

Additive Noise Models: Identifiability Theorems, Learning Algorithms, Hidden Variables and Time Series

بهراد منیری

فهرست مطالب

۱	۱	مقدمه
۲	۲	تعریف مسئله
۲	۳	قضایای قابل شناسایی بودن
۲	۱.۳	حالت دو متغیره
۵	۲.۳	حالت چند متغیره
۶	۳.۳	Post Non-Linear Models
۷	۴.۳	مقایسه‌ی نتایج
۷	۴	الگوریتم‌های یادگیری
۷	۱.۴	الگوریتم RESIT
۸	۲.۴	روش GDS و Brute Force
۹	۳.۴	مقایسه‌ی الگوریتم‌های RESIT, Brute Force و GDS با سایر الگوریتم‌ها
۹	۱.۳.۴	حالت SCM خطی
۹	۲.۳.۴	حالت SCM غیرخطی
۱۰	۳.۳.۴	بررسی داده‌های واقعی؟!
۱۱	۵	متغیرهای پنهان
۱۱	۱.۵	روش ساده لوحانه
۱۱	۲.۵	الگوریتم ICAN
۱۱	۶	سری‌های زمانی

۱ مقدمه

در این پروژه به بررسی مدل‌های نویز جمعی، Additive Noise Models، خواهیم پرداخت. به طور خاص، قضایای قابل شناسایی بودن جهت درست علی را بررسی خواهیم کرد، مروری بر الگوریتم‌های یادگیری ساختار علی خواهیم داشت و همچنین درباره‌ی مدل‌های نویز جمعی در وجود متغیرهای پنهان و در سری‌های زمانی بحث خواهیم کرد.

مدل‌های نویز جمعی از اهمیت بالایی در استنتاج علی برخوردارند. این روش که معادل جست و جو در یک فضای توابع محدود شده است شباهت زیادی با یادگیری ماشین پیدا می‌کند. وجود قضایای قابل شناسایی بودن گراف با داشتن توزیع مشاهداتی که به ما امکان دستیابی به اطلاعاتی بیش از کلاس هم‌ارزی مارکوف گراف مولد را می‌دهد، یکی از جذابیت‌های مدل‌های نویز جمعی است [۲]. الگوریتم‌های بهینه‌تری نسبت به الگوریتم‌هایی مانند PC برای یادگیری ساختار علی SCM هایی که در آن‌ها مدل‌های نویز جمعی وجود دارد [۶]. به نظر می‌رسد که در جهان واقعی، خیلی از پدیده‌ها از مدل نویز جمعی پیروی می‌کنند [۶، ۷]. به طرز شگفت‌آوری، مدل‌های مبتنی بر نویز جمعی در یادگیری سری‌های زمانی نیز توانسته‌اند به نتایج تجربی امیدوارکننده‌ای دست پیدا کنند [۵].

۲ تعریف مسئله

یک SCM، C ، در نظر بگیرید. می‌گوییم این SCM از مدل نوینز جمعی پیروی می‌کند اگر

$$S_j : f_j = f_j(\mathbf{PA}_j) + N_j, \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (1)$$

که در آن \mathbf{PA}_j مجموعه‌ی والدین X_j هستند و متغیرهای نوینز، N_j دارای چگالی احتمالی اکیداً مثبت می‌باشند و مستقل‌اند. همچنین در همه‌ی بخش‌ها فرض می‌شود گراف مولد داده‌ها یک DAG است مگر به طور صریح خلاف این موضوع ذکر شود.

۳ قضایای قابل‌شناسایی بودن

در این بخش به بررسی مدل‌های نوینز جمعی در حالتی که هیچ Common Cause مشاهده‌نشده‌ای در سیستم وجود ندارد می‌پردازیم. در مدل‌های نوینز جمعی، هدف محدود کردن مجموعه‌ی توابعی است که در آن به جست‌وجوی توابع تولید کننده SCM می‌گردیم. مراجع ما در این بخش، مقالات [۲]، [۶] و [۷] هستند. این مقالات به بررسی قضایای Identifiability در مدل‌های نوینز جمعی پرداخته‌اند. ما در این بخش به بررسی قضایای مطرح شده در این مقالات پرداخته و در آخر محدودیت‌های آن‌ها را با هم مقایسه می‌کنیم.

قضیه ۱.۳. در مدل‌های نوینز جمعی، شرط *Causal Minimality* معادل این است که توابع f_j نسبت به هیچ یک از متغیرهایشان ثابت نباشند.

۱.۳ حالت دو متغیره

Hoyer et al. در مقاله‌ی [۲] قضیه‌ی زیر را در مورد قابل شناسایی بودن ANM در حالت دو متغیره اثبات می‌کند. در ادامه به بررسی دقیق این قضیه پرداخته و بحث خواهیم کرد که در چه شرایطی، در یک مدل جمعی، از روی چگالی احتمال مشترک قادر به شناسایی کامل جهت علی نیستیم.

قضیه ۲.۳. فرض کنید داشته باشیم

$$\begin{cases} X = N_x \\ Y = f(X) + N_y \end{cases}$$

اگر برای هر x, y با شرط $\nu''(y - f(x))f'(x) \neq 0$ حل معادله‌ی دیفرانسیل زیر نباشد:

$$\xi''' = \xi'' \left(-\frac{\nu''' f'}{\nu''} + \frac{f''}{f'} \right) - 2\nu'' f'' f' + \nu' f''' + \frac{\nu' \nu''' f'' f'}{\nu''} - \frac{\nu' (f'')^2}{f'}, \quad (2)$$

که در آن $\xi := \log(p_X)$ و $\nu := \log(p_{N_Y})$ است، مدلی با نوینز جمعی پیوسته در جهت دیگر وجود نداشته و جهت علی، با داشتن توزیع مشترک متغیرها قابل شناسایی است. در شرط فوق، آرگومان توابع و مشتق توابع ν ، ξ و f به ترتیب $x - f(x)$ ، x و x هستند.

