比して、条件付き独立性の検定に用いる尺度を模索する研究は活発でなく、殆どの場合、ピアソンの χ^2 検定や尤度比 χ^2 検定といった古典的な統計学の仮説検定手法が用いられる。本研究が提案するのはアルゴリズムの直接的改善ではなく、独立性検定に用いる指標の改善である。より具体的には、構造学習の際に行われる条件付き独立性検定を、適応的合理性の観点において優れた儉約性と効率性を有する指標である $pARIs$ (proportion of assumed-to-be rare instances)[4] で代替したアルゴリズムを提案する。 $pARIs$ は、人間の因果的直感と高い相関を示すことが明らかになっている認知科学的な指標であり [1], $1 - pARIs$ の情報量的解釈である相互情報量は広く検定に用いられる尤度比 χ^2 統計量 (G^2) と線形関係にある。また、単純因果帰納の枠組みにおいて、環境の構造や計算資源の制約を考慮する適応的合理性の観点から、スモールサンプル、事象の稀少性など幾つかの仮定を設けた場合には、 $pARIs$ は統計

学的に規範的とされている指標よりもなお、非独立性の尺度に対する優れた近似として振る舞うことが計算機シミュレーションにより明らかになっている [2]. 因果推論の単純化された認知的科学的な知見をベイジアン・ネットワークの枠組みへと統合することにより、ベイジアン・ネットワークの重要な課題の一つである構造学習の効率化、現実的かつ複雑な状況下における人間の因果推論過程の説明を試みる。

2. 単純因果帰納

まず、 $pARIs$ がしたがう因果帰納のための基本的な枠組みについて説明する。現在注目している事象を結果事象 E 、その原因であると考えられる事象を原因候補事象 C とおく。このとき、専ら観察に基づいて事象 C と E の間にある関係性の強さを推論することを考える。観察に基づく因果帰納では、 C と E の因果関係の強さはその共起情報、すなわち、 C と E が互いに生じたか否かを表す 4 つの組み合わせ事象の生起頻度から推論できる。事象 C と E の生起・不生起の場合を考え、各組み合わせの生起頻度を a, b, c, d とすると、 C と E の共起情報は表 1 に示すような 2×2 の分割表として表すことができる。このように単一の原因事象と結果事象に対して、その生起頻度から事象間にある因果的な関係性の強さを推論する枠組みを単純因果帰納と呼ぶ。

表 1 共起情報を示す 2×2 の分割表

	Effect (E)	No effect ($\neg E$)
Cause (C)	a	b
No cause ($\neg C$)	c	d

また、このような分割表から C と E の間の因果強度を導く指標を観察的因果帰納モデル (または単に因果帰納モデル) と呼ぶ。換言すると因果帰納モデルとは、4 種の生起頻度から因果強度を推定する指標を意味する。因果帰納モデル $pARIs$ は、後述する稀少性仮定 (すなわち C と E の生起が稀少であるという) 仮定のもとで、稀少な C または E の生起を所与として C と E が同時に生起する条件付き確率である。単純因果帰納の枠組みで人間を対象に行われた過去の実験に対して行われたメタ分析の結果から、 $pARIs$ は既存の 30 以上の指標よりも優れた記述性能を示すことが明らかになっている [1].

$$pARIs = \frac{P(C \wedge E | C \vee E)}{P(C \wedge E)} \quad (1)$$

$$= \frac{P(C \wedge E)}{P(C \vee E)} \quad (2)$$

$$= \frac{P(C, E)}{P(C) + P(E) - P(C, E)} \quad (3)$$

$$= \frac{a}{a + b + c} \quad (4)$$

また、 $pARIs$ は変形すると以下のように表すことができる。

$$pARIs = P(C \wedge E | C \vee E) \quad (5)$$

$$= P((E | C) \wedge (C | E)) \quad (6)$$

ここから $pARIs$ は、因果的な双条件文、すなわち「 C ならば E 、かつ、 E ならば C 」という条件文が真であるような確率として解釈することが可能である。

