

統計的機械学習（応用計量分析2）第2回

前半：意思決定理論

後半：データに基づく意思決定の精度保証

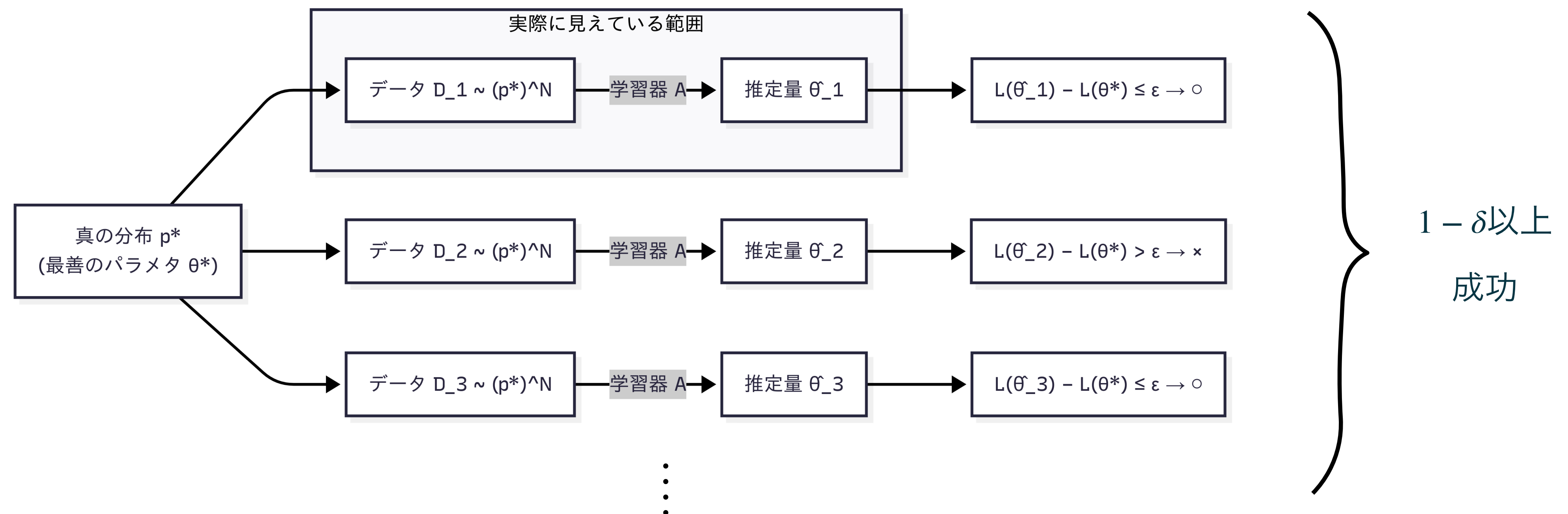
先週はLETUSの公開ができていませんでした。

今週からURLはLETUSにも載せます

前回の補足：PAC学習のイメージ

データの生成と学習を繰り返した場合の成功率を保証

- データ生成 → 学習 → 真の分布で評価して悪さが ϵ 以下に抑えられる割合が $1 - \delta$ 以上となるサンプルサイズ N を保証



前回の補足：機械学習におけるモデルの複雑さの効果

複雑なモデルは近似誤差が小、推定誤差が大→バランスが重要

- モデルを複雑にすると近似誤差は下がるが**推定誤差は上がる**
- 期待損失（真の誤差） $L(\hat{f})$ を分解

$$L(\hat{f}) = L(\hat{f}) - \hat{L}(\hat{f})$$

$$+ \hat{L}(\hat{f}) - \hat{L}(f^*)$$

$$+ \hat{L}(f^*) - L(f^*)$$

$$+ L(f^*)$$

← \hat{f} における損失の過小評価（これが厄介）

← 定義から ≤ 0

← θ^* における損失の過大評価

← 損失の最小値（近似誤差）

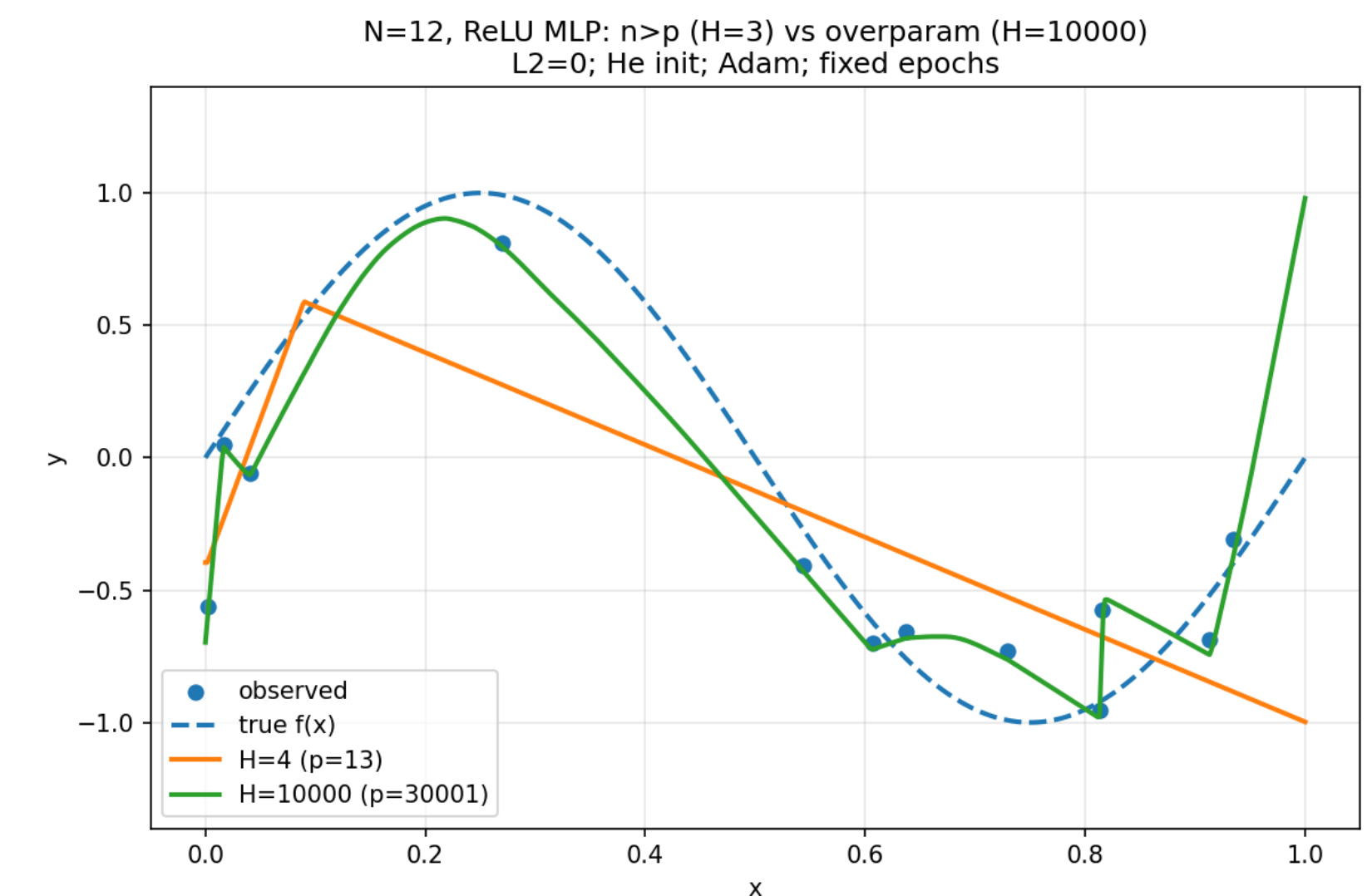
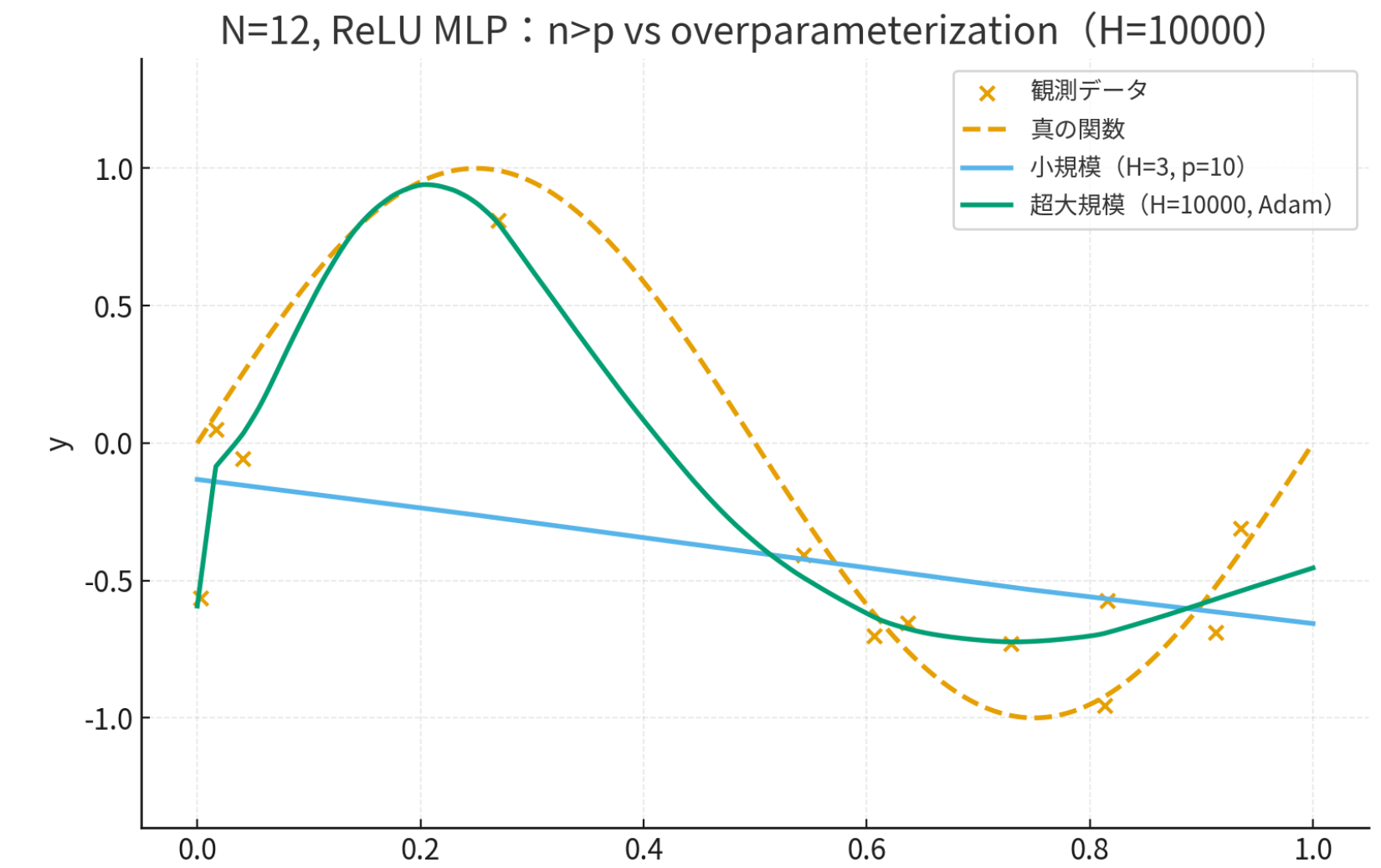
} 推定誤差

- 第一項は、特定の f に対してだけ抑えるような \hat{L} を設計してもダメ
 - その f を避けるように \hat{f} が最適化される → \mathcal{F} 全域にわたって一様に抑える必要
