統計的機械学習　（応用計量分析２）第３回

意思決定と因果推論の精度
因果推論（因果機械学習）の問題設定（参考pdf 3章）
　必要な仮定、実験・評価方法、公開データ

注意）機械学習分野における典型的な問題設定について解説する
**　　統計分野では若干異なる**

本日の内容

出欠コード

xxxx

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）
- **3. 因果推論と意思決定の関係、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、２：二重機械学習
- 6. CATEの推定法３：決定木と決定森、深層学習に基づく方法
- 7. 構造的因果モデルとバックドア基準
- 8. 因果探索
- 9. 発展的な因果推論手法：フロントドア調整、操作変数法
- 10. 発展的な因果推論手法：代理変数法、回帰不連続デザイン
- 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

期待効用の推定精度と意思決定の良さの関係（準備）

確率的方策空間Πでの期待効用最大化を仮定

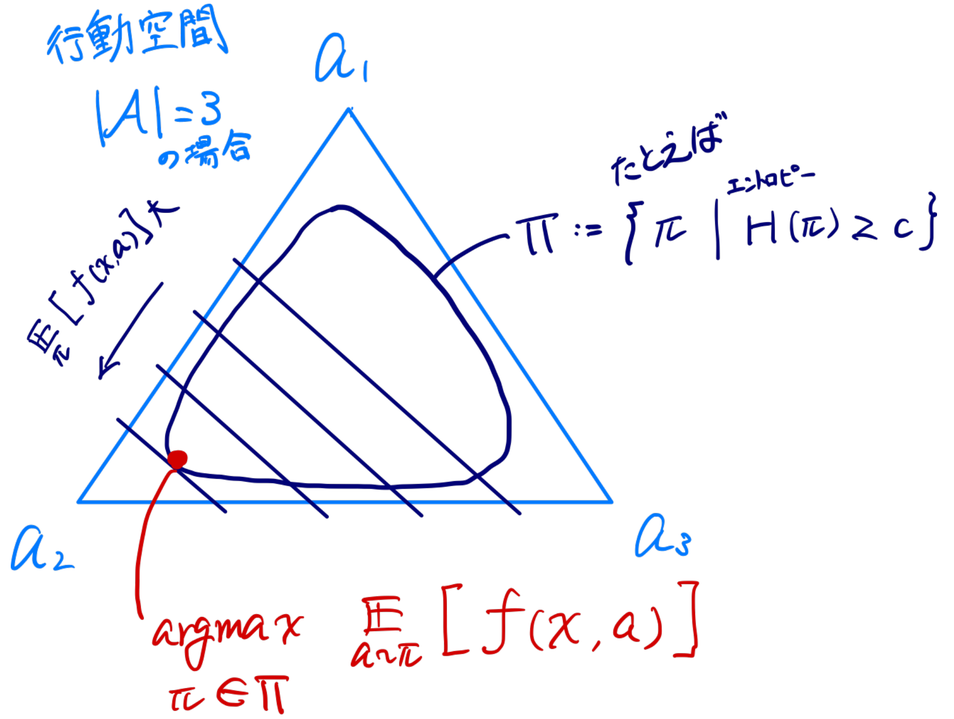
- 期待効用 $\mathbb{E}[y_a \mid x]$ に誤差があっても実際の意思決定の良さに結びつくか？
  - それを分析するには期待効用の推定を元にどのように意思決定を行うか定義する必要
- ある程度ランダムな行動（方策）の中で期待効用の推定 $\hat{f}(x,a)$ を最大化する
  - $\hat{\pi}_{\Pi}(a \mid x) = \arg\max_{\pi \in \Pi} \mathbb{E}_{a \sim \pi(a|x)} \left[\hat{f}(x,a) \right]$
  - Πを行動の選択肢集合$\mathcal{A}$（有限$|\mathcal{A}| < \infty$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
  - $V(\pi) := \mathbb{E}_x \mathbb{E}_{a \sim \pi(a|x)} \mathbb{E}\left[y_a \mid x \right]$　（方策価値 Value）