3. 稀少性仮定

稀少性仮定 [6] とは、通常、原因と結果の基準率 $P(C), P(E)$ は小さい (すなわち稀) であるとする仮定である。自然のカテゴリが疎であることは直感的には明らかであるために (例えばあらゆる事物の中で鳥類に属するものは稀少であり、さらに、鳥類の中においてカラスは稀少である)、稀少性を仮定する多くの分析は、人間の仮説空間が自然のカテゴリに大きく依存しているという経験的な証拠に基づいて稀少性の仮定を正当化している。また、[7] は、スパース性を仮定することの理論的な根拠は家族的類似性に基づいて説明できることを示した。

単純因果帰納において、稀少性の仮定は d セルが膨大であると仮定するに等しい。これは、原因 C と結果 E が共に稀少であれば、殆どの場合、その両方もが生起することは更に稀少であり、殆どの場合においてどちらも生起することはないことから説明できる。また、 d セルに関する他の問題として、その定義が曖昧であるという問題がある。この問題を説明するために、ある照明器具について「スイッチを押す (C) と明かりが点く (E)」という因果条件文の例を用いる。この例において、スイッチを押して明かりが点いた回数 $N(C, E)$ を数えることには何ら問題がなく、その回数は一意に定まる。また、 $N(\neg C, E)$ や $N(C, \neg E)$ を数える場合も同様であり、これらの場合、単に C か E のどちらかが生起した瞬間に両事象の組み合わせを考えればよい。一方で、スイッチを押さず、明かりが点かなかった場合が起きた回数 $N(\neg C, \neg E)$ を数えることは容易ではない。一つの方法として考えられるのは、単位時間ごとに事象の生起不生起を観測しカウントすることであるが、その単位時間の設定必然的に恣意的であり、ゆえに d セルの定義は曖昧さを残すことにな

る。このことに対する $pARIs$ の利点として、 $pARIs$ は定義式に d セルを含まないため、膨大、あるいは曖昧な d セルの値を無視することができる。

4. ベイジアン・ネットワーク

ベイジアン・ネットワークは事象間の因果関係を、有向非巡回グラフ (DAG) と条件付き確率分布を用いて表現したグラフィカルモデルである。本研究は観測データからネットワークの構造を学習するプロセスに関するものであり、特に制約ベース法と呼ばれるアプローチに焦点を当てる。制約ベース法は事象間の共変関係に基づいて因果構造を学習するアプローチであり、2変数の独立性の検定を行う段階と因果関係の方向付けを行う段階からなる。

4.1 条件付き独立性検定

条件付き独立性の検定に際して、一般には、条件付き独立であることを帰無仮説とした古典的な統計的検定が用いられる。これに用いられる代表的な統計量には χ^2 統計量や G^2 統計量がある。帰無仮説の元での期待頻度を Expected, 実際に観測した頻度を Observed とすると以下のように定義される。

$$\chi^2 = \sum_{x,y,z} \frac{(\text{Observed} - \text{Expected})^2}{\text{Expected}} \quad (7)$$

$$G^2 = 2 \sum_{x,y,z} \text{Observed} \cdot \log \frac{\text{Observed}}{\text{Expected}} \quad (8)$$

G^2 統計量は尤度比 χ^2 統計量とも呼ばれる。 N をサンプルサイズとすると、 G^2 統計量は $1 - pARIs$ の情報量的解釈である相互情報量 (MI) と以下のような線形関係にある。

$$G^2 = 2 \cdot N \cdot \text{MI}(X, Y) \quad (9)$$

単純因果帰納の枠組みにおいて稀少性を仮定したとき、 $pARIs$ は非独立性の優れた近似として振る舞うことが知られている [2]。 $pARIs$ を条件付き独立性の指標として拡張するうえで、条件となる変数集合 Z を所与としたときの二変数 X, Y に対する $pARIs$ の値を以下のように定義する。

$$pARIs_{\mathbf{Z}} = \min_z \frac{P(x, y|z)}{P(x|z) + P(y|z) - P(x, y|z)} \quad (10)$$