 - $L(\hat{f}) - \hat{L}(\hat{f}) \leq \max_{f \in \mathcal{F}} L(f) - \hat{L}(f) \rightarrow \mathcal{F}$ が広いと不利。

(参考) しかし実際のニューラルネットは・・・

SGDによる最適化が暗黙的正則化となり複雑なクラスでも汎化

- 2層パーセプトロン (ReLU活性化)
 - 入力1次元→中間層H次元→出力1次元
- パラメタ数 $p \gg$ サンプルサイズ N でも・・・
 - 最適化の早期停止により実質的なモデルクラスが小さい (右上図)
- 最適化をもっと回した場合 (右下図) でも
 - データに適合しながらも多項式モデルより汎化
 - 誤差がゼロになるモデルが多数存在し、その中で簡潔なモデルが最適化の結果選ばれる
- 過剰パラメタ化レジーム ($p \gg N$) では最適化が実質的なモデルクラスを制限する



本日の内容

前回の内容で質問等あれば

- 1. ガイダンス・因果推論と機械学習の概論
- **2. 意思決定理論（期待効用理論）の復習、因果推論との関係**
- 3. 潜在結果モデルに基づく因果推論の枠組み
- 4. 平均因果効果の推定法
- 5. 条件付き平均因果効果（CATE）の推定法 1：メタ学習器
- 6. CATEの推定法 2：二重機械学習
- 7. CATEの推定法 3：決定木と決定森
- 8. 構造方程式モデルとバックドア基準
- 9. 因果探索
- 10. 発展的な因果推論手法：フロントドア調整、操作変数法、回帰不連続デザイン、代理変数法
- 11. 発展的な意思決定理論
- 12. 強化学習
- 13. オフライン強化学習
- 14. バンディット
- 15. まとめ