اثبات. فرض کنید که گراف قابل شناسایی نباشد و دو گراف با جهت‌های متضاد بر این داده‌ها قابل برازش باشد. در این صورت خواهیم داشت:

$$p(x, y) = p_n(y - f(x))p_x(x) = p_{\bar{n}}(x - g(y))p_y(y). \quad (3)$$

π را برابر تابع log-likelihood در نظر بگیرید:

$$\pi(x, y) := \log p(x, y) = \nu(y - f(x)) + \xi(x), \quad (4)$$

از طرف دیگر، بنا بر معادله‌ی (۳) داریم:

$$\pi(x, y) = \tilde{\nu}(x - g(y)) + \eta(y) \quad (5)$$

با مشتق گیری از این معادله خواهیم داشت:

$$\frac{\partial^2 \pi}{\partial x \partial y} = -\tilde{\nu}''(x - g(y))g'(y) \quad , \quad \frac{\partial^2 \pi}{\partial x^2} = \tilde{\nu}''(x - g(y)) .$$

در نتیجه داریم:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \pi / \partial x^2}{\partial^2 \pi / (\partial x \partial y)} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} g'(y) = 0 . \quad (۶)$$

از معادله ی (۴) به دست می آید:

$$\frac{\partial^2 \pi}{\partial x \partial y} = -\nu''(y - f(x))f'(x) , \quad (۷)$$

و همچنین

$$\frac{\partial^2 \pi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} (-\nu'(y - f(x))f'(x) + \xi'(x)) = \nu''(f')^2 - \nu'f'' + \xi'' , \quad (۸)$$

که در آن آرگومان ها برای خوانایی بیشتر حذف شده اند. از معادله ی (۷) و (۸)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\frac{\partial^2 \pi}{\partial x^2}}{\frac{\partial^2 \pi}{\partial x \partial y}} \right) = -2f'' + \frac{\nu'f'''}{\nu''f'} - \xi''' \frac{1}{\nu''f'} + \frac{\nu'\nu'''f''}{(\nu'')^2} - \frac{\nu'(f'')^2}{\nu''(f')^2} - \xi'' \frac{\nu'''}{(\nu'')^2} + \xi'' \frac{f''}{\nu''(f')^2} .$$

بر اساس معادله ی (۶)، عبارت فوق برابر صفر است یعنی:

$$\xi''' = \xi'' \left(-\frac{\nu'''f'}{\nu''} + \frac{f''}{f'} \right) - 2\nu''f''f' + \nu'f''' + \frac{\nu'\nu'''f''f'}{\nu''} - \frac{\nu'(f'')^2}{f'}$$

با بازنویسی این معادله بر حسب توابع اصلی مساله داریم:

$$p_x''' = p_x''p_n''f' \left(-\frac{p_n'''}{(p_n'')^2} + \frac{f''}{p_n''(f')^2} \right) + p_n''f' \left(-2f'' + \frac{p_n'f'''}{p_n''f'} + \frac{p_n'p_n''f''}{(p_n'')^2} - \frac{p_n'(f'')^2}{p_n''(f')^2} \right) .$$

□

سوال مهمی که در این مطرح می شود این است که در چه شرایطی، قادر به تشخیص جهت از روی چگال مشترک نیستیم. قضیه ی زیر به ما می گوید که در صورتی که به صورت کاملاً تصادفی از مدل های نوین جمعی یک مدل را انتخاب کنیم، احتمال قابل شناسایی نبودن جهت علی صفر است.

قضیه ۳.۳. اگر نویزها گاوسی باشند، یعنی $\xi''' = \nu''' = 0$ ، مدل نوین جمع شونده در هر دو جهت وجود دارد اگر f خطی باشد.

□

اثبات. نتیجه ی مستقیم قضیه ی (۲.۳).

قضیه ۴.۳. اگر برای مجموعه ی توابع f و توزیع نویزهای خارجی داده شده، برای یک y خاص، $v''(y - f(x))f'(x) = 0$ شمارا جواب داشته باشد، یا جوابی نداشته باشد، توزیع \mathbf{X} در یک فضای سه بعدی زندگی می کند.

از آنجا که مجموعه ی توزیع های پیوسته بی نهایت بعدی است، برای «اکثر» مدل های نوین جمعی، جهت علی قابل شناسایی است.

اثبات. y فیکس ای در نظر بگیرید به طوری که $\nu''(y - f(x))f'(x) \neq 0$ در همه ی x ها به جز تعدادی شمارا برقرار باشد. برای هر ν, f داده شده، بنا بر قضیه ی ۲.۳ یک معادله ی دیفرانسیل برای ξ به دست می آوریم:

$$\xi'''(x) = \xi''(x)G(x, y) + H(x, y) , \quad (۹)$$

که در آن H و G برابرند با

$$G := -\frac{\nu''' f'}{\nu''} + \frac{f''}{f'}$$

و

$$H := -2\nu'' f'' f' + \nu' f''' + \frac{\nu' \nu''' f'' f'}{\nu''} - \frac{\nu' (f'')^2}{f'},$$

با حل این معادله‌ی دیفرانسیل برای ξ'' داریم

$$\xi''(x) = \xi''(x_0) e^{\int_{x_0}^x G(\tilde{x}, y) d\tilde{x}} + \int_{x_0}^x e^{\int_{\tilde{x}}^x G(\tilde{x}, y) d\tilde{x}} H(\tilde{x}, y) d\tilde{x}. \quad (10)$$

مجموعه‌ی توابع ξ ‌ای که در معادله‌ی دیفرانسیل مذکور صدق می‌کنند، در یک زیرفضای سه بعدی آفین زندگی می‌کنند که با سه عدد $\xi(x_0), \xi'(x_0), \xi''(x_0)$ تابع به طور یکتا تعیین می‌شود. در نتیجه اثبات کردیم که برای یک تابع و مجموعه‌ی توزیع نویزهای خارجی داده‌شده، مجموعه‌ی توزیع احتمال X ‌هایی که به اجازه‌ی وجود یک مدل برعکس می‌دهند، در یک زیرفضای سه بعدی از فضای بی‌نهایت بعدی توزیع‌های پیوسته هستند.

با وجود اینکه احتمال اینکه برای یک مدل نویز جمعی، مدل نویز جمعی دیگری در جهت مخالف وجود داشته باشد بسیار نادر است، این سوال مطرح است که در چه شرایطی برای یک مدل نویز جمعی چنین اتفاقی رخ می‌دهد. Zhang et al. در [Y] پنج دسته مدل نویز جمعی معرفی می‌کند و اثبات می‌کند هر مدل نویز جمعی غیر قابل شناسایی از تابع چگالی احتمال، به ناچار در یکی از این دسته‌ها قرار می‌گیرد.

قضیه ۵.۳. فرض کنید $X_2 = f_2(X_1) + N_2$ باشد و N_2 نیز نویزی *full support* و مستقل از X_1 باشد، تابع f_2 سه بار مشتق پذیر بوده و همچنین معادله‌ی $\frac{d}{dx_1} f_2(x_1) \frac{d^2}{dx_1^2} \log(p_{N_2}(x_2)) = 0$ تنها در تعدادی متناهی نقطه‌ی (x_1, x_2) برقرار باشد. در صورتی که یک مدل در جهت برعکس وجود داشته باشد، به این معنا که $X_1 = g_1(X_2) + \tilde{N}_1$ و X_2 که \tilde{N}_1 در آن مستقل باشد، یکی از پنج حالت زیر برقرار است.

