

氏 名 Pengzhou WU

学位(専攻分野) 博士(統計科学)

学位記番号 総研大甲第 2356 号

学位授与の日付 2022 年 9 月 28 日

学位授与の要件 複合科学研究科 統計科学専攻
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 Treatment Effect Estimation and Bivariate Causal Discovery
via Nonlinear ICA

論文審査委員 主 査 日野 英逸
統計科学専攻 教授
二宮 嘉行
統計科学専攻 教授
福水 健次
統計科学専攻 教授
今泉 允聡
東京大学 大学院総合文化研究科 准教授

(様式3)

博士論文の要旨

氏名 Pengzhou WU

論文題目 Treatment Effect Estimation and Bivariate Causal Discovery via Nonlinear ICA

Causality—i.e., asking and answering “Why?”—is fundamental in fields of science. Roughly speaking, the study of causality concerns what causal questions can be reduced to statistical ones, and under what assumptions. Due to the scarcity of prior causal knowledge, it is usually hard to making convincing causal assumptions and testing plausibility of them. Therefore, randomized controlled trials (RCTs) becomes the golden standard of studies in causality. While RCTs control biases through randomization, they often have ethical and practical issues, or suffer from expensive costs. Thus, solving causal problems from observational data is important.

Recent advance in information collection and storage have made a huge amount of observational data available for researchers and policy makers in those different fields. The scientific communities have considerable interests to exploit the so-called big data to solve causal problems, while they face new challenges at the same time. Public databases or data collected from the web are unprecedentedly large, people have little intuition about what types of bias a dataset can suffer from—the more plentiful data makes it harder to understand and, consequently, harder to come up and validate causal assumptions. On the other hand, empowered by the increasing collection of big data and growth in computing power, machine learning and artificial intelligence (AI), particularly deep learning, have made remarkable progress, surpassing human performance in many tasks such as object recognition, machine translation, and reading comprehension. Given its origin in nonparametric statistics and connectivism, main stream machine learning systems are based on plain statistical associations. However, the ability of causal reasoning and learning is considered as a significant ingredient of human-level intelligence and, as argued by some, can serve as the foundation of AI or help to solve several challenge problems in machine learning such as robustness, reusability, and interpretability. Thus, causality and machine learning should go hand-in-hand for scientific discovery and decision-making. In this thesis, we develop new machine learning methods for causal effect estimation and causal discovery, the two major problems in causality.

For causal effect, we discuss the identification and estimation of treatment effects under limited overlap; that is, when subjects with certain features belong to a single treatment group. We use a latent variable to model a prognostic score which is widely used in biostatistics and sufficient for treatment effects; i.e., we build a generative prognostic model. We prove that the latent variable recovers a prognostic score, and the model identifies individualized treatment effects. The model is then learned as Intact-VAE—a new type of variational autoencoder (VAE). We derive the treatment effect error bounds that enable representations balanced for treatment groups conditioned on individualized features. The proposed method is compared with recent methods using (semi-)synthetic datasets. Moreover, experiments show state-of-the-art performance under diverse settings, including unobserved confounding. We also discuss (possible) theoretical extensions to unobserved confounding. For causal discovery, we focus on the problem of bivariate causal discovery. Based on recent

developments in nonlinear independent component analysis (ICA), we train general nonlinear causal models that are implemented by neural networks and allow nonadditive noise. Further, we build an ensemble framework, namely Causal Mosaic, which models a causal pair by a mixture of nonlinear models. We compare this method with other recent methods on artificial and real world benchmark datasets, and our method shows state-of-the-art performance.

In Chapter 3, we study the identification (Sec. 3.1) and estimation (Sec. 3.2) of individualized treatment effects under limited overlap. The main contributions of this chapter are: 1. treatment effect identification under limited overlap of X , via prognostic scores and an identifiable model; 2. bounds on individualized treatment effect error, which justify our conditional BRL; 3. a new regularized VAE, β -Intact-VAE, realizing the identification and conditional balance; 4. experimental comparison to the state-of-the-art methods on (semi-)synthetic datasets. In Chapter 4, we challenge the problem of estimating treatment effects under unobserved confounding. The main contributions of this chapter are: 1. experimental comparison to state-of-the-art methods under diverse settings; 2. discussions of further theoretical developments and principled treatment effect estimation using VAEs. In Chapter 5, we study the problem of cause-effect inference and address the three limitations in previous work mentioned above. The main contributions of this chapter are: 1. two novel cause-effect inference rules with identifiability proofs; 2. an ensemble framework that works for real world datasets with only limited labeled pairs; 3. a neural network structure designed for causal-effect inference; 4. state-of-the-art performance on a real-world benchmark dataset.