不確実性下の意思決定理論の動機 1

何度でも参加できる賭けではいくら賭けるのがいいか？

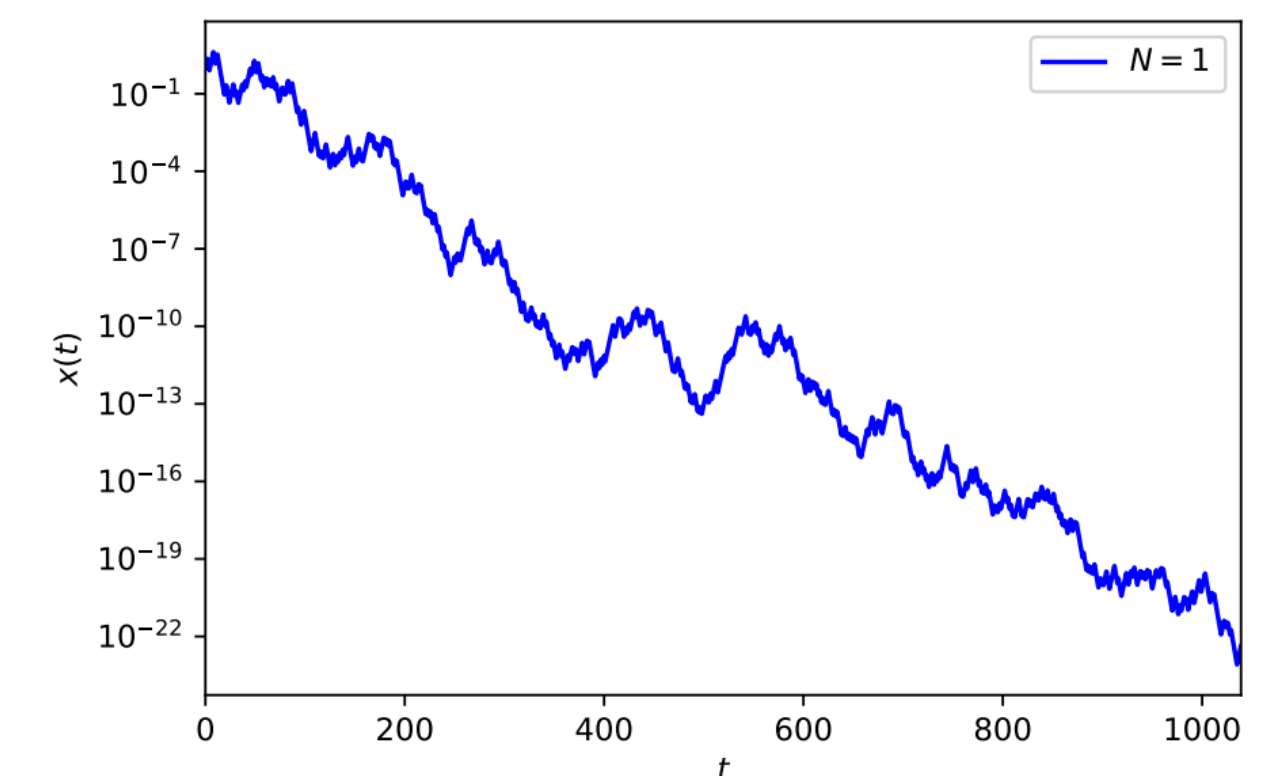
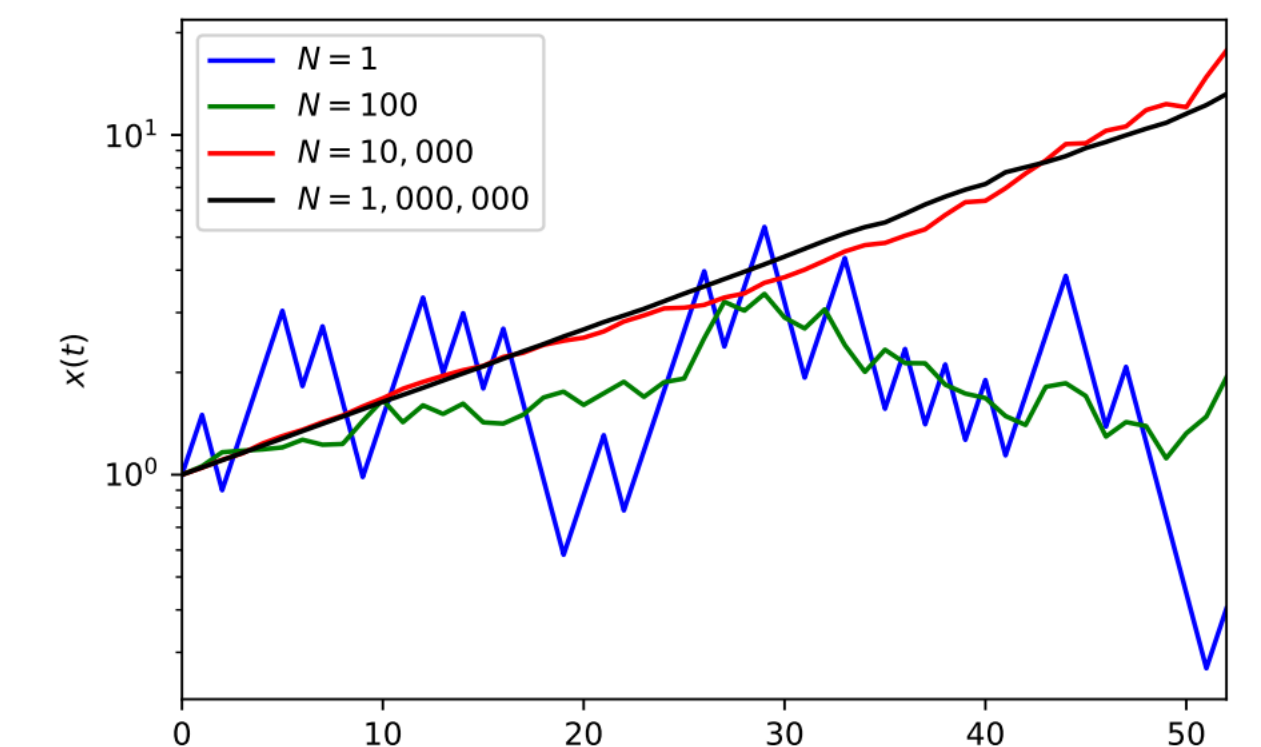
- 株式市場のように、いくらでも何度でも賭けられる次の賭けを考える
 - 表が出たら賭け金 $\times 1.5$
 - 裏が出たら賭け金 $\times 0.6$
 - → 期待値1.05倍になるはず、全財産賭ける？