- I. X_1 is Gaussian, N_2 is Gaussian and f is linear.
- II. X_1 is log-mix-lin-exp, N_2 is log-mix-lin-exp and f is linear.
- III. X_1 is log-mix-lin-exp, N_2 is one-sided asymptotically exponential and f is strictly monotonic with $f'(x_1) \rightarrow 0$ as $x_1 \rightarrow \infty$ or as $x_1 \rightarrow -\infty$.
- IV. X_1 is log-mix-lin-exp, N_2 is generalized mixture of two exponentials and f is strictly monotonic with $f'(x_1) \rightarrow 0$ as $x_1 \rightarrow \infty$ or as $x_1 \rightarrow -\infty$.
- V. X_1 is generalized mixture of two exponentials, N_2 is two-sided asymptotically exponential and f is strictly monotonic with $f'(x_1) \rightarrow 0$ as $x_1 \rightarrow \infty$ or as $x_1 \rightarrow -\infty$.

تعاریف دقیق عبارات به کار رفته در جدول فوق را در تعریف زیر آورده‌ایم:

تعریف ۱.۳. فرض کنید p چگالی احتمال یک توزیع پیوسته P باشد.

P یک *log-mix-lin-exp* است اگر وجود داشته باشند c_1, c_2, c_3, c_4 به نحوی که $c_1 < 0$ و $c_2 c_3 > 0$ به صورتی که:

$$\log p(x) = c_1 \exp(c_2 x) + c_3 x + c_4.$$

P یک *one-sided asymptotically exponential* است اگر وجود داشته باشد $c \neq 0$ به نحوی که

$$\frac{d}{dx} \log p(x) \rightarrow c$$

وقتی $x \rightarrow \infty$ یا $x \rightarrow -\infty$.

P یک *two-sided asymptotically exponential* است اگر وجود داشته باشند $c_1 \neq 0$ و $c_2 \neq 0$ به نحوی که

$$\frac{d}{dx} \log p(x) \rightarrow c_1$$

وقتی $x \rightarrow -\infty$ و

$$\frac{d}{dx} \log p(x) \rightarrow c_2$$

وقتی $x \rightarrow \infty$.

P یک *generalized mixture of two exponentials* است اگر $d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6$ وجود داشته باشند به نحوی که $d_2 < -\frac{d_1}{d_5}$ و $d_1 d_5 > 0, d_3 > 0, d_4 > 0$ داشته باشیم:

$$\log p(x) = d_1 x + d_2 \log(d_3 + d_4 \exp(d_5 x)) + d_6.$$

۲.۳ حالت چند متغیره

تا اینجا برای حالت دو بعدی، نشان دادیم در حالت generic یک توزیع احتمال، اجازه‌ی وجود مدل نويز جمعی در هر دو طرف را نمی‌دهد. در این بخش به تعمیم این قضیه از دوبعدی به حالت چندبعدی می‌پردازیم. مرجع اصلی ما در این بخش مقاله‌ی [۶] است. این مقاله قضیه‌ای بسیار جالب را مطرح می‌کند که عنوان می‌کند هنگامی یک قضیه‌ی Identifiability دو بعدی داریم در چه صورتی می‌توان آن را به حالت چندبعدی تعمیم داد. برای ورود به این بحث مقاله‌ی [۶] مثالی جالب را مطرح کرده که در این گزارش نیز به همان شیوه‌ی مقاله عمل می‌کنیم.

مثال ۱.۳. SCM زیر را در نظر بگیرید:

$$\begin{cases} X_1 = N_1 \\ X_2 = f_2(X_1) + N_2 \\ X_3 = f_3(X_1) + aX_2 + N_3 \end{cases} \quad (11)$$

که در آن $N_1 \sim t - \text{student}(\nu = 3)$, $N_2 \sim \text{Normal}(0, \sigma_2^2)$ و $N_3 \sim \text{Normal}(0, \sigma_3^2)$. در این جا X_2 و X_3 غیر گاوسی هستند اما

$$X_3 | X_2 = x_2 = c + aX_2 | X_1 = x_1 + N_3$$

برای هر x_1 یک معادله‌ی خطی-گاوسی است در حالی که هیچ‌یک از معادلات اصلی *SCM* گاوسی-خطی نیستند. می‌توانیم *SCM* دیگری بسازیم که در توزیع مشاهداتی تفاوتی با *SCM* اصلی نداشته باشد:

$$\begin{cases} X_1 = M_1 \\ X_2 = g_2(X_1) + bX_3 + M_2 \\ X_3 = g_3(X_1) + aX_2 + M_3 \end{cases} \quad (12)$$

به نظر می‌رسد باید شرطی بر روی توزیع‌های شرطی قرار دهیم!

برای بیان شرط قابل شناسایی بودن از توزیع احتمال مشاهداتی، به یک تعریف نیاز داریم:

تعریف ۲.۳. یک مدل نويز جمعی با n متغیر را در نظر بگیرید. این مدل را یک مدل نويز جمعی محدودشده می‌نامیم اگر برای هر $i \in \mathbf{PA}_j$ و $j \in \mathbf{V}$ و تمام مجموعه‌های $\mathbf{S} \subseteq \mathbf{V}$ به طوری که $\mathbf{PA}_j \setminus \{i\} \subseteq \mathbf{S} \subseteq \mathbf{ND}_j \setminus \{i, j\}$ وجود داشته باشد $p_{\mathbf{S}}(x_{\mathbf{S}}) > 0$ به نحوی که

$$\left(f_j(x_{\mathbf{PA}_j \setminus \{i\}}, \underbrace{\cdot}_{X_i}), P(X_i | X_{\mathbf{S}} = x_{\mathbf{S}}), P(N_j) \right)$$

در شرایط قضیه‌ی (۲.۳) صدق کند.

قضیه ۶.۳. فرض کنید که $\mathbf{X} = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ توسط یک مدل نوین جمعی محدود شده با گراف G_0 تولید شده باشند و فرض کنید $P(\mathbf{X})$ نسبت به G_0 شرط *Causal Minimality* را ارضا کند. در این صورت G_0 از روی توزیع احتمال $P(\mathbf{X})$ قابل شناسایی است.

برای اثبات این قضیه نیاز به یک لم گرافی داریم که Chickering در سال ۱۹۹۵ اثبات کرده است [۱].

