# 循環型因果構造の発見

で

トーマス・リチャードソン

1996年2月1日

レポート CMU-PHIL-68



哲学方法論論理 学

ペンシルバニア州ピッツバーグ 15213-3890

# 循環型因果構造の発見

トーマス・リチャー ドソン」テトラッド グループ 哲学科 CMU

#### アブストラクト

本論文は、観測データから因果推論を行う際に、その根底にある因果構造がフィードバックループを含んでいる可能性がある場合の問題を扱っている。特に、データを生成した因果系が線形であり、測定されていない共通原因(潜在変数)が存在しないという仮定の下で、因果推論を行うことである。この種の線形因果構造は、非再帰型線形構造方程式モデルで表現することができる。

潜在変数を含まない線形循環モデルの正しい多項式時間(スパースグラフ上)発見アルゴリズムを発表する。このアルゴリズムは、観測データを入力として、非再帰的線形構造方程式モデルのクラスの表現を出力する。観測データに見られる全ての条件付き独立性が、特定のパラメータ値のためではなく、構造的な理由で真であるという仮定の下、このアルゴリズムは、データを生成した構造の原因的特徴を発見する。本アルゴリズムの簡単な修正により、2つの有向グラフ(環状または非環状)が同じ条件付き独立関係の集合を伴うかどうかを決定するための決定手順(実行時間は頂点数の多項式)として使用することができる。

アルゴリズムが正しいことを証明した後、私は、2つの線形構造方程式モデル

が発見アルゴリズムの条件付き独立性のオラクルとして使用される場合、アルゴリズムが同じ出力を与えるのは、一方のモデルが内包するすべての条件付き独立性が他方のモデルも内包し、逆もまた然りであるという意味で、アルゴリズムも完全であることを示す。別の言い方をすれば、このアルゴリズムは有向環状グラフのマルコフ同値性を決定するための決定手順として用いることができる。2つの環状グラフに関連する条件付き独立性が、アルゴリズムから同じ出力をもたらす場合、入力として用いれば、その2つのグラフは同値である。

P. Spirtes, C. Glyinour, R. Scheines & C. Meekの有益な会話に感謝する。NSF grant 9102169の支援を受けた研究。01995 トーマス・リチャードソン(カーネギーメロン大学)。

# §1 線形フィードバックと非再帰的構造方程式モデル

#### §1.1 線形構造方程式モデル

構造方程式モデル(SEM)では、変数はエラー変数と実体変数の2つの不連続な集合に分けられる。各実質変数Vには固有の誤差項\*vがあり、*線形*SEMでは各実質変数Vは他の実体変数の線形関数として書かれ、\*v 線形SEMでは誤差項に対する共同分布も指定される。

一次方程式の係数が、実体変数が誤差変数のみの一意な線形関数となるようなものであれば、方程式の集合は縮小形を持つと言われる。縮小形を持つ線形SEMは、実体変数に関する共同分布も決定する。ここでは、縮小形が存在する係数を持ち、実体変数間のすべての分散と部分分散が有限かつ正であり、実体変数間のすべての部分相関がよく定義されている(例えば無限ではない)線形SEMのみを検討する。さらに、誤差項が共同独立である線形SEMのみを検討することにする。これは、データを生成した構造に測定不能な共通

原因が存在しないという仮定に対応する。

この議論では、第一モーメントにはこだわらないので、各変数をは、一般性を損なうことなく、その平均値からの偏差として表現される。以下は、非再帰型線形SEMの例である

.

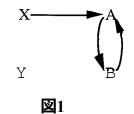
X=ex Y=e A= ct X +2 'B + EA $B=(\stackrel{.}{\succeq})$  1' + 2'A + B

8yは共同独立した標準正規誤差項である。

構造方程式モデルは、変数のある順序で係数の行列が下三角形になる場合、 *再帰的*であると言われます。

#### 1.2 グラフ

有向グラフは、与えられた線形SEMに自然に関連付けられ、Yの方程式におけるXの係数が0でない場合にのみ、XからYへの辺が存在する(XwY)という規則がある。慣例として、誤差項はグラフに含まれない。したがって、上のモデルに関するグラフは次のようになる(ここでは、誤差項は省略され、共同独立と仮定されている):



誤差項の分布が共同独立である線形SEMは、その関連グラフのパラメータ化を構成する。**非周期的な**グラフに関連する線形SEMが再帰的構造方程式モデルとなることは容易に理解できる。

#### 1.3 リニアエンタイルメント

X、Y、Z\*の不連続な集合を含む有向グラフは、ゼロでない線形係数のすべての値、およびそれらが正の分散を持ち共同独立である外生変数のすべての分布について、XがZを与えられたYから独立している場合にのみ、XがZを与えられたYから独立していることを*線形的に内包する。*有向グラフを持つ特定のSEMにおいて、が線形に内包していなくても成り立つ条件付き独立性があることに注意することが重要である。しかし、すべてのパラメータ化ではなく、あるパラメータ化でゼロ相関が成り立つ場合、この「余分の」条件付き独立性が成り立つパラメータ化でゼロ相関が成り立つ場合、この「余分の」条件付き独立性が成り立つパラメータ化の集合は、ゼロ以外の線形係数へのすべてのパラメータ値の割り当ての集合に対してゼロルベーグ尺度になる。