不確実性下の意思決定理論の動機 1

何度でも参加できる賭けではいくら賭けるのがいいか？

- 株式市場のように、いくらでも何度でも賭けられる次の賭けを考える
 - 表が出たら賭け金 $\times 1.5$
 - 裏が出たら賭け金 $\times 0.6$
 - \rightarrow 期待値1.05倍になるはず、全財産賭ける？
- 典型的には表と裏が同数程度になる
 - 表裏1セットで $1.5 \times 0.6 = 0.9$ 倍 になる
- では賭けないべき？いくらならいい？ \rightarrow 後述



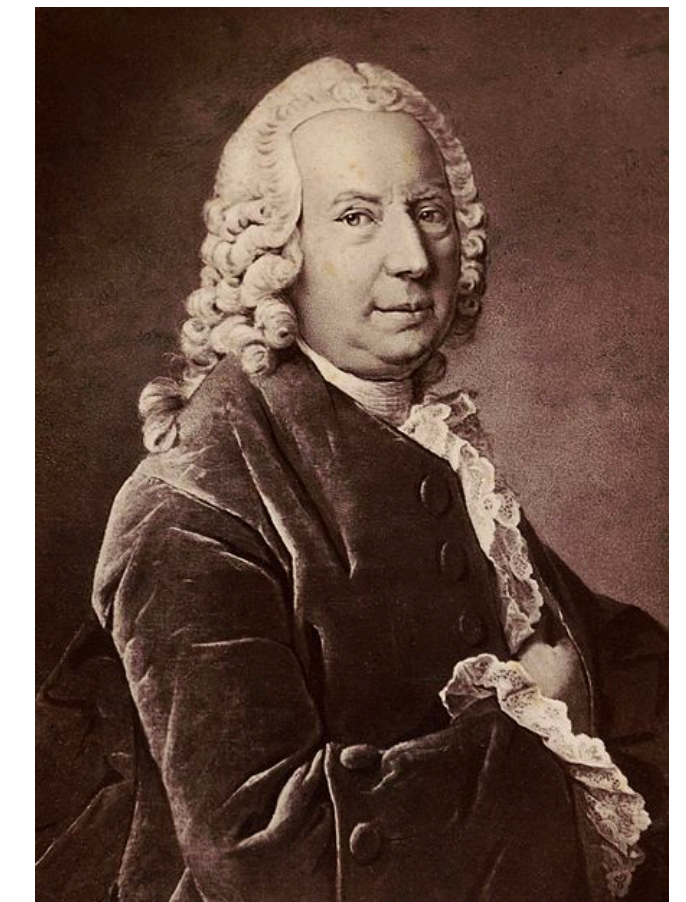
不確実性下の意思決定理論の動機2 (歴史的例)

サンクトペテルブルクのパラドックス：期待値最大化への疑義

- ギャンブルのように**結果の確率分布が既知**の意思決定を考える
- コインを連続で投げる。最初に表が出るまでに裏が出た回数 n に対して 2^n 円がもらえる。参加費がいくらまでなら参加する？

- 期待値は発散：
$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^k} \cdot \frac{1}{2} \cdot 2^k = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \dots = \infty$$

- しかし90%以上の確率で10円以下しかもらえない
- ベルヌーイの提案：主観的価値（**効用**）で考えるべき
 - 富豪にとっての1万円と貧民にとっての1万円は違う。
儲け＝資産増加の限界効用は資産に対して反比例する（限界効用逓減）
 - → 効用は資産の対数。効用の期待値は発散しない
 - ※最初に表が出るまでに裏が出た回数 n に対して 2^n 円もらえる場合はやはり発散
 - →どんな報酬の増え方に対しても期待値が発散しないためには効用に上限（上界）が必要



ダニエル・ベルヌーイ

確率的不確実性（リスク）下の意思決定理論

期待効用理論（vNMの定理）

- 儲けそのものではなく、儲けの嬉しさ=”効用”を表す関数を想定して意思決定を説明
 - 効用関数は個人（意思決定者）ごとに異なる、と考える
- フォンノイマン・モルゲンシュテルン（vNM）の定理
 - 選好関係が後述する公理系（弱順序、連続性、独立性）を満たすとき（かつその時に限り）、効用関数 u が存在して、意思決定（選好）は期待効用を最大化しているとみなせる
 - $\mathbb{E}_P[u(y)] \geq \mathbb{E}_Q[u(y)] \iff P \succeq Q, \quad \forall P, Q \in L$
 - ※ L は選択肢の集合、 \mathbb{E}_P は P を選択した場合の結果 y に関する期待値
 - ※ $A \prec B$: A より B を 選好する、 $A \preceq B$: A より B を 同程度以上には 選好する
 - このとき効用関数 u は正の線形変換 $u'(x) = au(x) + b \quad (a > 0, b \in \mathbb{R})$ を除いて一意