（参考）ソフトな意思決定方策を選ぶイメージ（参考pdf 7.2節）

エントロピーの下限を課すと、行動を確率的に選ぶ方策に

- 制約がなければ決定論的な最適方策を選べる（同率なら1つを選ぶ）
  - $\hat{a}(x) \in \arg\max_{a \in \mathcal{A}} \hat{f}(x,a), \qquad \hat{\pi}(a \mid x) = \mathbf{1}\{a = \hat{a}(x)\}$
- 方策空間を絞った中での最適化も考えておく
  - $\hat{\pi}(\cdot \mid x) \in \arg\max_{p \in \Pi_c(x)} \mathbb{E}_{a \sim p}\left[\hat{f}(x,a)\right]$
    - 確率分布を選ぶことは、行動の選択肢が3つの場合を考えると
      三角形の内部から1点を選ぶことと対応付けられる（右図）
- 例えば Π がエントロピー制約の場合
  - $\Pi_c(x) := \{p \in \Delta(\mathcal{A}) \mid H(p) \geq c\}$
    - エントロピー $H(p) := \mathbb{E}_p\left[-\log(p)\right]$
  - 制約が有効な場合、解はSoftmaxで表せる

    $\hat{\pi}(a \mid x) \propto \exp\left(\beta_c(x)\hat{f}(x,a)\right)$



行動が3つなら、確率分布は

各要素が非負・合計1の3次元ベクトル。

三角形の境界を含む領域に対応する。

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

- 真にベストな方策とのギャップを保証する定理 [Tanimoto+ 2021] （証明は次）
  - $V(\pi^*) - V(\hat{\pi}) \leq \sqrt{|\mathscr{A}| \cdot \mathrm{MSE}^u(\hat{f}) \cdot \mathrm{ER}^u_\Pi(\hat{f})}$
    - $\pi^* := \arg\max_{\pi \in \Pi} V(\pi)$ ：最適な方策
    - $\mathrm{MSE}^u(\hat{f}) := \mathbb{E}_x \left[\frac{1}{|\mathscr{A}|} \sum_{a \in \mathscr{A}} \left(\mathbb{E}\left[y_a \mid x \right] - \hat{f}(x, a) \right)^2 \right]$ ：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）
    - $\mathrm{ER}^u_\Pi(\hat{f}) := \mathbb{E}_x \left[\sum_{a \in \mathscr{A}} \left(\pi^*(a \mid x) - \hat{\pi}(a \mid x) \right)^2 \right]$ ：方策誤差
- 定義から $\mathrm{ER}^u_\Pi(\hat{f}) \leq 2$ 、$|\mathscr{A}|$も定数なので、推定誤差 $\mathrm{MSE}^u(\hat{f})$ が小さければ確かにベストな方策に近づく
- しかし行動空間$|\mathscr{A}|$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 $\mathrm{ER}^u_\Pi(\hat{f})$ 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.

証明

出欠コード

xxxx

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 $\mathbb{E}_\pi[y_a] = \sum_a \pi(a \mid x) y_a = \langle \pi, y \rangle$ $\leftarrow y := (\ldots, y_a, \ldots)$

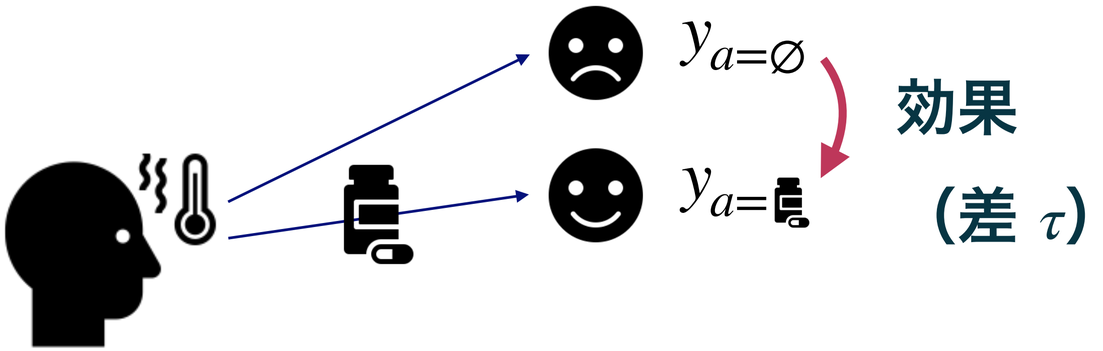
$$
\begin{aligned}
-V(\hat{\pi}) &:= -\langle \hat{\pi}, y \rangle \\
&= -\langle \pi^*, y \rangle + \langle \pi^* - \hat{\pi}, y \rangle \\
&\leq -\langle \pi^*, y \rangle + \langle \underbrace{\pi^* - \hat{\pi}}_{=:\Delta}, \underbrace{y - \hat{y}}_{=:e} \rangle \qquad \leftarrow \because \langle \hat{\pi}, \hat{y} \rangle \geq \langle \pi, \hat{y} \rangle \forall \pi \in \Pi \text{（定義）} \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \Rightarrow \langle \pi^* - \hat{\pi}, -\hat{y} \rangle \geq 0 \\
&= -\langle \pi^*, y \rangle + \langle \Delta, e \rangle \\
&\leq -\langle \pi^*, y \rangle + \|\Delta\|_2 \|e\|_2 \qquad \leftarrow \because \text{コーシー・シュワルツの不等式}
\end{aligned}
$$