لم ۱.۳. فرض کنید G و G' دو DAG روی مجموعه‌ی متغیرهای \mathbf{X} باشند. فرض کنید $P(\mathbf{X})$ چگالی احتمالی همواره مثبت دارد که نسبت به G و G' مارکوف هستند و شرط *Causal Minimality* را ارضا می‌کنند. در این صورت متغیرهای L و Y وجود دارند که برای مجموعه‌های $\mathbf{Q} := \text{PA}_L^G \setminus \{Y\}$ ، $\mathbf{R} := \text{PA}_Y^{G'} \setminus \{L\}$ و $\mathbf{S} := \mathbf{Q} \cup \mathbf{R}$ داشته باشیم:

$$Y \rightarrow L \text{ در } G \text{ و } L \rightarrow Y \text{ در } G'.$$

$$\mathbf{S} \subseteq \text{ND}_Y^{G'} \setminus \{L\} \text{ و } \mathbf{S} \subseteq \text{ND}_L^G \setminus \{Y\}.$$

اثبات. قضیه‌ی (۶.۳)

برهان خلف: فرض کنید دو مدل نوین جمعی محدود شده با این توزیع احتمال وجود داشته باشند. یکی با گراف G و دیگری با گراف متفاوت G' . دو متغیر L و Y را بر اساس لم فوق انتخاب می‌کنیم و مشابه لم فوق، می‌گیریم $\mathbf{R} := \text{PA}_Y^{G'} \setminus \{L\}$ ، $\mathbf{Q} := \text{PA}_L^G \setminus \{Y\}$ و $\mathbf{S} := \mathbf{Q} \cup \mathbf{R}$ هر تحقق دلخواه $\mathbf{s} = (\mathbf{q}, \mathbf{r})$ را در نظر بگیرید و بنویسید $L^* := L | \mathbf{S} = \mathbf{s}$ و $Y^* := Y | \mathbf{S} = \mathbf{s}$ از لم فوق داریم: $\mathbf{S} \subseteq \text{ND}_L^G \setminus \{Y\}$ و این بدین معناست که $\{Y\} \cup \mathbf{S} \subseteq \text{ND}_L^G$ در نتیجه $N_L \perp\!\!\!\perp \{Y\} \cup \mathbf{S}$ در نتیجه می‌توان به معادله‌ی زیر رسید:

$$L^* = f_L(\mathbf{q}, Y^*) + N_L \quad N_L \perp\!\!\!\perp Y^*$$

برای G' هم با استدلال مشابه می‌توان به معادله‌ی زیر رسید:

$$Y^* = g_Y(\mathbf{r}, L^*) + N_Y \quad N_Y \perp\!\!\!\perp L^*$$

و این در تناقض با فرض مدل نوین جمعی محدود شده است پس فرض خلف باطل بوده و G و G' برابرند. \square

نکته‌ی بسیار جالبی که در این قضیه وجود دارد این است که می‌توان آن را برای هر قضیه‌ی Indentifiability دیگر نیز به کار برد، به شرط عدم وجود دور. به طور مثال به کمک آن می‌توان LINGAM و یا Post Non-Linear Additive Noise Model، که در ادامه به آن پرداخته خواهد شد، را از حالت دو بعدی به حالت چند بعدی تعمیم داد.

۳.۳ Post Non-Linear Models

دسته‌ای دیگر از SCM ها وجود دارند که برای شناسایی آن‌ها از توزیع احتمال مشترک متغیرهایشان، قضیه‌ی identifiability وجود دارد. این دسته از SCM ها، Post Non-Linear Models هستند. این مدل‌ها در [۷] معرفی شده‌اند.

تعریف ۳.۳. *Post Non-Linear Models* یک *SCM* را *Post Non-Linear Models* اگر روابط *Structural* آن به فرم

$$X_i = f_{i,2}(f_{i,1}(\mathbf{PA}_i) + N_i)$$

باشد.

مقاله‌ی [۷] با روشی کاملاً مشابه روش (۲.۳)، قضیه‌ی identifiability زیر برای *Post Non-Linear Models* را اثبات می‌کند.

قضیه ۷.۳. فرض کنید $x_2 = f_2(f_1(x_1) + e_2)$ و $x_1 = g_2(g_1(x_2) + e_1)$. توابع غیرخطی، توزیع‌های چگالی احتمال داشته و هر کدام از توابع و توابع چگالی احتمال سه بار مشتق پذیر باشند، برای هر (x_1, x_2) که $\eta'' h' \neq 0$:

$$t_1 = g_2^{-1}(x_1), \quad z_2 = f_2^{-1}(x_2), \quad h = f_1 \circ g_2, \quad h_1 = g_1 \circ f_2$$

$$\eta_1(t_1) = \log p_{t_1}(t_1) \quad \eta_2(e_2) = \log p_{e_2}(e_2)$$

$$\eta_1''' - \frac{\eta_1'' h''}{h'} = \left(\frac{\eta_2' \eta_2'''}{\eta_2''} - 2\eta_2'' \right) \cdot h' h'' - \frac{\eta_2'''}{\eta_2''} \cdot h' \eta_1'' + \eta_2' \cdot \left(h''' - \frac{h''^2}{h'} \right)$$

و همچنین چنین رابطه‌ای نیز وجود خواهد داشت:

$$\frac{1}{h_1'} = \frac{\eta_1'' + \eta_2'' h'^2 - \eta_2' h''}{\eta_2'' h'}$$

با فرضیاتی که در مورد توابع و توزیع‌ها داشتیم، می‌توان تمام حالاتی که در آن گراف از روی تابع چگالی مشترک قابل شناسایی نیست را به دست آورد. شکل (۱) را ببینید.

Table 1: All situations in which the PNL causal model is not identifiable.

	p_{e_2}	$p_{t_1}(t_1 = g_2^{-1}(x_1))$	$h = f_1 \circ g_2$	Remark
I	Gaussian	Gaussian	linear	h_1 also linear
II	log-mix-lin-exp	log-mix-lin-exp	linear	h_1 strictly monotonic, and $h'_1 \rightarrow 0$, as $z_2 \rightarrow +\infty$ or as $z_2 \rightarrow -\infty$
III	log-mix-lin-exp	one-sided asymptotically exponential (but not log-mix-lin-exp)	h strictly monotonic, and $h' \rightarrow 0$, as $t_1 \rightarrow +\infty$ or as $t_1 \rightarrow -\infty$	—
IV	log-mix-lin-exp	generalized mixture of two exponentials	Same as above	—
V	generalized mixture of two exponentials	two-sided asymptotically exponential	Same as above	—

شکل ۱: تمام حالاتی که در آن مدل قابل شناسایی نیست.

۴.۳ مقایسه‌ی نتایج

در این بخش سه مقاله‌ی اصلی که قضایای identifiability مربوط به مدل‌های نوین جمعی ارائه داده‌اند را بررسی کردیم. در ادامه به مقایسه این مقالات می‌پردازیم.

مقاله‌ی Hoyer et. al برای اولین بار مدل‌های نوین جمعی را معرفی می‌کند و قضیه‌ی identifiability دو بعدی را ثابت می‌کند که سنگ‌بنای تمام کارهای بعدی این حوزه است. این مقاله نتایج خود را با داده‌های واقعی و همچنین داده‌های مصنوعی نیز می‌سنجد. یک نقطه‌ی ضعف این مقاله این است که در آزمایش‌های تجربی خود، حالت‌هایی به جز حالت گاوسی-خطی که در آن identifiability نداریم را بررسی نمی‌کند. این ایراد در تمام مقالات بعدی نیز وجود دارد.