期待効用最大化の射程

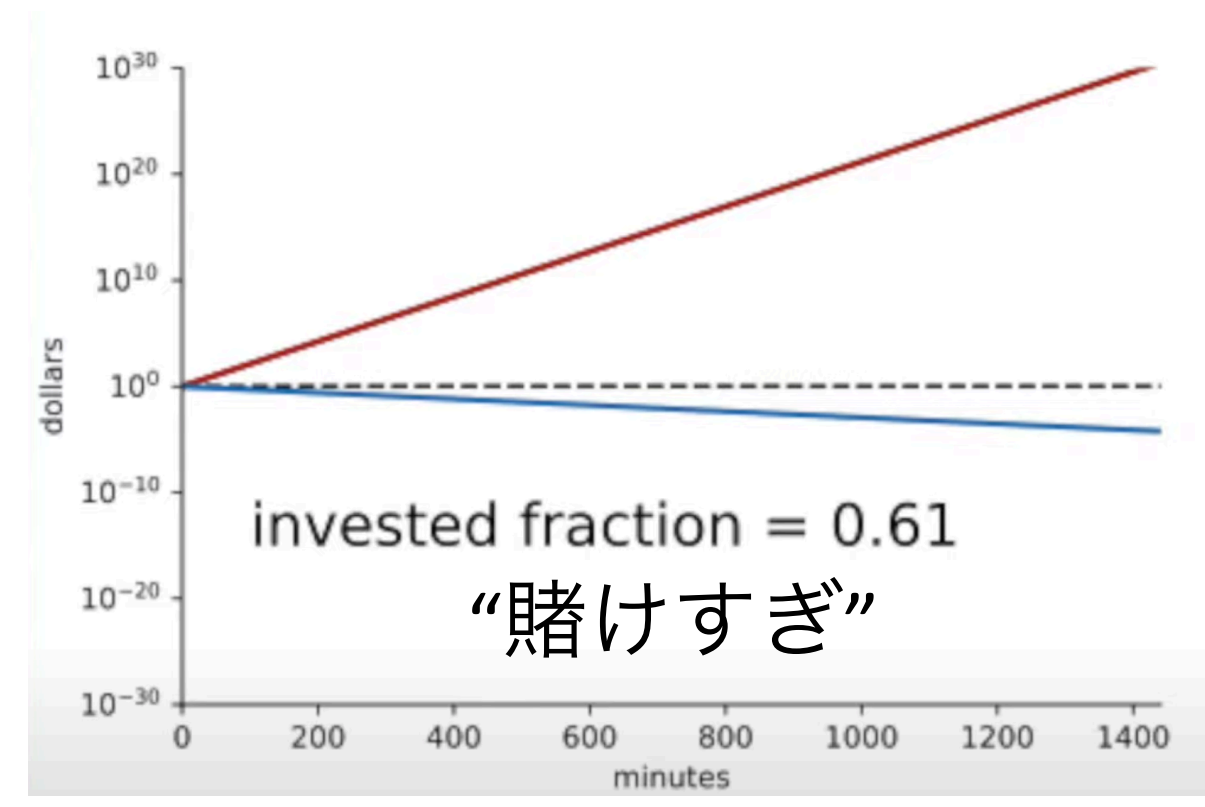
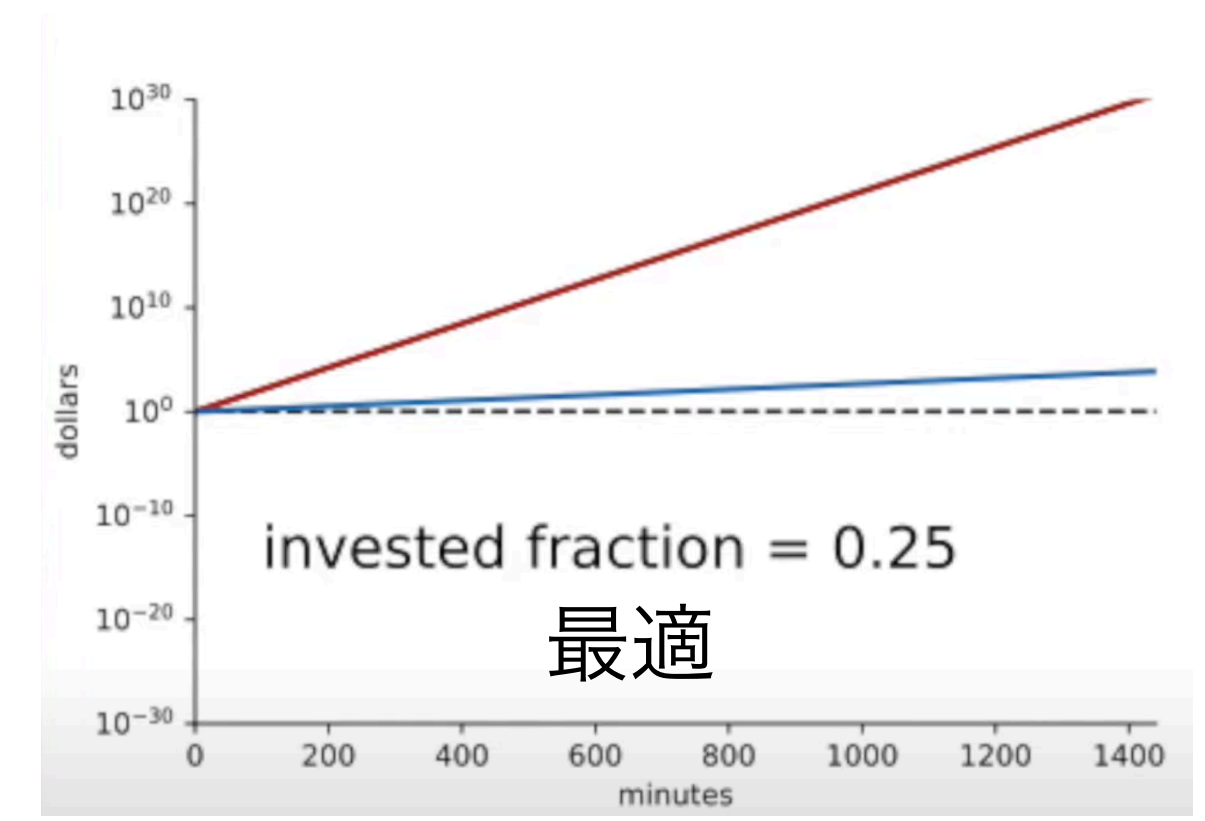
vNMの公理系

- 弱順序 (完備性と推移率)
 - 完備性：任意の2つのクジ $P, Q \in L$ について、 $P \succeq Q$ または $P \preceq Q$ が成立
 - どっちがいいか聞かれたら答えられる (決められる)
 - 推移律：任意の3つのクジ $P, Q, R \in L$ について、 $P \succeq Q$ かつ $Q \succeq R$ ならば $P \succeq R$
 - 三つ巴はない
- 連続性 $P \succ Q \succ R \Rightarrow \exists \alpha, \beta, \alpha P + (1 - \alpha)R \succ Q \succ \beta P + (1 - \beta)R$
 - 例：何もしない (Q) よりも、ほぼ確実に100円もらえる (P) が微小な確率 $1 - \alpha$ で死ぬ (R) 方が好ましいことも (確率 α が十分小さければ) ある
- 独立性 $P \succeq Q \iff \forall \alpha, \alpha P + (1 - \alpha)R \succeq \alpha Q + (1 - \alpha)R$
 - 同じクジ r を同じ割合で混合しても、元のクジ p, q の選好は変わらない

(参考) 繰り返し乗法的賭けの”最適”な賭けの割合の決め方

資産の対数の期待値を最大化 (ケリー基準)