図1のグラフの例では、モデルが線形に内包する条件付き独立事実が2つある: XLYとXLY1(A,B})です3。

# 1.4 条件付き独立とd-separation。

Verma and Pearl (Pearl 1988 参照) は、非周期グラフが線形に内包する条件付き独立関係を計算するためのルールを提供した。彼らは、「d-connection」と呼ばれるある種の「パス」条件が、非周期的グラフの不連続な頂点集合の間に成り立つのは、そのグラフがそれらの頂点集合の間に条件付き独立関係を線

形に内包している場合に限られることを明らかにした。d-connection」の概念には、いくつかの予備的なグラフの定義が必要である:

定義する: エッジ、親、子

有向グラフにおいて、AからBへの矢印(ABB)をAからBへの辺と呼び、AからBへの矢印(A-'B)、BからAへの矢印(Be A)はいずれもA-B*間の*辺と呼ぶ。

 $<sup>^{2}</sup>$  eは、変数の集合を表すために太字(X)を使用する。

XLY1Z」は、「XはZを与えられたYから独立している」という意味です。

定義する:ディレクテッドパス

における明確なエッジ <+i -..pn>列

は、Vt から OIn+1 への *有向パス* P であり、もし、 $\tilde{n}$  の ための頂点 < Vi ...Vn+i> の 列が存在する場合にのみ、、

<Vi<sub>.</sub>Vi+1=pi<sub>.</sub>Vi>となる。この場合、Pは有向パスcomという。 Viである。/o ヴァン

定義する:先祖と子孫

AからBへの有向パスがある場合、またはA=Bの場合、AはBの祖先であり、BはBの子孫であると言われる(したがって「祖先」は「親」関係の推移的、反射的閉鎖であり、同様に「子孫」「子」についても同様)。

定義する:無指向性パス

IN i n に対して、<Vi .·In+1> S.t.の頂点列が存在する場合のみ、*無向パス*である。

<V<sub>i</sub>,V<sub>i+1</sub>> =  $E_i$ .

定義コライダー(非コライダー)エッジまたはパスとの相対的な関係。

AとBの間、BとCの間に辺があるような3つの頂点A、B、Cがあるとき、辺がBで「衝突」すると、 $\it Canhoniz (Continuous) (Continu$ 

定義: d-connection

グラフにおいて、ある集合Zに含まれない異なる頂点XとYの間の無向パスUは、(i)U上のすべてのコライダがZに子孫を持ち、(ii)ZのU上の任意の頂点Uが U上のコライダである場合にのみ、Zが与えられたときにXとYを*d-接続する* 

頂点X、Y、Zの不連続な集合に対して、Zが与えられたときに、ある頂点Xe XとYe Yをd-connectする経路があれば、XとYはZでd-connectedという。Zが与えられたときに、ある頂点Xe Xとある頂点Ye Yをd-connectする経路がない場

合、XとYはZでd-separatedという。

VermaとPearlは、d-separationが、非周期的なグラフに線形に含まれる独立性と 条件付き独立性の関係を正確に特徴付けることを示した:

定理(Verma and Pearl, 1990):非周期グラフにおいて、グラフ内の不連続な頂点集合X、Y、Zに対して、XがZによってYからd個分離されるのは、Xを線形に包含する場合のみであり、その場合は

その後、Spirtes (1995) は Haavelmo (1943) のアイデアを基に、この関係である d-separation が、環状グラフが線形に内包する独立性をも特徴付けることを示した(同様の結果は、Koster (1994) が独立して証明した):

定理(Spirtes): (環状または非環状)グラフにおいて、頂点の不連続集合X、Y、Zに対して、XとYがZを与えられたときにd分離するのは、X1 Y1Zを線形に内包するときだけである。

Spirtesはさらに、d-separationがゼロ部分相関の消失に対応することを示しました:

定理(Spirtes): 共同独立誤差変数と(環状または非環状)有向グラフを持つ線 形SEM Lにおいて 実体変数X、Y、Zを含む有向グラフで、X > において、ZがXまたはYを含まない場合、XはZを与えられたYからd個分離される。 の場合のみ

*は、px*.z=0を線形に内包する。

# §2 ディスカバリー

#### §2.1 ディスカバリー問題

因果構造が非可逆構造方程式モデルMによって正しく記述されている集団からサンプリングされたデータが与えられたとする。データからMの因果グラフを発見すること、あるいは少なくともデータから因果グラフの特徴を復元することは可能だろうか?Spirtes et al. (1995)では,因果グラフの特徴を発見する問題が,それが非周期的であるが,潜在変数(すなわち,少なくとも2つの測定変数の直接原因である未測定変数があるかもしれない)があるかもしれないという仮定で検討されている.ここでは、因果グラフが非周期的であるが、潜在変数が存在しないという仮定のもとで、因果グラフの特徴を発見する問題を考える。因果グラフが周期的である可能性があり、かつ潜在変数が存在する可能性がある場合の因果グラフの発見問題については、今後、研究が必要である。