- 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

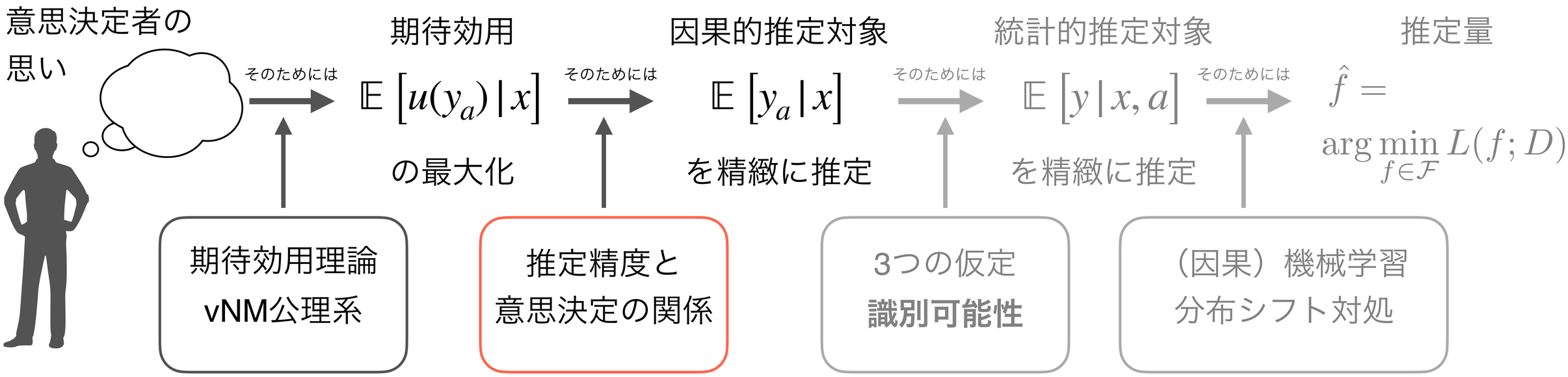
- ある行動を行う(a=1)か行わない(a=0)かの二択($|\mathcal{A}| = 2$)の場合
  - $\langle \underbrace{\pi^* - \hat{\pi}}_{\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_0 \end{pmatrix}}, y - \hat{y} \rangle = \Delta_1 \left(y_1 - \hat{y}_1 \right) + \Delta_0 \left(y_0 - \hat{y}_0 \right)$
  - 確率ベクトルの差なので、合計はゼロ $(\Delta_1 + \Delta_0 = 0)$より
  - (右辺) $= \Delta_1 \left(y_1 - \hat{y}_1 - y_0 + \hat{y}_0 \right)$
  - ここで、この行動の”効果” $\tau := y_1 - y_0$ とおくと、
  - (右辺) $= \Delta_1 \left(\tau - \hat{\tau} \right)$
- x に関して期待値をとると、
  - $\mathbb{E}_x \left[\Delta_1(x) \left(\tau(x) - \hat{\tau}(x) \right) \right] \leq \sqrt{\mathbb{E}_x \left[\left(\Delta_1(x) \right)^2 \right] \underbrace{\mathbb{E}_x \left[\left(\tau(x) - \hat{\tau}(x) \right)^2 \right]}_{=:\mathrm{PEHE}}}$
  - $(\Delta_1)^2 \leq 1$ より、τ のMSEである**PEHE**（Precision in Estimating Heterogeneous Effects）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

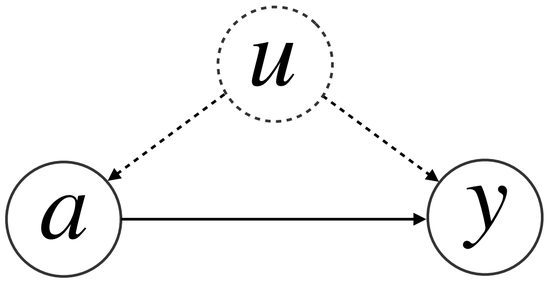
- 意思決定は（vNM公理系のもとで）期待効用がわかれば十分
- 期待効用を因果推論で推定すれば、因果推定精度（MSE^uやPEHE）が高ければ、それに従った意思決定の良さも保証される