条件付き独立性の判定に際して、任意の閾値 ϵ を用いて、 $pARIs < \epsilon$ のとき2変数を条件付き独立と見なすこととする。

4.2 PC アルゴリズム

古典的な条件付き独立性検定に基づく最も代表的な構造学習アルゴリズムが PC アルゴリズム [3] である。このアルゴリズムは、条件付き独立性検定の計算量がノード数に対して指数的に増大する問題を抱えていた IC アルゴリズム [8] を発展させたものである。PC アルゴリズムは、まず、すべてのノードを無向辺で結んだ完全グラフから出発し、変数間の条件付き独立性の検定を行い、有意に独立な事象間のエッジを取り除いていく。条件部は空集合より始まり (これを 0 次の条件付き検定と呼ぶ)、1 次、2 次と条件付ける変数の数を順次増やしながら行う。その後は有向非巡回グラフ (DAG) の制約にしたがい、可能なエッジに対して方向づけを行う。

5. シミュレーション

PC アルゴリズムにおける条件付き独立性の検定の際に $pARIs$ を使用することの有効性をシミュレーションを介して検証した。シミュレーションは、 χ^2 統計量、条件付き $pARIs$ 、条件付けを行わない $pARIs$ (これは 0 次の条件付けを行うことに等しい。以降 $pARIs_0$ と称する) の 3 種類に対して行った。なお、 $pARIs_0$ を比較対象に加えたのは、単純因果帰納の枠組みにおいて人間の観察的因果帰納と高い適合を示す $pARIs$ が複数の事象間の因果関係を扱う因果発見の枠組みでどの程度有効なのかを検証するためである。以下にシミュレーションの手順と結果を示す。

5.1 方法

提案した指標の精度と性質の評価を、人工データ生成とパラメータ・リカバリーの確認の組からなる計算機シミュレーションによって行った。データの生成には、図 1 に示すように、条件付き独立性を考慮する上で重要な 3 種類の構造 (連鎖、分岐、合流) のすべてを含む、最もシンプルな因果グラフを使用した。

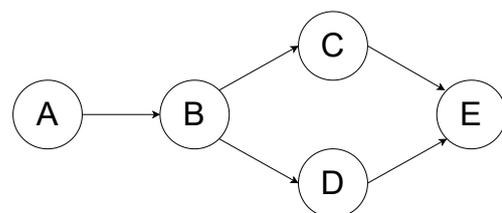


図 1 データ生成に使用した因果グラフ

各変数は $pARIs$ による計算を可能とするために生起不生起の値を取る 2 値変数とし、分析を平易にす

るために生起確率と条件付き確率は全変数で等しいものとし、大中小の三段階で変化させた。具体的には、各変数の生起確率を $\{.2, .5, .8\}$ と変化させ、各変数の条件付き確率は単純因果帰納の枠組みにおける因果性の規範的指標である $\Delta P = P(E|C) - P(E|\neg C)$ が $\{.2, .5, .8\}$ の値をとるように変化させた。上記のように設定した母集団の因果モデルから、各サンプルサイズ $N = \{10, 50, 100, 500\}$ の観測データを生成し、それに対して各アルゴリズムによる構造学習を行った。このとき、独立性検定の精度に焦点を当てるためにエッジの方向付けは行わず、無向辺の構造学習を行った。なお、 χ^2 統計量による検定の有意水準には $\alpha = .01$ を用い、 $pARIs$ および $pARIs_0$ の閾値は、それぞれ全体を通して安定していた $\epsilon = .1$ と $\epsilon_0 = .5$ を用いた。アルゴリズムによる構造学習の精度は、母集団である図1と等価にするために必要な最小のエッジの変更点の数であるエッジ編集距離を用いて評価した。これは値が小さいほど精度が高いことを意味する。結果は上記の試行を300回繰り返した平均距離である。