標本分布から因果関係を推論するためには、確率分布と因果関係を関連付けるいくつかの公理を導入する必要がある。私が利用するのは、次の2つのサブ

セクションで説明する「因果的独立性」と「因果的忠実性」という仮定です。

#### §2.2 因果的独立の仮定

因果関係と確率に関連する最も基本的な仮定は、次のようなものである:

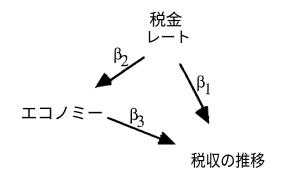
因果的独立の仮定: AがBを引き起こさず、BがAを引き起こさず、AとBの両方を引き起こす第3の変数が存在しない場合、AとBは無相関である。

この仮定は、統計データから因果関係のある結論を導き出すことを可能にし、ランダム化実験の理論の根幹をなすものである。Aの値が無作為化された場合、実験者は無作為化装置がAの唯一の原因であることを知っている。したがって、実験者はBがAの原因ではないことを知っており、AとBの両方を引き起こす第三の変数が存在しないことを知っている。

はしない。実験集団の中でAとBが相関している場合、実験者はAがBを引き起こすと結論付けるが、これは因果的独立性の仮定を応用したものである。この論文では、相関誤差や潜在変数のない線形SEMのみを考えるので、因果的独立性の仮定から、AとBが相関している場合、AがBを引き起こすか、BがAを引き起こす(または両方)かのいずれかである。そして、先に引用したSpirtesの定理から、あるSEMによって偏相関が線形的にゼロになることが約束されているかどうかは、関連するグラフにd-separationを適用することによって決定できることがわかります。

#### §2.3 忠実性の**仮定**

グラフの *すべての*線形パラメータ化で成立するゼロ部分相関に加えて、グラフのある *特定の*パラメータ化でのみ成立するゼロ部分相関が存在する場合がある。例えば、図2が税率、経済、税収の関係を記述したSEMの有向グラフであるとする。



**図2.経済**モデル

この場合、自由パラメーターのすべての値に対して、偏相関消失制約が付随することはない。しかし、 $fi1--(\St \times 3)$ であれば、税率と税収は無相関である。SEMは、税率が歳入に及ぼす直接効果(bt)と、経済を通じた間接効果( $fi2 \times b$ .)を仮定している。パラメータ制約により、これらの効果は完全に相

殺され、トータルの効果は全く残らない。このような場合、母集団はそれを生成した因果構造のグラフに対して不誠実であると言われる。分布が有向グラフに**忠実**であるのは、分布においてゼロである各偏相関が、Jによってゼロであることが約束されている場合である。

因果的**忠実性の仮定**: SEMに関連する有向グラフが母集団における因果構造を正しく記述している場合、母集団分布においてゼロである各偏相関はJによってゼロであることが約束される。

忠実性の仮定は、検討するSEMを、母集団の制約がパラメータの特定の値で はなく、構造によってもたらされるものに限定するものである。もし、ある が忠実であると仮定した場合、AとBがCでd個に分離されていなければ、 sA,B.C 0, (自由パラメーターのすべての値に対してゼロに等しくなるような線形的エンテイジメントがないため)。変数間に決定論的な関係がある場合や、自由パラメータに等式制約がある場合は、忠実性を仮定すべきではない。忠実性の仮定はあらゆる科学で用いられており、ありえない不安定なパラメータのキャンセルが本当の因果関係を隠さないという信念にほかならない。ある理論が、特殊なパラメタリゼーションによって経験的な規則性を説明できない場合、ほとんどの科学者はその理論に不安を感じ、代替案を探します。

また、忠実性を仮定するための個人主義的なベイズ論証を行うことも可能である。任意のグラフについて、線形忠実度の違反をもたらすグラフの線形パラメータ化のセットは、すべてのパラメータ化の空間においてルベーグ測度ゼロである。したがって、パラメータに対する事前確率がルベーグ測度で絶対連続であるベイズ学者は、忠実性の違反にゼロの事前確率を割り当てる。もちろん、この議論は、ルベーグ測度に対して絶対的に連続ではない事前分布をパラメータに置き、忠実性の違反にゼロでない確率を割り当てるベイズアンには関係ない話である。

忠実性の仮定は、第3節で説明したCyclic Causal Discovery (CCD) アルゴリズムの漸近的正しさを保証するものである。しかし、有限サイズのサンプルにおいて、このアルゴリズムが信頼できることを保証する*ものではない。* 