مقاله‌ی Peters et al. با ارائه‌ی شیوه‌ای برای تعمیم قضایای identifiability به چند بعد، قدم بزرگی در استنتاج‌علی بر می‌دارد که حتی در بیرون از مدل‌های نوین جمعی نیز کاربرد وسیع دارد. الگوریتم RESIT که در این مقاله معرفی می‌شود نیز تا کنون جز بهترین ابزارهای یادگیری ساختار علی باقی‌مانده است و ایده‌ی آن در مقالاتی مثل [۵] نیز به کار رفته است. بخش آزمایش الگوریتم بر روی داده‌های واقعی این مقاله ضعف‌های اساسی دارد. این مقاله الگوریتم خود را تنها بر روی یک دیتاست می‌آزماید که در این دیتاست، جهت درست علی به درستی مشخص نیست. در ادامه بیشتر به الگوریتم RESIT خواهیم پرداخت.

مقاله‌ی Zhang قضیه identifiability بسیار قوی‌ای برای مدل‌های Post Non-Linear ارائه داده است که می‌توان با روش مقاله‌ی [۶] به راحتی آن را به حالت چند متغیره نیز تعمیم داد. برای یادگیری Post Non-Linear ها، تاکنون الگوریتم یادگیری مناسبی ارائه نشده است. به نظر من Post Non-Linear ها هنوز به بلوغ کامل نرسیده‌اند و باید کار بسیار بیشتری بر روی الگوریتم‌های یادگیری آن‌ها انجام شود.

۴ الگوریتم‌های یادگیری

در این بخش به بررسی الگوریتم‌های یادگیری گراف مربوط به یک SCM از داده‌ی محدود به فرض اینکه در SCM مدل نوین جمعی برقرار باشد، پرداخته و الگوریتم‌های مختلف مطرح شده را با هم مقایسه می‌کنیم. مراجع ما در این بخش مقالات [۶] و [۴] هستند.

۱.۴ الگوریتم RESIT

این الگوریتم توسط Peters et al.، سال ۲۰۱۴، در [۶] معرفی شده است. ایده‌ی اصلی این الگوریتم این است که برای هر X_i اگر X_i یک Sink Node باشد داریم $N_i \perp\!\!\!\perp \mathbf{X} \setminus \{X_i\}$ به طور کلی برای هر $N_i \perp\!\!\!\perp \mathbf{ND}_Y, Y \in \mathbf{X}$.

الگوریتم RESIT در هر مرحله یک Sink Node را تشخیص داده و حذف می‌کند. برای تشخیص یک Sink نیز از ویژگی $N_i \perp\!\!\!\perp \mathbf{X} \setminus \{X_i\}$ استفاده می‌کند.

الگوریتم RESIT دو فاز دارد. در فاز اول (خط ۳ تا ۱۳)، یک Causal Order پیدا می‌شود. با رگرسیون کردن هر متغیر روی بقیه‌ی متغیرهای گراف هر مرحله، متغیری که باقی مانده‌ی رگرسیون مربوط به از دیگر متغیرها مستقل‌تر (مثلاً با معیار p-value آزمون HSIC) باشد را به عنوان یک sink در نظر می‌گیریم. با حذف این راس، مجدداً یک DAG دیگر به وجود می‌آید که در آن همین روند را روی آن تکرار می‌کنیم. با این کار می‌توان به یک Causal Order برای متغیرها رسید. در فاز دوم، برای شروع فرض می‌شود که اگر $\pi(i) < \pi(j)$ از i به j یک یال وجود دارد. از این گراف شروع کرده. هر بار یک متغیر، $X_{\pi(k)}$ را در نظر گرفته و آن را بر

Algorithm 1 Regression with subsequent independence test (RESIT)

```
1: Input: i.i.d. samples of a  $p$ -dimensional distribution on  $(X_1, \dots, X_p)$ 
2:  $S := \{1, \dots, p\}, \pi := []$ 
3: PHASE 1: Determine causal order.
4: repeat
5:   for  $k \in S$  do
6:     Regress  $X_k$  on  $\{X_i\}_{i \in S \setminus \{k\}}$ .
7:     Measure dependence between residuals and  $\{X_i\}_{i \in S \setminus \{k\}}$ .
8:   end for
9:   Let  $k^*$  be the  $k$  with the weakest dependence.
10:   $S := S \setminus \{k^*\}$ 
11:   $\text{pa}(k^*) := S$ 
12:   $\pi := [k^*, \pi]$  ( $\pi$  will be the causal order, its last component being a sink)
13: until  $\#S = 1$ 
14: PHASE 2: Remove superfluous edges.
15: for  $k \in \{2, \dots, p\}$  do
16:   for  $\ell \in \text{pa}(\pi(k))$  do
17:     Regress  $X_{\pi(k)}$  on  $\{X_i\}_{i \in \text{pa}(\pi(k)) \setminus \{\ell\}}$ .
18:     if residuals are independent of  $\{X_i\}_{i \in \{\pi(1), \dots, \pi(k-1)\}}$  then
19:        $\text{pa}(\pi(k)) := \text{pa}(\pi(k)) \setminus \{\ell\}$ 
20:     end if
21:   end for
22: end for
23: Output:  $(\text{pa}(1), \dots, \text{pa}(p))$ 
```

روی parent هایش به جز یک parent، X_l ، رگرس می‌کنیم به نحوی که هر parent یک بار از رگرسیون کنار گذاشته شود. در هر رگرسیون، اگر باقی‌مانده رگرسیون از متغیرهایی که در Causal Order بالاتر از $X_{\pi(k)}$ هستند مستقل شد، ارتباط X_l و $X_{\pi(k)}$ را حذف می‌کنیم.

الگوریتم RESIT در مرحله‌ی اول خود $O(n^2)$ تست آماری انجام می‌دهد و در مرحله‌ی دوم نیز تعداد تست‌های آماری $O(n)$ است. چند جمله‌ای بودن این الگوریتم بسیار عجیب است زیرا مسائل معمول در Bayesian Network Learning اکثراً NP-Hard هستند. با این وجود الگوریتم RESIT برای n های بزرگ قابل استفاده نیست زیرا در صورتی که در انجام تست آماری دچار خطا شویم، خطا به شدت در مراحل بعد منتشر شده و باعث می‌شود به طور قابل ملاحظه‌ای از گراف اصلی دور شویم.