5.2 結果と議論

結果を図2に示した。ヒートマップは平均エッジ編集距離を表し、横軸は設定した ΔP の値を、縦軸は各事象の生起確率を表している。結果から、サンプルサイズが小さい場合に $pARIs$ および $pARIs_0$ は χ^2 統計量よりも母集団とのエッジ編集距離が近くなることが読み取れる。また、その傾向は $N = 10, 50$ の場合に顕著であり、十分なサンプルが揃う $N = 100, 500$ の場合に逆転する。 $N = 10$ における χ^2 統計量の結果は、統計的な観点から独立性を判断するには十分なサンプルが得られていないことを示しているとも解釈でき、一概に $pARIs$ のほうが優れていると結論づけることはできない。しかし、結果は少なくとも $pARIs$ による条件付き独立性の検定が特にスモールサンプルからの推論において有用でありうることを示している。また、十分なサンプルが得られた場合にも、特に稀少性のもとで平均エッジ編集距離 0.2 付近の精度で母集団を推定できることを示している。他方、エッジの有無の判断へ単純因果帰納の枠組みをそのまま適用した $pARIs_0$ は、稀少性のもとで、スモールサンプルかつ因果強度が大きい場合には条件付きの $pARIs$ と同等以上の振る舞いを示すことが読み取れる。このことは、単純かつ人間の因果的直感と高い適合を示す指標が、複数の事象間の因果発見という枠組みにおいても一定の有効性を持つことを示している。

今回のシミュレーションにおいて、 $pARIs$ と $pARIs_0$ の閾値を全体を通して安定した値に固定したが、実際は各確率分布に合わせて最適なものを個別に設定することも可能である。閾値を変化させた場合の挙動の変化や優れた閾値の候補の計算方法など、閾値に関するより詳細な分析が必要である。また、事象ごとに生起確率や条件付き確率が異なるような因果グラフにおける性能の分析についても本研究では未検討であるが、重要な課題である。

6. 結論

本論文では、ベイジアン・ネットワークの構造学習の際に行われる条件付き独立性検定を、人間の因果的直感と高い相関を示すことが明らかになっている指標であり、稀少性仮定のもとでは非独立性の尺度に対する優れた近似として振る舞うことが明らかになっている $pARIs$ で代替するアルゴリズムを提案し、計算機シミュレーションに基づく性能分析を行った。結果から、提案アルゴリズムは条件付き独立性の検定として一定の有効性を持ち、特にスモールサンプルにおいて有用である可能性が示された。

文献

- [1] 高橋 達二, 横川 純貴, 大用 庫智, (2014) “少数サンプルからの帰納推論と双条件付確率” 人工知能学会全国大会論文集, Vol. 28, 2N4-OS-03a-2.
- [2] 樋口 滉規, 高橋 達二, (2020) “稀少性仮定下での非独立性検出としての観察的因果帰納とその適応的意味” 日本認知科学会大会発表論文集, Vol. 37, P-151.
- [3] Spirtes, P., Glymour, C., (1991) “An algorithm for fast recovery of sparse causal graphs” Social Science Computer Review. Vol. 9(1) pp. 62-72.
- [4] Takahashi, T., Kohno Y., Oyo, K., (2010) “Causal Induction Heuristics as Proportion of Assumed-to-be Rare Instances (pARIs)” Proceedings of the 7th International Conference on Cognitive Science.
- [5] Hattori, M., Oaksford, M., (2007) “Adaptive non-interventional heuristics for covariation detection in causal induction: Model comparison and rational analysis” Cognitive Science, Vol. 31(5), pp. 765-814.
- [6] Oaksford, M., Chater, N., (1994) “A Rational Analysis of the Selection Task as Optimal Data Selection” Psychological Review, Vol. 101(4), pp. 608-631.
- [7] Navarro, J., Perfors, F., (2011) “Hypothesis Generation, Sparse Categories, and the Positive Test Strategy” Psychological Review, Vol. 118(1), pp. 120-134.
- [8] Verma TS., Pearl J. (1991) “Equivalence and Synthesis of Causal Models.” Proceedings of the 6th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, pp. 220-227.