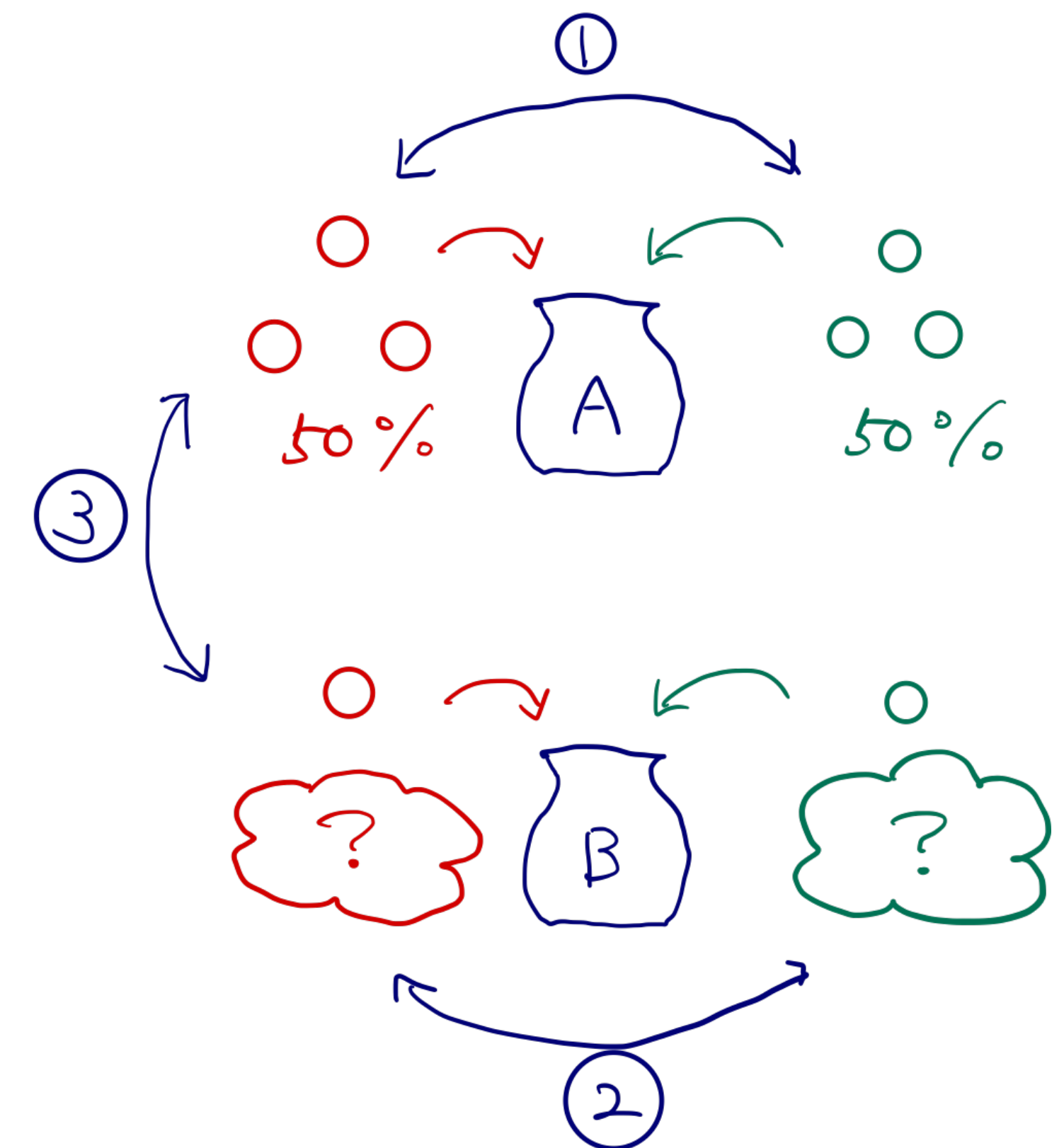
- Kelly基準：期待対数資産 $E[\log(x)]$ を最大化するように賭ける
 - 他の方法より勝っている状態である確率が1に収束 ($t \rightarrow \infty$)
- 1.5倍 or 0.6倍 (50%ずつ) の賭けでは資産の25%を賭けるのが最適
 - 表で $0.75+0.25 \times 1.5=1.125$ 倍、裏で $0.75+0.25 \times 0.6=0.9$ 倍
 - 表→裏で $1.125 \times 0.9=1.0125$ 倍 → 増えていく
- $E[\log(x)] = \log(E[x]) - \frac{V[x]}{2E[x]^2} + \dots$
 - **期待値は大きく分散は小さく** という投資の原則が再現
 - 期待値と分散のバランスの最適値もわかる
- 意思決定は通常1回で終わりではない
 - 資産を引き継いで次の賭けができる (乗法的繰り返し)
ことがリスク回避的意思決定の理由かもしれない



(参考) 確率的ではない不確実性もある

エルスバークのパラドックス：期待効用最大化の射程外

- どちらに賭ける？
 - ①赤と緑が半々入っている壺Aから1つ玉を取り出す。赤か緑か
 - ②赤と緑が何%ずつ入っているかわからない壺Bの赤か緑か
 - ③50%だとわかっている壺Aの赤玉か、割合の不明なBの赤玉か
- 壺Bの赤と緑に足して1になる確率を割り当てても期待値最大化では意思決定できない