因果的独立性の仮定、潜在変数がないという仮定、線形性の仮定、因果的忠 実性の仮定を考えると、次のようになる。

有向グラフ  $P_{X,Z}$  - 0 で表される因果構造によって生成される分布 P は、J において X が Z を与えられた Y から d 分離している場合に限り、0 となる。した

がって、ゼロ部分相関の統計的検定が可能であれば、この情報を利用して,のd 分離関係についての結論を導き出し、できるだけ多く再構成することができる。

可能な限り今後、d-separation関係から特徴を再構築することと、ゼロ偏相関から特徴を再構築することは、私の仮定からすると同等であるため、同じように話す。

もちろん、d-separation関係の数は、グラフの変数数に対して指数関数的に増加する。したがって、すべてのd-separation関係の集合の部分集合から、その特徴を発見することが重要である。次節で説明するCCDアルゴリズムは、特徴を再構築ために必要なd-分離関係の部分集合を、その都度選択する。したがって、Jのd-分離関係に関する質問に正しく答えるd-分離オラクルにアクセスできるものと仮定する。

の相関は、因果グラフJに関して因果的独立性と因果的忠実性の仮定を満たす 集団ではゼロである(このアルゴリズムは、d分離オラクルが利用可能なあら ゆる分布に対して正しいが、そのようなオラクルが知られている唯一のケー スは、グラフが環状の場合、線形ケースである)。

#### §2.4 出力表現 - 部分祖語グラフ (PAGs)

一般に、d-separation関係の情報だけでは、一意なグラフを再構築することは不可能である。したがって、有向(環状または非環状)グラフはd-分離同値類に分割することができる:

#### 定義する: Equiv()

2つの有向グラフJ, \*は、両者が同じ独立性と条件付き独立性のセットを線形に内包している場合、*等価*であるという。あるグラフと等価な有向グラフの集合をEquiv()で表す。

Richardson(1994b,1995)は,2つのグラフが互いにd-分離等価であることを決定するための多項式時間アルゴリズムを提示している.(なお,より強い等価性の意味として,あるグラフの線形パラメータ化によって記述されるすべての分布が他のグラフの線形パラメータ化によっても記述できるとき,またその逆のときに成り立つ2グラフ間の線形統計同値が存在する.非周期グラフの場合、d-separation equivalenceは線形統計的等価性と等価であることが知られているが、周期グラフの場合、そうであるかどうかはわかっていない)。

Equiv()のメンバーは常にある共通した特徴を持っている。ここで、ある一定の, について、Equiv()のすべてのグラフに共通する特徴を表現するための形

式を紹介します。PAGは拡張グラフであり、頂点Vの集合、頂点間の辺の集合、辺の終点の集合(各辺に2つずつ、集合(o, -, >)から選ばれる)からなる。また、辺の端点のペアは、下線、または点線下線によって接続することができる。PAGのセマンティクスを提供する以下の定義では、(o, -, >}のいずれかが存在することを示すメタシンボルとして、'\*'が使用されている。

**定義する:** パーシャル・アンセストラル・グラフ(PAG)

'Pは頂点集合Vを持つ有向環状 グラフのPAGであり、以下の場合にのみ成立する。

- (i) 任意の部分集合 WW(A,B}においてAとBがd-connectedである場合に限り、'1'においてAとBの間にエッジが存在する。
- (ii) P,A-\*BにAから出る(Bに出るとは限らない)辺がある場合、Equiv()のすべてのグラフにおいて、AはBの祖先である。
- (iii) P,A\*->BにBへの辺がある場合、Equiv( )のすべてのグラフにおいて、BはAの祖先ではない。
- (iv) 'Pに下線A\*-\*B<u>\*-\*</u>Cがある場合、BはEquiv( )のすべてのグラフにおいてA またはCの(少なくとも1つの)祖先となる。
- (v) AからBへ、CからBへの辺がある場合、(A-'B'-C)、Bの矢印の頭は点線の下線で結ばれ、したがってA->B-C、Equiv()のすべてのグラフでBがAおよびCの共通の子の子孫でない場合にのみ。
- (vi) 上記のいずれかの方法でマークされていないエッジの端点は、小さな円が 残されます

このように: o-\*。

条件(i)が他の5つの条件と異なるのは、ある記号(この場合は辺)がPAGに現れるための必要条件と十分条件をEquiv()に与えていることであることに注意されたい。他の5つの条件は、単に必要条件を述べているだけである。このため、1つのグラフに対して、実際には多くの異なるPAGが存在する。これらはすべて同じ辺を持つが、必ずしも同じ終点を持つとは限らない。また、PAGの中には、エッジの末尾のoが少ないなど、因果構造に関する情報が多いものもある4。しかし、私が紹介する発見アルゴリズムが出力するPAGは、特定のPAGが記述する特徴を持つグラフがすべて1つのd分離同値類に属することを保証するのに十分な情報を提供します。

定義中のすべての節はEquiv()にのみ言及しているので、'I'がDirected Cyclic

Graph, J\*e Equiv()のPAGであれば、Pe'のPAGであることがわかる。これは、発見アルゴリズムの出力として、PAGは同値クラス内のすべてのグラフに共通する特徴を表すように設計されているので、驚くべきことではない。したがって、アルゴリズムによって生成されたPAG P は、ユニークなd-separation同値クラスを表す。