次回

記法一覧

- x ・・・ 背景因子、確率変数一般
- x^n ・・・ n番目のデータ点のx。nはサンプルインスタンス番号
- a ・・・ 行動（意思決定変数）
- $\mathcal{A}$ ・・・ (花文字のA) 行動の候補の集合 $a \in \mathcal{A}$
- $|\mathcal{A}|$ ・・・ 集合$\mathcal{A}$のサイズ（有限離散集合を仮定）
- y ・・・ 結果、予測対象
  - y_a ・・・ 行動aに対する潜在結果
- $\hat{y}$ ・・・ y の推定値
- ℓ ・・・ 損失、損失関数、負の効用（嬉しくなさ、最小化したいもの）
- $a \perp\!\!\!\perp b | S$ ・・・ 確率変数 a と　bが変数集合 S の条件付きのもとで独立　（Sは空集合でもよい）
- $(a_i)_i = (\ldots, a_i, \ldots)$：ベクトルの添字表記
- $\prod_i a_i := a_1 \times a_2 \times \cdots$
- $\varnothing$ ・・・ 空集合
- $a \propto b$ ・・・ aはbに比例する
- グラフィカルモデル
  - ノードは確率変数、破線ノードは未観測変数
  - 矢印は因果関係、破線矢印は因果関係がある可能性、矢無し辺は関連性
  - pa_i ・・・ i 番目の変数の親変数群



（補足）因果推論の重要性

出欠コード

xxxx

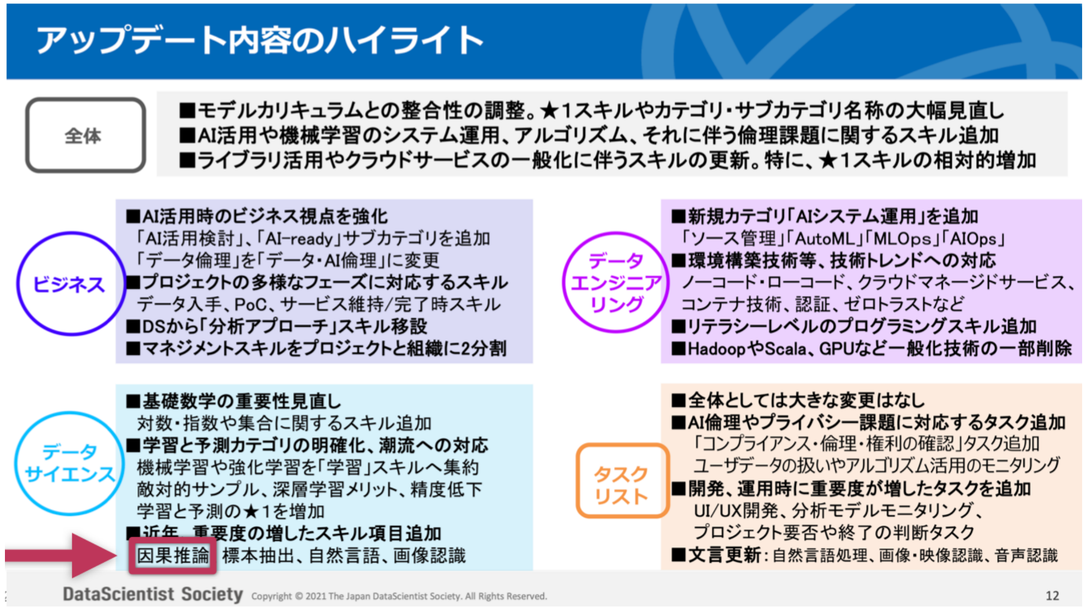
2020年頃から因果推論への注目が急速に高まっている

“Causal inference” の検索量は増加傾向



2022/7

データサイエンティスト協会のスキル定義に追加 (’21/11)





関連書籍も
2020年頃
から急増

2021年
ノーベル
経済学賞が
因果推論関係



Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

デイビッド・カード教授

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

ヨシュア・アングリスト教授

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach.