۲.۴ روش GDS و Brute Force

یک دسته‌ی دیگر از الگوریتم‌های یادگیری در مدل‌های نوین جمعی، الگوریتم‌های مبتنی بر score هستند. برای یادگیری ساختار مدل‌های نوین جمعی محدود شده، می‌توان تمام DAG ها را enumerate کرد و بررسی کرد که آیا استقلال‌هایی که از داده‌ها استخراج می‌شوند در گراف نیز وجود دارند یا خیر. یک ایراد این روش این است که این روش لزوماً یک گراف Causal Minimal به ما نمی‌دهد. برای حل این مشکل یک penalized independence score تعریف کرده و آن را برای گراف‌ها محاسبه می‌کنیم و این معیار را مبنای انتخاب گراف قرار می‌دهیم.

$$\hat{G} = \underset{G}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \text{DM}(res_i^{G, \text{RM}}, res_{-i}^{G, \text{RM}}) + \lambda \# \text{edges}$$

در آن روش RM رگرسیون ما و DM یک معیار استقلال است. res_i مقدار باقی‌مانده‌ی رگرسیون X_i است وقتی آن را بر روی تمام parent هایش رگرس می‌کنیم و res_{-i} باقی‌مانده‌ی رگرسیون مابقی متغیرها به جز X_i است. واضح است که این الگوریتم برای گراف‌های بزرگ به هیچ وجه قابل استفاده نخواهد بود.

یک راه معقول برای کاهش پیچیدگی محاسباتی الگوریتم فوق، استفاده از روش‌های حریصانه است [۶]. دو گراف را مجاور می‌گوییم اگر تنها با یک تغییر جهت، افزودن یال یا کاستن یال به یکدیگر تبدیل شوند. در الگوریتم حریصانه، در هر مرحله score گراف آن

مرحله را حساب کرده و با SCORE گرافهای مجاور مقایسه می‌شود. هر جا امتیاز یکی از این گرافهای مجاور از گراف اصلی بالاتر بود، گراف اصلی را برابر گراف مجاور می‌گذاریم و الگوریتم را ادامه می‌دهیم. برای اینکه استپها کمی بهتر شوند، به صورت تصادفی امتیاز همسایه‌ها را محاسبه نمی‌کنیم بلکه از همسایه‌ای شروع می‌کنیم که باقی‌مانده آن نسبت به باقی‌مانده‌ی دیگر راس‌ها کمتر مستقل است. تضمینی وجود ندارد که این روش به بهترین گراف برسد [۶]. نویسندگان مقاله حتی ادعای مبنی بر این موضوع نیز انجام نمی‌دهند.

۳.۴ مقایسه‌ی الگوریتم‌های Brute Force، RESIT و GDS با سایر الگوریتم‌ها

مقاله‌ی [۶] به صورت مفصل الگوریتم‌های LiNGAM، PC GES، GDS، Brute Force، RESIT را مقایسه می‌کند. در ادامه به بررسی این مقایسه و نقد آن می‌پردازیم. ایراد بزرگ این مقایسه این است که بر روی داده‌هایی انجام شده که به صورت مصنوعی تولید شده‌اند. معیار مورد استفاده‌ی ما برای مقایسه‌ی الگوریتم‌ها Structural Hamming Distance (SHD) است. همان‌طور که از اسم این معیار بر می‌آید، این معیار تعداد یال‌های اشتباه را می‌شمارد. وجود هر یال اضافه یا جهت‌دار به دست‌آوردن یال بی‌جهت نیز یک خطا در نظر گرفته می‌شود. در جدول‌های مقایسه‌ای که در بخش‌های بعد خواهند آمد، ردیف DAG مقایسه‌ی DAG واقعی با گراف به دست آمده و ردیف CDAG مقایسه‌ی CDAG و گراف حاصل است.

۱.۳.۴ حالت SCM خطی

در حالت خطی، ضرایب β_{jk} به صورت تصادفی با توزیع یکنواخت $[0.1, 2] \cup [-2, -0.1]$ انتخاب می‌شوند. نویزهای برون مستقل هستند و با توزیع $K_j \cdot \text{sign}(M_j) \cdot |M_j|^{\alpha_j}$ تولید می‌شوند که در آن $M_j \sim N(0, 1)$ ، $K_j \sim U([0.1, 0.5])$ و $\alpha_j \sim U([2, 4])$. جدول (۲) مقایسه‌ی SHD این الگوریتم‌ها برای گراف‌ها با تعداد راس مختلف است. در این جدول، روش RAND

	GDS	BF	RESIT	LiNGAM	PC	CPC	GES	RAND
$p = 4, n = 100$								
DAG	0.7 ± 0.9	0.6 ± 0.8	1.2 ± 1.3	1.9 ± 1.2	3.5 ± 1.5	3.6 ± 1.4	3.1 ± 1.7	4.4 ± 1.0
CPDAG	1.1 ± 1.5	0.9 ± 1.4	1.5 ± 1.7	2.4 ± 1.5	2.4 ± 1.7	2.3 ± 1.6	2.0 ± 2.0	4.3 ± 1.4
$p = 4, n = 500$								
DAG	0.2 ± 0.6	0.1 ± 0.3	0.6 ± 0.8	0.5 ± 0.8	3.1 ± 1.4	3.2 ± 1.4	2.9 ± 1.6	4.1 ± 1.2
CPDAG	0.3 ± 0.9	0.2 ± 0.5	0.9 ± 1.3	0.8 ± 1.2	1.9 ± 1.8	1.6 ± 1.7	1.6 ± 1.9	3.9 ± 1.4
$p = 15, n = 100$								
DAG	12.2 ± 5.3	—	25.2 ± 8.3	11.1 ± 3.7	13.0 ± 3.6	13.7 ± 3.7	12.7 ± 4.2	57.4 ± 26.4
CPDAG	13.2 ± 5.4	—	27.0 ± 8.5	12.4 ± 3.9	10.7 ± 3.5	10.8 ± 3.8	12.4 ± 4.9	58.5 ± 27.1
$p = 15, n = 500$								
DAG	6.1 ± 6.4	—	51.2 ± 17.8	3.4 ± 2.8	10.2 ± 3.8	10.8 ± 4.2	8.7 ± 4.6	57.6 ± 24.2
CPDAG	6.8 ± 6.9	—	54.5 ± 18.5	4.5 ± 3.8	8.2 ± 4.6	7.5 ± 4.4	7.1 ± 5.6	58.9 ± 25.0

شکل ۲: SHD الگوریتم‌های مختلف به ازای گراف‌هایی با سایزهای مختلف - مدل خطی

به این نحو است که به صورت کاملاً تصادفی یک گراف انتخاب کرده و به داده‌ها نسبت می‌دهیم.