つまり、ある同類項内のすべてのグラフに共通する特徴があり、他の同類項 内のすべてのグラフには当てはまらないということです。

<sup>4</sup>あるPAGが辺の端に'>'を持つ場合、同じグラフの他のPAGはその場所に'>'か'o'を持つ。同様に、あるPAGが辺の端に'-'を持つ場合、他のPAGはその場所に'-'か'o'を持つことになる。

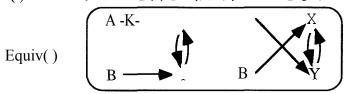
の同値クラスがあり、この違いはその同値クラスを表すPAGの違いで表すことができる。

例

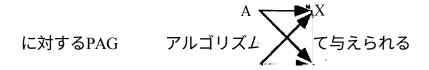
と すると、次のようになります:



この場合、Equiv()が2つのグラフを含む(だけ)ことを示すことができる:



の条件付き独立性事実を決定するオラクルを入力として与えられた発見アルゴリズムが出力するPAGは、で:



PAGがEquiv()について以下の事実を教えてくれることを観察してください:

- (a) Equiv()のすべてのグラフにおいて、XはYの祖先であり、YはXの祖先である。
- (b) Equiv()のどのグラフも、XやYがAやBの祖先にはなっていない。
- (c) **Equiv(**)のすべてのグラフにおいて、AとBの両方がXとYの祖先である。

PAGのすべての辺が $\mathbf{Equiv}($ )のすべてのグラフに現れるわけではないことに注意。これは、PAGの辺は、その辺で結ばれた2つの変数が、他の変数の任意の部分集合を与えられたときに $\mathbf{d}$ -connectedであることだけを示すからである。この例は、アルゴリズムが与えるPAGが' $\mathbf{o}$ 'の端点を含まないという点で非典型的であるが、PAGがいかに多くの情報を提供するかを示すものである。情



報量は少ないが、次のようなものもPAGであることに注意されたい:

A

の他のPAGもあります。



В

<sup>\*</sup>前掲の脚注をご参照ください。

同値クラスのすべてのグラフに共通する特徴で、アルゴリズムが出力する PAGでは捉えられないものがあるかもしれないからだ。この意味で、このアルゴリズムは完全ではない。しかし、このアルゴリズムは、2つの異なるグラフに対する条件付き独立性の試行が、アルゴリズムに同じPAGを出力させる場合、2つのグラフはd-separation同等であるという意味で「d-separation complete」であり、すなわち、試行は常に同じ答えを与える。このことは、CCDアルゴリズムを拡張して、より情報量の多いPAGを生成するようにしても、d-separationオラクルをさらに参照する必要がないことを意味する。つまり、アルゴリズムが出力するPAGを見れば、潜在的な問い合わせに対する答えはすでに(多項式時間で)推測することができる。

# §3 巡回グラフの発見アルゴリズム(潜在能力なし)

アルゴリズムを述べる上で、2つの細かい定義が必要です:

定義: PAG内のp-adjacent(隣接)

PAGの2つの頂点XとYは、それらの間にエッジがある場合、*p-adjacentと*なる、 PAG.\*の XY

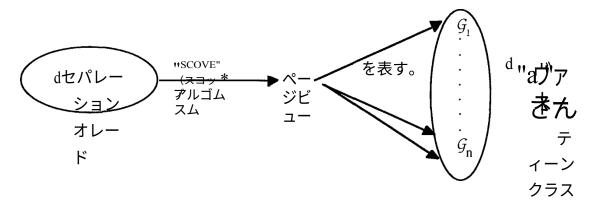
# **定義する:** 隣接度('l',X)

PAG '1'の場合、Adjacencies('l',X)は、'P'にエッジX-Yが存在する場合に、変数Yのセットを与える関数である。

'Pはアルゴリズムの進行に伴って変化するアルゴリズム内の動的オブジェクトであり、したがってAdjacencies('P,X')もアルゴリズムの進行に伴って変化する。

周期的因果関係発見(Cyclic Causal Discovery: CCD)アルゴリズム

ディスカバリーの全体的な戦略を以下に示します:



 $<sup>7^{\</sup>text{ここで}}$ 、他の場所と同様に、3つの末端 -, o, > のいずれかを示すメタシンボルとして「\*」を使用する。

#### CCDアルゴリズム

入力:形式の質問に答えるためのオラクル: "XはYからd個分離されているか"  $(X,Yc\ Z)$ をグラフにした 集合Zが 与えられたとき.

出力する: に対するPAG.

QA a) 完全な無向きのPAG 'Pを形成する、すなわち、変数AとBの各対に対して、 'Pは辺A noBを含む。

b) n - 0.