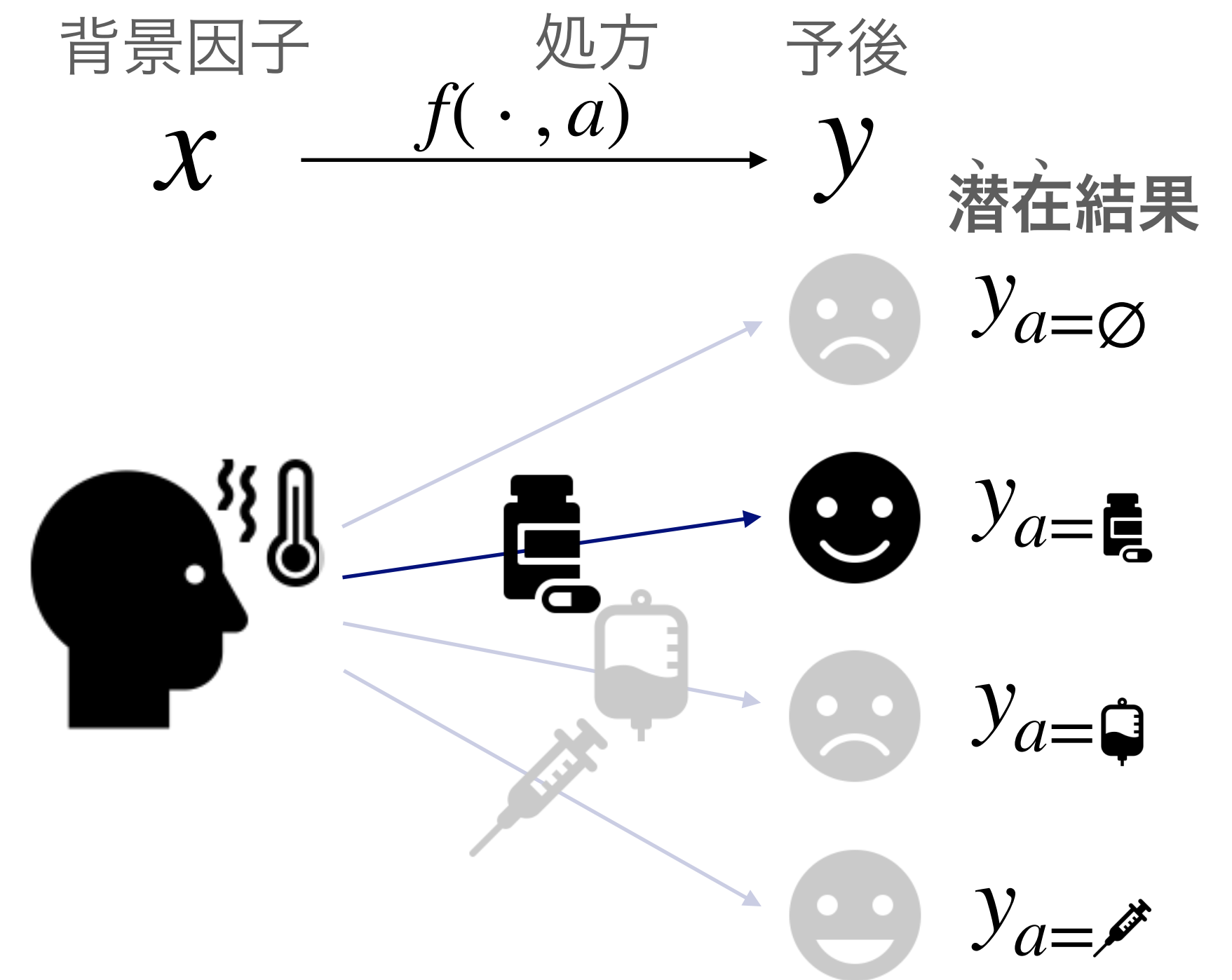


意思決定理論と因果推論と機械学習

意思決定のための因果的推定対象

各行動の結果（の効用の期待値）を推定すればよい

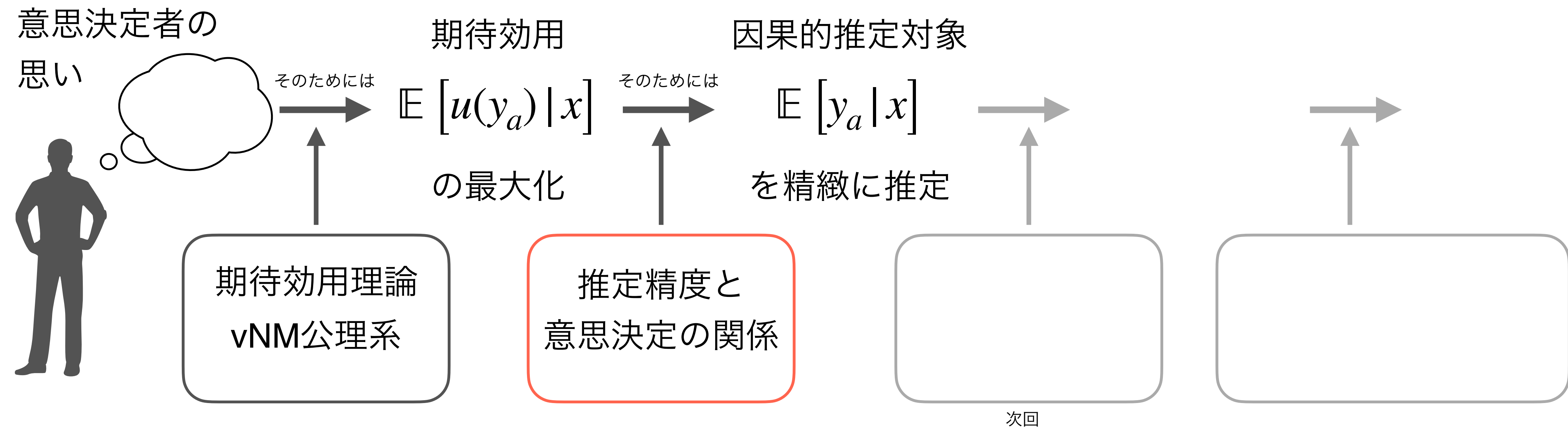
- 意思決定理論から言えること
 - 各行動の結果（潜在結果 y_a ）の効用の期待値 $\mathbb{E}[u(y_a)|x]$ が精緻に推定できれば意思決定にとって十分
- 各行動 a の結果の効用 $u(y_a)$ を改めて y_a と定義
- \Rightarrow 状況 x のもとでの期待効用 $\mathbb{E}[y_a|x]$ の推定さえできればよい
 - 例えば期待効用の分散 $\mathbb{V}[y_a|x]$ は必要ない
- 効用関数が未知の場合？
 - Preference learningなどの研究分野もあるが、企業における意思決定では合理的に定義できるはず



意思決定問題を推定問題に落とし込む

目的（意思決定）を達成する経路の一つに因果推論

- 意思決定は（vNM公理系のもとで）期待効用がわかれば十分
- 期待効用の最大化は因果的推定対象として表現できる
 - 因果的推定対象の推定精度が高ければ良い意思決定が期待できる？



期待効用の推定精度と意思決定の良さの関係（準備）

確率の方策空間 Π での期待効用最大化を仮定

- 期待効用 $\mathbb{E}[y_a | x]$ に誤差があっても実際の意思決定の良さに結びつくか？
 - それを分析するには期待効用の推定を元にどのように意思決定を行うか定義する必要
- ある程度ランダムな行動（方策）の中で期待効用の推定 $f(x, a)$ を最大化する
 - $\hat{\pi}_{\Pi}(a | x) = \arg \max_{\pi \in \Pi} \mathbb{E}_{a \sim \pi(a|x)} [\hat{f}(x, a)]$
 - Π を行動の選択肢集合 \mathcal{A} （有限 $|\mathcal{A}| < \infty$ と仮定）上の確率単体全体 $\Delta(\mathcal{A})$ とすると方策は決定論的
 - Π を狭めれば正則化のような効果により推定誤差の影響を軽減できる（後述）
- 方策の良し悪しは、その方策をとった場合の期待効用で測るのが自然
 - $V(\pi) := \mathbb{E}_x \mathbb{E}_{a \sim \pi(a|x)} \mathbb{E} [y_a]$ （方策価値 Value）

期待効用の推定精度と意思決定の良さの関係

意思決定の悪さは推定誤差と方策誤差で抑えられる

- 真に最適な方策とのギャップを保証する定理 [Tanimoto+ 2021]

- $V(\pi^*) - V(\hat{\pi}) \leq \sqrt{|\mathcal{A}| \cdot \text{MSE}^u(\hat{f}) \cdot \text{ER}_{\Pi}^u(\hat{f})}$

- $\pi^* := \arg \max_{\pi \in \Pi} V(\pi)$: 最適な方策

- $\text{MSE}^u(\hat{f}) := \mathbb{E}_x \left[\frac{1}{|\mathcal{A}|} \sum_{a \in \mathcal{A}} \left(\mathbb{E}[y_a | x] - \hat{f}(x, a) \right)^2 \right]$: 因果推論でよく用いる推定誤差