- همان‌طور که انتظار می‌رفت، در گراف‌های کوچک، بررسی تمام گراف‌ها بهترین نتیجه را داشته ولی برای گراف‌های بزرگ، امکان اجرای این الگوریتم نبوده است.
- در گراف‌های بزرگ‌تر روش LiNGAM بهترین نتیجه را دارد. نکته‌ی جالب این است که روش DAG نیز حاصلی شبیه به روش LiNGAM دارد که نشان می‌دهد روش GAS در کمینه‌های موضعی گیر نیفتاده است.
- مطابق انتظار، الگوریتم REST در حالت خطی بسیار ناموفق عمل کرده است. این عدم موفقیت، به خصوص در گراف‌هایی با تعداد رأس زیاد بسیار شدید است. دلیل این امر این است که این الگوریتم، در این حالت در فاز اول خود یال‌های اضافی زیادی نگه می‌دارد که در فاز دوم قابل حذف نیستند.

۲.۳.۴ حالت SCM غیرخطی

در این حالت، تابع به صورت تصادفی از یک فرآیند گاوسی با پهنای باند ۱ انتخاب شده و نویزها گاوسی هستند و واریانس آن تصادفی انتخاب شده است. در حالت غیرخطی نیز مشابه حالت خطی، در گراف‌های کوچک روش Brute Force بهترین نتیجه را می‌دهد. روش GDS نیز مشابه روش Brute Force عمل می‌کند. با بزرگتر شدن سایز گراف، دیگر روش Brute Force قابل استفاده نیست و روش GDS هم کارایی خود را از دست داده و گرفتار کمینه‌های موضعی می‌شود. به نظر می‌رسد که در گراف‌های بزرگتر

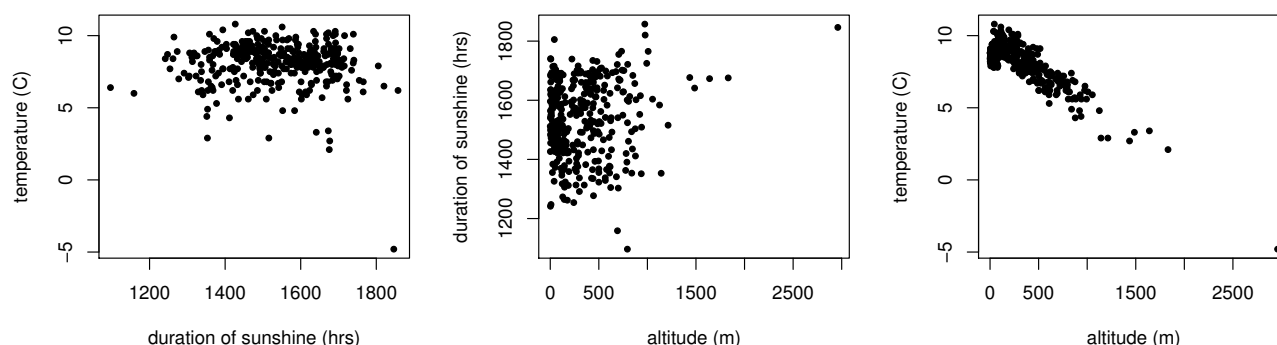
الگوریتم RESIT موفق‌تر از سایر روش‌ها عمل می‌کند. بهتر بود که این مقاله برای گراف‌های بزرگتر نیز این الگوریتم‌ها را تست می‌کرد تا بتوانیم با اطمینان بیشتری گزاره‌ی بهتر بودن روش RESIT از سایر روش‌ها در گراف‌های بزرگتر را مطرح کنیم.

	GDS	BF	RESIT	LiNGAM	PC	CPC	GES	RAND
$p = 4, n = 100$								
DAG	1.5 ± 1.4	1.0 ± 1.0	1.7 ± 1.3	3.5 ± 1.2	3.5 ± 1.5	3.8 ± 1.4	3.5 ± 1.3	4.0 ± 1.3
CPDAG	1.7 ± 1.7	1.2 ± 1.4	2.0 ± 1.6	3.0 ± 1.4	2.9 ± 1.5	2.7 ± 1.4	3.4 ± 1.7	3.9 ± 1.4
$p = 4, n = 500$								
DAG	0.5 ± 0.9	0.3 ± 0.5	0.8 ± 0.9	3.7 ± 1.2	3.5 ± 1.5	3.8 ± 1.5	3.3 ± 1.5	4.1 ± 1.2
CPDAG	0.6 ± 1.1	0.6 ± 1.0	1.0 ± 1.3	3.0 ± 1.7	3.1 ± 1.9	2.8 ± 1.8	3.4 ± 1.9	3.8 ± 1.6
$p = 15, n = 100$								
DAG	14.3 ± 4.9	—	15.4 ± 5.7	15.4 ± 3.6	14.2 ± 3.5	15.5 ± 3.6	24.8 ± 6.3	56.8 ± 24.1
CPDAG	15.1 ± 5.4	—	16.5 ± 5.9	15.3 ± 4.0	13.3 ± 3.6	13.3 ± 4.0	26.4 ± 6.5	58.0 ± 24.7
$p = 15, n = 500$								
DAG	13.0 ± 8.4	—	10.1 ± 5.7	21.4 ± 6.9	13.9 ± 4.5	15.1 ± 4.8	26.8 ± 8.5	56.1 ± 26.8
CPDAG	14.2 ± 9.2	—	11.3 ± 6.3	21.1 ± 7.3	13.7 ± 4.9	13.4 ± 5.1	28.6 ± 8.8	57.0 ± 27.3

شکل ۳: SHD الگوریتم‌های مختلف به ازای گراف‌هایی با سایزهای مختلف - مدل غیرخطی

۳.۳.۴ بررسی داده‌های واقعی!

در ادامه این مقاله تلاشی مذبوحانه(!) برای اثبات کارآمدی الگوریتم RESIT انجام می‌دهد. داده‌ی مورد استفاده، سه متغیر مشاهده شده دارد: دمای شهر، ارتفاع شهر و مدت زمان تابش خورشید. این داده از ۳۴۹ مرکز هواشناسی آلمان به دست آمده است.



شکل ۴: نمودار پراکنش داده‌های مسئله

دیده می‌شود که الگوریتم‌های LiNGAM, PC(C), GES گراف‌هایی را پیشنهاد می‌کنند که به وضوح غلطند! زیرا Intervention برو روی دمای شهر و یا زمان تابش خورشید در یک شهر، تاثیری بر روی ارتفاع آن نخواهد داشت. سه روش RESIT و BF، GES جواب‌های مشابهی می‌دهند.

به نظر من این گراف‌ها غلط هستند زیرا علاوه بر دو یالی که RESIT می‌یابد، چنین یالی نیز در گراف موجود باشد: $T \leftarrow DS$. نویسنده‌ی مقاله بیان می‌کند که گرافی که هر سه یال را دارد، در الگوریتم‌های GES و BF دومین بالاترین score را می‌یابد و ادعا می‌کند که این اشتباه به دلیل وجود confounder هایی از جنس متغیرهای جغرافیایی است.