くり返す

くり返す

Adjacencies('I',X)X(Y) の頂点の数が n 以上となるような 'P' において p 個隣接する変数 X と Y の順序ペアを選択する; くり返す

の部分集合Sを選択し、Adjacencies('1',X)X(Y)の頂点がn個であることを確認する;

XとYがSでd分割されている場合、TからエッジX

noYを削

除し、

Sepset(X,Y)=S、Sepset(Y,X)=Sに設定する;

n個の頂点を持つAdjacencies('t',X)X(Y)のすべての部分集合Sが選択されるか、Sを与えられたXとYがd分割されるような部分集合Sが見つかるまで;

Adjacencies('l',X)X(Y) が n 個以上の頂点を持つような p 個の隣接頂点  $X \ge Y$  の順序付きペアがすべて選択されるまで; n=n+1である;

p個隣接する頂点X,Yの各順序ペアについて、Adjacencies('l',X)X(Y)がn 個以下の頂点になるまで。

QB 頂点A,B,Cの各三重項において、ペアA,BとペアB,CがそれぞれPにおいてp 隣接し、ペアA,Cが1においてp隣接しない場合、 $A^*-*B^*-*C$ をA->として方向付ける。BがSepset<A,C>にない場合のみ、 $A^*-*B^*-*C$ を $A^*-*B^*-*C$ とする。

'J{C。'i'の頂点<A,X,Y>の各三重項について、以下のようなものがある。

- (a) Aは、「P」においてXまたはYにp隣接しない。
- (b) XとYは'P'においてp-adjacentである。
- (c) X z Sepset<A,Y>
- (i) もし、Sepset < A, Y > ならば セプセット < A, X > ならば、X <-YとしてX o-\*Yを方向づける。</li>
- (ii) その他、Sepset<A,X>がSepset<A,Y>の部分集合でない場合、Sepset<A,Y>が与えられてAとXがd-connectedであればX<-YとしてX o-\*Yを方向づける</li>

.'Pの各頂点Vについて、以下の集合を形成する: Xe Local(P,V) は、Xが FにおいてVにp隣接するか、'FにおいてX->Y<-Vとなるような頂点Yが存在する場合のみである。 (Local('1',V) は各頂点Vに対してI回計算し、Vの進行に応じて変化しない)。 V m = V 1.

くり返す

くり返す

A->B<-C で あ る が 、 A と C が p 隣 接 し て お ら ず 、  $Local('i',A)X(Sepset<A,C>\{B,C\})$ がm以上の頂点を持つような順序付き三重項<A,B,C>を選ぶ。

くり返す

m 個の頂点を持つ集合 T m Local('P,A)X(Sepset<A,C>
,C))選択; Aと

CがTでd個に区切られている場合 セプセット <A,C>の

{B)であれば、A->B<-Cの三重項をA-.&<-Cとして方

向づけ、TSepset<A,C>{B}を SupSepset<A,B,C> に記録します 。

m 個 の 頂 点 を 持 つ す べ て の 部 分 集 合 T Local('F,A)X(Sepset<A,C>(B,C})) が選択されるか、Aおよび Cに対するd個の分離集合がSupSepset<A,B,C>に記録されるまで。

A->B<-C、(すなわちA-Cではない)、AとCがp隣接しておらず 、Local('P,A) X(Sepset<A,C>(B,C)) がm以上の頂点を持つ三角形 がすべて選択されるまでです。

 $m = m + 1 \sigma \delta_0$ 

A->B<-CだがAとCがp隣接しないような順序付き三重項<A,B,C>が、 Local('F,A)X(Sepset<A,C>(B)が頂点数m未満となるようなものであるかどうか。

.となるような異なる頂点を持つ四重極<A,B,C,D>が存在する場合。

- (i) A-B<-Cで「1」。
- (ii) A->D<-C または A- Fの-C
- (iii) BとDは「P」においてp-adjacentである。

Dが SupSepset<A,B,C> にない場合、B\*-oD を B->D として '1' に 方向付ける else D が SupSepset<A,B,C> にある場合、B\*-oD を B\*-D として 'P' に方向付ける

.となるような異なる頂点を持つ四重極<A,B,C,D>に対して

- (ii) Dは、「P」において、AおよびCの両方にp隣接しない。
- (iii) BとDは「P」においてp-adjacentである。

もしAとCがd-connected与えられたSupSepset<A,B,C>(D) ならばB\*-°DをB->D として'P'で方向付ける。

### §3.2 健全性と完全性 定理1 (**健全性**)

入力として、(環状または非環状)グラフJにおけるd分離関係のオラクルが与えられたとき、次のようになります。

のPAG'1'を出力します。

に適用されるd-separationオラクルの答えから、アルゴリズムの各セクションが正しい推論を行うことを示すことにより、定理1を証明する。 証明はセクション5で行われる。

実際には、d-separation oracleの近似は、対応する偏相関が消失する統計的検定として実装することができます。サンプルサイズが際限なく大きくなるにつれて、統計的検定の有意水準を系統的に下げれば、その検定のタイプIとタイ