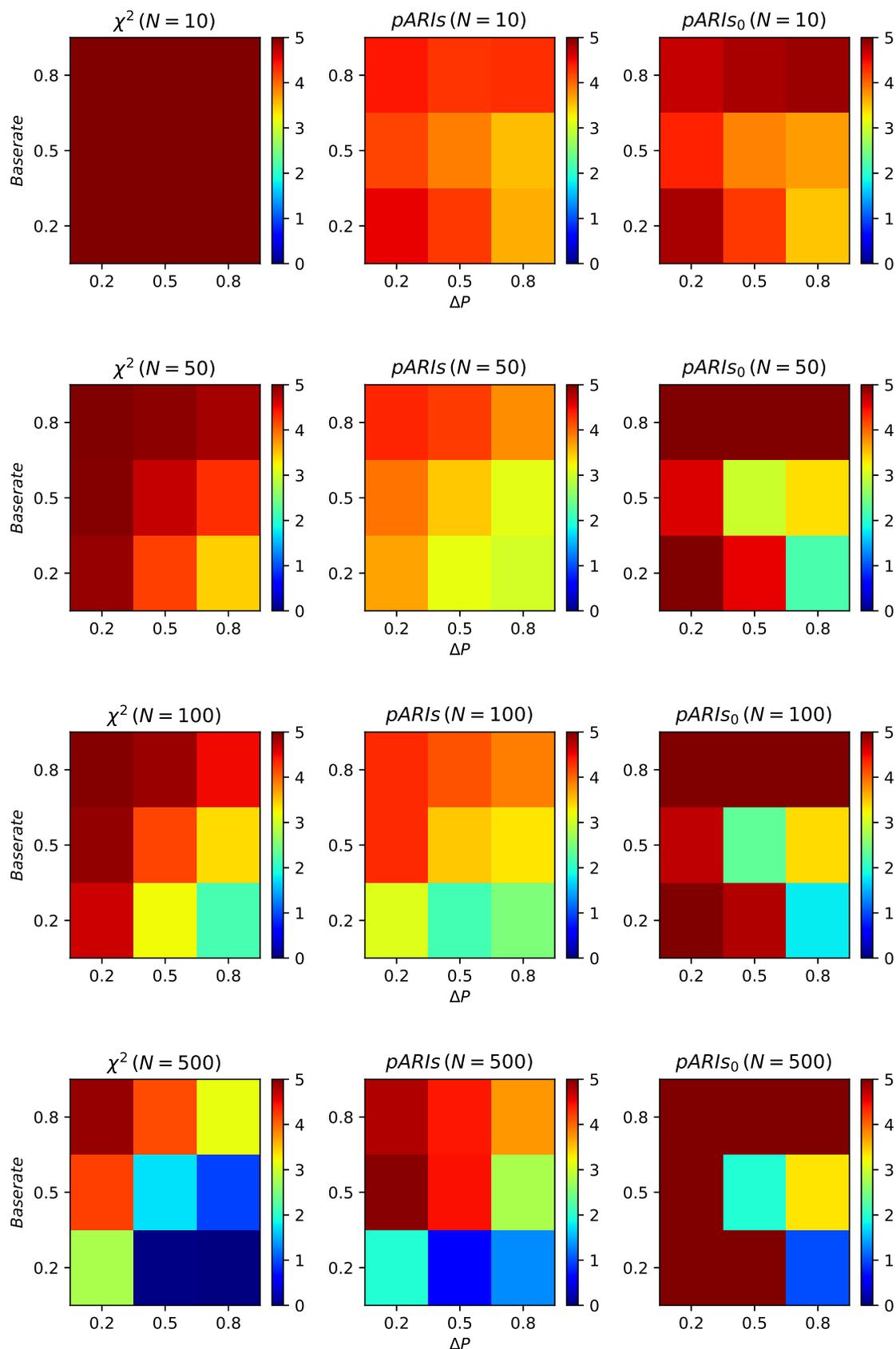


図2 各アルゴリズムを用いて学習したグラフと正答グラフとのエッジ編集距離。 χ^2 検定では有意水準 $\alpha = .01$ を、 $pARIs$ および $pARIs_0$ の閾値は、それぞれ全体を通して安定していた $\epsilon = .1$ と $\epsilon_0 = .5$ を用いた。