به نظر من این تحلیل به هیچ عنوان تحلیل جامع و دقیقی برای مقایسه‌ی الگوریتم‌ها نیست. اولاً این مطالعه تنها بر روی یک دیتاست انجام شده است، حتی برای بدترین لگوریتم‌ها نیز می‌توان یک دیتاست یافت که خروجی آن الگوریتم جواب مناسبی باشد. دوماً جواب این الگوریتم خیلی جواب خوبی نیز نیست! سوماً اینکه تعداد متغیرهای این دیتاست بسیار محدود است و برای آزمودن الگوریتمی که ادعای چندمتغیره بودن دارد و با پشتوانه‌ی داده‌های مصنوعی، در مورد آن این ادعا شده است که در گراف‌هایی با تعداد متغیر بالا از الگوریتم‌های گذشته بهتر عمل می‌کند، کافی نیست.

Method	Graph
LiNGAM	$T \rightarrow A$
PC	$T \rightarrow A \leftarrow DS$
CPC	$T \rightarrow A \leftarrow DS$
GES	Fully Connected
GDS	$T \leftarrow A \rightarrow DS$
BF	$T \leftarrow A \rightarrow DS$
RESIT	$T \leftarrow A \rightarrow DS$

شکل ۵: گراف پیشنهادی الگوریتم‌های مختلف

۵ متغیرهای پنهان

تا کنون کار زیادی بر روی یافت متغیرهای پنهان در مدل‌های نويز جمعی انجام نشده است. یکی از معدود مقالات این حوزه، مقاله‌ی [۳] است. در این مقاله، الگوریتمی به نام ICAN معرفی می‌شود که در حالت دو بعدی، می‌تواند وجود یک متغیر پنهان را تشخیص دهد.

۱.۵ روش ساده‌لوحانه

در وهله‌ی برای یافتن متغیر پنهان، روش زیر به ذهن می‌رسد.
فرض کنید

$$\begin{cases} X = f(T) + N_X \\ Y = g(T) + N_Y \end{cases}$$

می‌توانیم به روشی مشابه روش‌های Dimension Reduction عمل کنیم. فرض کنید (X_k, Y_k) داده‌هایی باشند که در اختیار ما هستند. برای یک خم دلخواه $s(t)$ تعریف کنید

$$\hat{T}_k = \operatorname{argmin}_{t \in [0,1]} \|(X_k, Y_k) - s(t)\|_2$$

قصد داریم \hat{s} را بیابیم که $\sum_{k=1}^n \|(X_k, Y_k) - s(\hat{T}_k)\|_2$ بعد از یافتن این خم، بررسی کنیم که آیا (\hat{T}_k) و

$$(N_x, N_y) = (X, Y) - s(\hat{T})$$

مستقل هستند یا خیر. این روش با وجود معقول بودن، در بسیاری از موارد ساده نیز بسیار بد عمل می‌کند.

۲.۵ الگوریتم ICAN

برای رفع مشکلات الگوریتم ساده‌لوحانه، الگوریتم ICAN ارائه شده است. در این الگوریتم از خم فوق به عنوان یک نقطه‌ی شروع استفاده می‌کند ولی به دنبالی خمی می‌گردد که نویزها تا حد امکان از همدیگر مستقل شوند.

اگر جهت علی از X به Y باشد، به راحتی دیده می‌شود که خمی که این الگوریتم باز می‌گرداند منجر به این نتیجه می‌شود که $\operatorname{var}\{\hat{N}_x\} << \operatorname{var}\{\hat{N}_y\}$ از این ویژگی برای این استفاده خواهیم کرد که وجود یک متغیر پنهان را تشخیص می‌دهیم.

۶ سری‌های زمانی

مراجع

- [1] CHICKERING, D. M. A transformational characterization of equivalent bayesian network structures. in *Proceedings of the Eleventh Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence* (1995), UAI'95, pp. 87–98.
- [2] HOYER, P. O., JANZING, D., MOOIJ, J. M., PETERS, J., AND SCHÖLKOPF, B. Nonlinear causal discovery with additive noise models. in *Advances in Neural Information Processing Systems 21*. 2009, pp. 689–696.

Algorithm 1 Identifying Confounders using Additive Noise Models (ICAN)

```

1: Input:  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$  (normalized)
2: Initialization:
3: Fit a curve  $\hat{\mathbf{s}}$  to the data that minimizes  $\ell_2$  distance:  $\hat{\mathbf{s}} := \operatorname{argmin}_{\mathbf{s} \in \mathcal{S}} \sum_{k=1}^n \operatorname{dist}(\mathbf{s}, (X_k, Y_k))$ .
4: repeat
5:   Projection:
6:    $\hat{T} := \operatorname{argmin}_T \operatorname{DEP}(\hat{N}_X, \hat{N}_Y) + \operatorname{DEP}(\hat{N}_X, T) + \operatorname{DEP}(\hat{N}_Y, T)$  with  $(\hat{N}_{X,k}, \hat{N}_{Y,k}) = (X_k, Y_k) - \hat{\mathbf{s}}(T_k)$ 
7:   if  $\hat{N}_X \perp \hat{N}_Y$  and  $\hat{N}_X \perp \hat{T}$  and  $\hat{N}_Y \perp \hat{T}$  then
8:     Output:  $(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_n)$ ,  $\hat{u} = \hat{\mathbf{s}}_1$ ,  $\hat{v} = \hat{\mathbf{s}}_2$ , and  $\frac{\operatorname{var} \hat{N}_X}{\operatorname{var} \hat{N}_Y}$ .
9:     Break.
10:  end if
11:  Regression:
12:  Estimate  $\hat{\mathbf{s}}$  by regression  $(X, Y) = \hat{\mathbf{s}}(\hat{T}) + \hat{\mathbf{N}}$ . Set  $\hat{u} = \hat{\mathbf{s}}_1$ ,  $\hat{v} = \hat{\mathbf{s}}_2$ .
13: until  $K$  iterations
14: Output: Data cannot be fitted by a CAN model.

```

- [3] JANZING, D., PETERS, J., MOOIJ, J. M., AND SCHÖLKOPF, B. Identifying confounders using additive noise models. in *UAI* (2009).
- [4] NOWZOHOUR, C., AND BÜHLMANN, P. Score-based causal learning in additive noise models. *Statistics* 50, 3 (2016), 471–485.
- [5] PETERS, J., JANZING, D., AND SCHÖLKOPF, B. Causal inference on time series using restricted structural equation models. in *Advances in Neural Information Processing Systems* 26. 2013, pp. 154–162.
- [6] PETERS, J., MOOIJ, J. M., JANZING, D., AND SCHÖLKOPF, B. Causal discovery with continuous additive noise models. *J. Mach. Learn. Res.* 15, 1 (2014), 2009–2053.
- [7] ZHANG, K., AND HYVÄRINEN, A. On the identifiability of the post-nonlinear causal model. in *Proceedings of the Twenty-Fifth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence* (2009), UAI '09, pp. 647–655.