博士論文審査結果

Name in Full
氏名 Pengzhou WU

Title
論文題目 Treatment Effect Estimation and Bivariate Causal Discovery via Nonlinear ICA

2022年8月9日午後3時から約2時間にわたり Pengzhou WU 氏の博士論文審査委員会を開催した。出願者による1時間の公开发表による概要説明と質疑応答，さらに約1時間の審査委員のみによる審査を行った結果，審査委員会は本論文が学位の授与に値すると判断した。

[論文の概要]

提出された論文は，機械学習的アプローチによる因果推論の方法を論じたもので，英文で書かれており全7章146頁からなる。

1章は本論文の序章であり，因果推論の一般的な研究に関して述べられた後，本論文の主題である，因果効果推定と，2変数からの因果方向推定の問題が説明され，本論文の貢献が簡潔にまとめられている。

2章は準備であり，本論文で用いられる用語の定義や問題の定式化がなされている。因果効果推定に関しては，推定に困難を生じる状況として，介入が有る場合と無い場合に対して共変量の分布の台が一致しない状況 (**limited overlap**) が論じられている。これに対応する方法として，因果効果に対する十分統計量である **prognostic score** が紹介されている。また，2変数間の因果方向推定に関しては，潜在変数を用いた因果方向の定式化を述べている。さらに，本論文で用いられる非線形独立成分分析を紹介している。

3章は過去の関連研究のレビューである。因果効果推定と因果関係発見の過去の研究に関して文献を挙げて説明がなされている。

4章は，**limited overlap** の状況下での因果効果推定に対して，変分オートエンコーダ (VAE) を発展させた **Intact-VAE** モデルを用いる方法を提案している。この方法では，**limited overlap** の状況にある共変量を **Intact-VAE** を用いて低次元の潜在変数に写像することにより **overlap** の問題の解決をはかっている。加法ノイズモデルによるデータ生成を仮定すると，ある種の条件の下，**Intact-VAE** の潜在変数が **prognostic score** を与えることを示し，因果効果の推定が可能であることを理論的に保証している。いくつかのデータに対して実験を行った結果，既存手法と同等以上の推定精度が得られることが示されている。

5章では，観測されない交絡因子が存在するという，さらに困難な状況における **Intact-VAE** の性質を論じている。数値実験によって，その場合においても **Intact-VAE** が既存手法に比べて良好な推定結果を与えることを示し，考察を加えている。

6章は，2変数のデータが与えられた場合の因果方向推定を論じている。因果ネットワークの推定では条件付独立性を根拠にした方法が伝統的であるため3変数以上を仮定する

ことが一般的であったが、近年、2変数の観測から因果方向を推定する研究が盛んになっている。本論文では、因果関係が既知である2変数の観測データセットを訓練データセットとして多数用意することにより、データから2変数因果関係を学習するアプローチを提案している。提案法では、近年発展した非線形独立成分分析法により潜在変数を推定する写像を学習することにより、類似の因果関係を持つ訓練データセットに基づいて、与えられた2変数データの因果方向を推定している。標準的な2変数因果関係データに適用した結果、既存手法による最良の結果と同等以上の判別性能を持つことが示されている。

7章は論文のまとめである。

[論文の評価]

因果推論という統計科学の伝統的課題に対し、深層学習などの現代的な機械学習的アプローチを適用した本論文は、**limited overlap** という難しい状況における因果効果推定と、2変数からの因果方向推定の課題に対して、それぞれ新しくかつ効果的な方法を提案し、それらの理論的性質を示すとともに実験的に良好な性能を確認しており、統計科学の博士論文として十分な意義を持つと考える。

なお、4章の内容をまとめた論文が査読付き国際会議 **International Conference on Learning Representations 2022** に、6章の内容をまとめた論文が査読付き国際会議 **International Conference on Artificial Intelligence and Statistics 2020** に採択されている。