グイド・インベンス教授

出欠コード

xxxx

（補足）因果推論の応用状況

各科学の領域から企業へも活用が広がっているが、ドメイン知識も重要でハードルが高い状況

元々は経済学、疫学、医学、社会学等の各領域で専門家が行ってきた。
近年では、テクノロジー企業を中心に企業でも活用が広がっている。
ただし、専門の高度な分析部隊を抱えていない企業への浸透＝民主化は
これから進む段階と思われる。
“

（５）科学技術的課題

❷自動化による分析者の負担の軽減

因果推論を行うためには、データだけでなく領域知識が必要である。（中略）個々の技術は各分野で行われているが、それを効果的に結び付け、一つの因果分析システムとして、分析者が比較的手軽にアクセス可能な状態にすること肝要であろう。



各種AI技術の研究及び活用動向をまとめたJSTの報告書

⇨データ分析者にとって今後重要

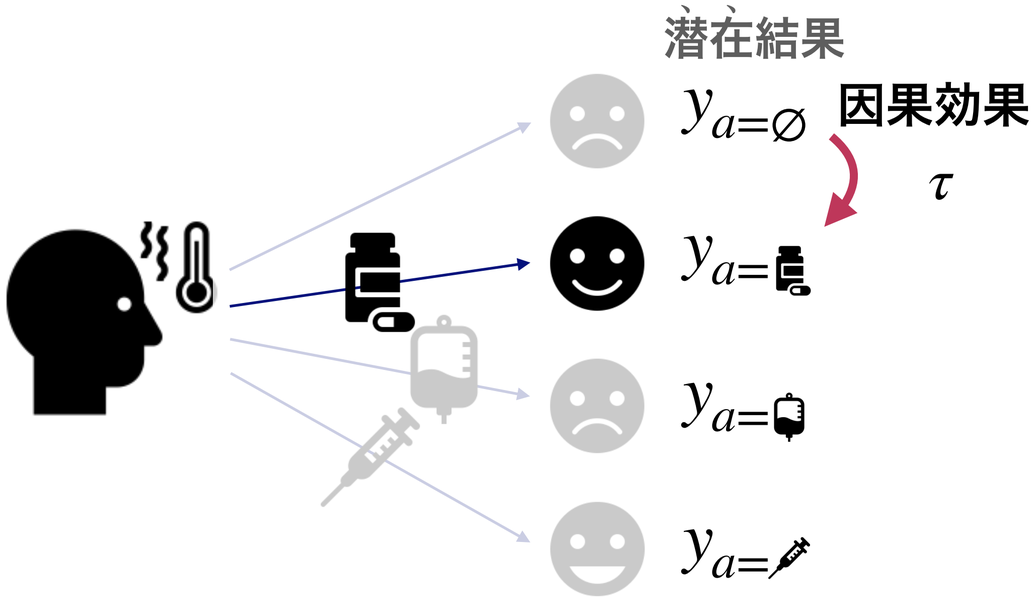
意思決定問題の捉え方：Rubinの**潜在結果**モデル (**Potential Outcome**; PO)

実際に取らなかった行動にも潜在的な結果を想定し変数を拡張することで確率モデルとして意思決定問題を記述できる

- 介入は通常の確率の言葉では表現できない
- 各行動をとった世界線ごとの結果＝潜在結果に変数を拡張
  - 実際取らなかった（反事実的）行動の結果は**欠損**しているとみなす → **欠損データからの学習**の問題
- **推定対象（Estimand）** $\mathbb{E}[y_a|x]$ や $\tau(x) = \mathbb{E}[y_1 - y_0|x]$ がデータが無限にあれば特定できる条件を**識別可能性**という
  - =推定対象が観察データ分布から一意に計算可能

年齢 x	処方 a	潜在結果 y_a				治癒 y
		∅	💊	🩸	💉	
23	∅	1	–	–	–	1
57	💊	–	1	–	–	1
43	🩸	–	–	0	–	0
72	💉	–	–	–	0	0