プIIの両方の誤りの確率がゼロに近づき、統計的検定は確率1で正しいことになる。もちろん、これはCCDアルゴリズムが現実的なサンプルサイズにおいて信頼できることを保証するものではない。アルゴリズムの信頼性は、以下の要因に依存します:

- 1. Causal Independence Assumptionが成立しているかどうか(潜在変数がないかどうか)。
- 2. Causal Faithfulness Assumptionが成立するかどうか。
- 3. 統計的検定が行う分布の仮定が成り立つかどうか。
- 4. 代替案に対する統計的検定の検出力。
- 5. 統計的検定で使用した有意水準。

今後は、これらの要因に対するアルゴリズムの感度を、シミュレーションデータ で検証していきたいと考えています。

#### 定理2 (d-separationの完全性)

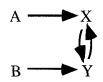
CCDアルゴリズムが、グラフJのd個の分離オラクルを入力として与えられたとき、 PAG +i +2をそれぞれ出力として生成する場合、 +iは以下の場合にのみ、+2とは同一である。

と はd-separation equivalent、すなわち**Equiv(J)で**あり、逆もまた然りである。

この証明は、先に述べたRichardson (1994b)の同値性の特徴づけに基づいている。(定理1から直接、andが等価であれば+iは'P2'と同一であることが導かれる)。

#### §3.3 CCDアルゴリズムの軌跡

次のグラフのd分離オラクルを入力とした場合のアルゴリズムの動作を説明する:



初期完全無向性PAG「P.



#### セクションA:

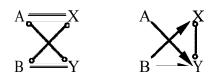
A,Bは空集合でd分割されているので、アルゴリズムはA,B間の辺を取り除き、Sepset<A,B> = Sepset<B,A> = Øを記録します。これはこのグラフにおいてp 隣接しない唯一の頂点ペアなので、SA 'P 以降は次のようになります:



B Y

セクション§B

Xa Sepset<A,B>、Ye Sepset<A,B>なので、AXo-oB、Ao-oYo-oBはそれぞれA->X<-B 、A->Y<-Bという向きになる。したがって、\$Bは次のような配向を行う:



**セクション 'J**|C - この場合、オリエンテーションは行いません。

セクションD

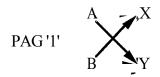
A,Bは(X,Y)でd分割されているので、アルゴリズムはSupSepset<A,X,B> = SupSepset<A,Y,B> = (X,Y) を記録し、A->X<BをA-X-B、A->Y<BをA-Y.y-B として方向づけする。したがって、SDの後、PAG'1は次のようになる:



セクション

四重極<A,B,X,Y>は、(i) A- Xy-B, (ii) A- Yy-B, (iii) XとYがp隣接するように、 \$E項の条件を満たしている。Ye SupSepset<A,X,B>なので、辺Xo-oYはY-oXのように向きを変える。Xe SupSepset<A,Y,B>なので、この辺はさらにY-Xのように向きを変える。

Section - この場合、オリエンテーションは行わないので、出力されるPAGは次のようになります:



# §3.4 CCDアルゴリズムの複雑さ

MaxDegree(J) = MaxJ\$XIY'-X、またはJJのXYとする、であり、<math>MaxAdj MaxAdj Max MaxAdj Max

ここで、n=Jの頂点の数、k=MaxAdj(J.

 $MaxAdj(J (MaxDegree(J)^2) なので、MaxDegree(Q=r)を使えばこのステップは <math>O(n^{r^{z^+}})$ となります。最悪の場合の複雑さの境界としても、これは非常に緩い

ものであることを強調しておく。この境界は、グラフ内のp隣接していない 頂点のすべてのペアが、それらの一方にp隣接するすべての頂点からdだけ離 れているグラフが存在することを仮定しているのである。

ステップBでは、d-separationの追加テストは行いません。

ステップ\$Cは、与えられた条件を満たす各トリプルに対して、最大で1つのd 分離テストを実行する。したがって、このステップはO(n3)である、

最悪の場合、ステップDが実行するd分離のテスト数は、次のように制限されます。

の合計数です。 
$$3 - \frac{n}{3} \sum_{i=0}^{n-3} \binom{n-3}{i} < \frac{(m+1)^{n3} n - 3}{m!}$$
 Dでオラクル相談

ここで、 $m=MaJ\mid Loca1('P,X)\mid$  は\$Dにある。m  $\|$  (MaxDe **銀の** アテップはるか、O(n')  $_{z_4}$ ).