- 通常の $p(x, a)$ 上での期待値ではなく a に関しては一様 (uniform)

- $\text{ER}_{\Pi}^u(\hat{f}) := \mathbb{E}_x \left[\sum_{a \in \mathcal{A}} \left(\pi^*(a | x) - \hat{\pi}(a | x) \right)^2 \right]$: 方策誤差

- 定義から $\text{ER}_{\Pi}^u(\hat{f}) \leq 2$ 、 $|\mathcal{A}|$ も定数なので、推定誤差 $\text{MSE}^u(\hat{f})$ が小さければ確かに最適な方策に近づく
- しかし行動空間 $|\mathcal{A}|$ が大きければ (最悪ケースの) ギャップも大きくなりがち

- Π を狭めるか、方策誤差を意識した学習により $\text{ER}_{\Pi}^u(\hat{f})$ を下げることでギャップを改善できる [Tanimoto+ 2021]

Tanimoto, Akira, et al. "Regret minimization for causal inference on large treatment space." *AISTATS*. PMLR, 2021.

プラグイン方策の定義とコーシー・シュワルツの不等式から

- 内積を $\langle a, b \rangle = \sum_i a_i b_i$ と表記
 - 期待値は内積 $\mathbb{E}_\pi[y_a] = \sum_a \pi(a|x)y_a = \langle \pi, y \rangle$
- $-V(\hat{\pi}) := -\langle \hat{\pi}, y \rangle$

$$= -\langle \pi^*, y \rangle + \langle \pi^* - \hat{\pi}, y \rangle$$

$$\leq -\langle \pi^*, y \rangle + \underbrace{\langle \pi^* - \hat{\pi}, y - \hat{y} \rangle}_{=: \Delta} + \underbrace{\langle \pi^* - \hat{\pi}, \hat{y} \rangle}_{=: e}$$

$$= -\langle \pi^*, y \rangle + \langle \Delta, e \rangle$$

$$\leq -\langle \pi^*, y \rangle + \|\Delta\|_2 \|e\|_2$$

← $\because \langle \hat{\pi}, \hat{y} \rangle \geq \langle \pi, \hat{y} \rangle \forall \pi \in \Pi$ (定義)
 $\Rightarrow \langle \pi^* - \hat{\pi}, -\hat{y} \rangle \geq 0$

← \because コーシー・シュワルツの不等式
- Π を狭くすると第一項が悪化する代わりに第二項が良化 (小さくなる) のトレードオフ

選択肢が2つだけの場合

結果の差（”効果”）の推定誤差が重要

- ある行動を行う ($a=1$) か行わない ($a=0$) かの二択 ($|\mathcal{A}| = 2$) の場合

$$\langle \overline{\pi^* - \hat{\pi}}, y - \hat{y} \rangle = \Delta_1 (y_1 - \hat{y}_1) + \Delta_0 (y_0 - \hat{y}_0)$$

- $\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_0 \end{pmatrix}$

- 確率ベクトルの差なので、合計はゼロ ($\Delta_1 + \Delta_0 = 0$) より

- (右辺) $= \Delta_1 (y_1 - \hat{y}_1 - y_0 + \hat{y}_0)$

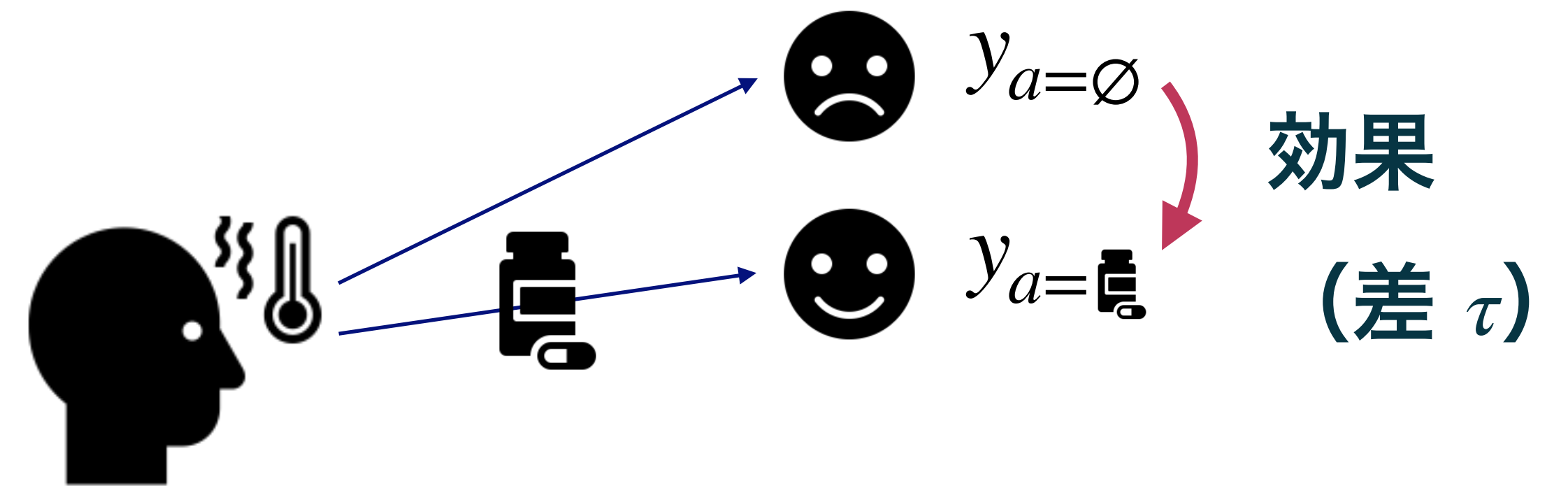
- ここで、この行動の”効果” $\tau := y_1 - y_0$ とおくと、

- (右辺) $= \Delta_1 (\tau - \hat{\tau})$

- x に関して期待値をとると、

- $$\mathbb{E}_x \left[\Delta_1(x) (\tau(x) - \hat{\tau}(x)) \right] \leq \sqrt{\mathbb{E}_x \left[(\Delta_1(x))^2 \right] \underbrace{\mathbb{E}_x \left[(\tau(x) - \hat{\tau}(x))^2 \right]}_{=: \text{PEHE}}}$$

- $(\Delta_1)^2 \leq 1$ より、 τ のMSEである**PEHE** (Precision on Estimating Heterogeneous Effect) は意思決定性能の保証となる



まとめ (再掲)

目的 (意思決定) を達成する経路の一つに因果推論

- 意思決定は (vNM公理系のもとで) 期待効用がわかれば十分
- 期待効用を因果推論で推定すれば、因果推定精度 (MSE^uや PEHE) が高ければ、それに従った意思決定の良さも保証される