拡張



Rubin因果モデル (RCM) ともいう

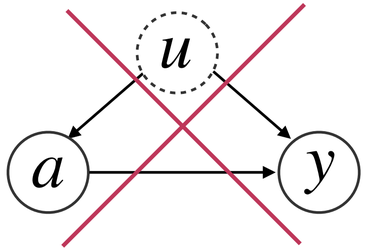
識別可能性を保証する典型的な仮定

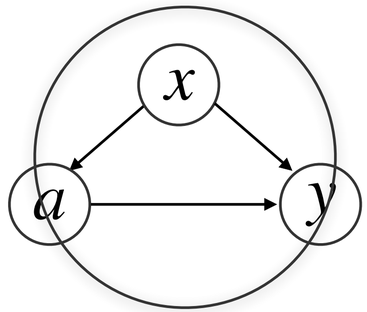
出欠コード

xxxx

以下の3つの仮定のもとで因果効果は識別可能

1. **SUTVA** (Stable Unit Treatment Value Assumption) サトヴァ
   - 処置対象間の干渉がない（自身への介入行動からのみ影響を受ける）：$y^i_{a^1,\ldots,a^n} = y^i_{a^i} \quad \forall i, \forall (a^1, \ldots, a^n)$
     - NG) あるSNSユーザへの広告配信アルゴリズムの変更が、
       その人の反応を通してフォロワーに影響する → 漏出効果
   - 各行動は1種類の処置に対応
     - NG) 同じ「薬Aを投与する」行動でも、子どもには1錠、Bさんには2錠
2. **無視可能性** Ignorability / 未観測交絡因子の不存在: $y_{a'} \perp\!\!\!\perp a \mid x \quad \forall a'$
   - 観測されていない交絡因子の対処はできない
3. **正値性** Positivity / Overlap: $\mu(a \mid x) > 0 \quad \forall a, x$
   - 観測されない行動パターンの学習はできない
- 上記3仮定が満たされれば $\mathbb{E}[y_a \mid x]$ や $\tau(x)$ が識別可能
  - 満たされない場合の対処法は第9回以降。別のEstimandなら推定可能、といった場合もある





具体的な推定手法の一例

傾向スコアによる逆確率重み付け（IPW）

- 教師あり学習問題（データの欠損がない問題）の損失関数を変形

$$L = \frac{1}{N}\sum_{n}^{N}\sum_{a\in\mathcal{A}} \ell_a^n \qquad \ell_a^n = -y_a^n \log \hat{y}_a^n \text{ (交差エントロピー) や } (y_a^n - \hat{y}_a^n)^2 \text{ など}$$

$$= \frac{|\mathcal{A}|}{N}\sum_{n}^{N} \mathbb{E}_{a\sim \mathrm{Unif}(\mathcal{A})}[\ell_a^n]$$

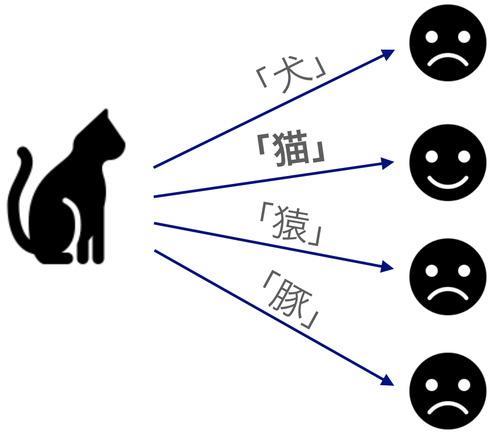
一様分布 ($=1/|\mathcal{A}|$)

$$= \frac{|\mathcal{A}|}{N}\sum_{n}^{N} \mathbb{E}_{a\sim\mu(a|x^n)}\left[\frac{\mathrm{Unif}(\mathcal{A})}{\mu(a\,|\,x^n)}\ell_a^n\right]$$

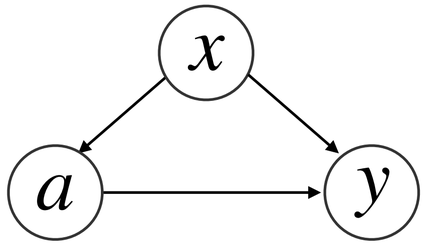
  - **傾向スコア** $\mu(a\,|\,x)$: 過去の意思決定者の選択分布（条件付き確率分布）
- 最後の期待値はデータの従う分布と同じなので、データで近似できる
- μ は結果 y 以外のデータ $\{(x^n, a^n)\}_{n=1}^N$ から教師あり学習で推定できる
- 推定値 $\hat{\mu}(a\,|\,x)$ を代入、期待値 $\mathbb{E}_{a\sim\mu(a|x^n)}$ データで置き換えて

$$\hat{L}_{\mathrm{IPW}}(f; D) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{\ell_{a^n}^n}{\hat{\mu}(a^n\,|\,x^n)}$$

- Inverse Probability Weighting using Propensity (傾向) Score (**IPW法**)



前提：



出欠コード

xxxx

LETUSで実施