今回もルーズバインドです。

ステップEではd分離のテストは行わず、ステップ\$Fでは条件を満たす各4重極に対してせいぜい1回のテストを行う。したがって、このステップはO(n4)である(ただし、多くのグラフでは、4つの条件をすべて満たす四重極はごくわずかである可能性がある)。

#### *§3.5* 部分祖先グラフ(PAG)と傍系誘導パスグラフ(POIPG)

ここで紹介する拡張グラフ(Partial Ancestral Graphs)は、SpirtesのPartially Oriented Inducing Path Graphs(POIPGs)で使用される記号のスーパーセットを使用するが(Spirtes ei al., 1993参照)、辺に与えられる方向のグラフ解釈は異なる8.PAGの構造を定式化した後、私は、潜在変数と選択バイアスの存在下で因果推論を行うSpirtesのFCIアルゴリズム(Spirtes、Meek and Richardson 1995参照)の出力は、POIPGであるが、直接PAGとして解釈できるのではないかと考えた。その後まもなくSpirtesはこの推測を証明し、現在ではFCIアルゴリズム出力のPAG解釈を採用している9。

# §4 d-セパレーション 同等性

CCDアルゴリズムはd-separation completeであるため、このアルゴリズムに含まれる方位規則を用いて、d-separation equivalenceアルゴリズムを構築するこ

とができる。以下に、有向環状 グラフを

グラフまたは無向 入力として与える

と、CCDアルゴリズムがd-separationオラクルだけを与えて出力するのと同じ PAGを出力するアルゴリズムを紹介する。 ただし、このアルゴリズムはCCD アルゴリズムと異なり、MaxDegree(J) を固定しない場合でも頂点数の多項式 時間で実行する。したがって、このアルゴリズムは、2つのグラフのdseparationの等価性を多項式時間でテストするために使用することができる。

<sup>\*</sup>具体的には、PAGでは辺A<-\*BのA端にある矢印の頭が、同値クラスのどのグラフでもAが Bの祖先ではないことを意味するのに対し、POIPGではSpirtesがA-B間の誘導経路と呼ぶも のの方向に関する情報を示す。

<sup>9</sup>この証明の多くのステップは以前に証明されている。

ct al., 1994.

<sup>10</sup>実際には、PAGに存在する記号のサブセットで十分である。A->ByMが内包する条件付き 独立性は、潜在変数の有無にかかわらず、有向無サイクルグラフでは内包されないのであ る。

**定義する:**親(X)、子(X)、アン(X)、子孫(X)

Parents(X) = (VIMX e X, VはQにおけるXの親), Chi1dren(X) = {VIMX e X, VはJにおけるXの子), An(X) = (VIMX e X, VはQにおけるXの祖先, および Descendants(X) = (VIMX e X) であり、VはQにおけるXの子孫である。

巡回型PAG-From-Graphアルゴリズム

**入力**有向環状グラフまたは無向環状グラフ

出力する: CCD PAG「F for

a 頂点集合Vの各頂点のペア間にエッジo-oを持つ完全無向性PAG 'Pを形成する。

各頂点の順序付きペア<A,B>について、次のような集合を形成する:

SA,B' チルドレン(A) m An((A,B))

TA,B= (親(SA,B (A)) SA,B) Descendants(Children(A)mChildren(B)) (A,B)) 各順序付きペア<A,B>について:

**TA**,Binが与えられたとき、AとBがd個に分離されている場合 が与えられたとき、**TA**,BinのSepset<A,B>とSepsetを記録する。

<B,A>を削除し、エッジABB を'F'から削除する。

else もしAとBがTB.Aintで

d個に分かれるなら、TB.Ain

Sepset<A,B>とSepset<B,A>を記録し、エッジAo-oBをFから削除する。

b 頂点A,B,Cの各トリプルで、ペアA,BとペアB,CがそれぞれPにおいてp隣接するが、ペアA,CがPにおいてp隣接しないものについては、BがSepset<A>にない場合のみA\*-\*B\*-\*CをA->として方向付ける。BがSepset<A,C>にない場合のみ、A\*-\*B\*-\*CをA\*-\*B\*-\*Cとする。

'JJc 'Pの頂点<A,X,Y>の各トリプルが以下のような場合。

- (a) Aは、「P」においてXまたはYにp隣接しない。
- (b) XとYは'P'においてp-adjacentである。
- (c) X z Sepset<A,Y>

Sepset<A,Y>が与えられ、AとXがd-connectedである場合、Orient X o-\*Y as X<-Y

\$d A->B <-C, AとCがp隣接しないような三重項<A,B,C>または<C,B,A>について、次の集合を形成せよ:

QA,B,C 子供(A) アン((A,B,C))

RA,B,C= (親(QA,B,C (A)) QA,B,C)X(Descendants(Children(A) mChildren(C))) (A,C)である。)

**RA,B,C** (B)でAとCがd個に分かれる場合、A->B<-CをA-Cとして方向づけ、R,B,C (B) in SupSepset<A,B,C>記録します。

'J{e 以下のような異なる頂点の四重極<A,B,C,D>が存在する場合。

- (i) A-yB<-Cで「P.
- (ii) A->D<-CまたはA->D<-Cで下、
- (iii) BとDはTにおいてp-adjacentである、

で、DがSupSepset<A,B,C>になければB\*mDをB->Dとして'I'に 方向づける else DがSupSepset<A,B,C>にあればB\*-oDをB\*-Dと して'I'に方向づける。

f以下のような異なる頂点を持つ各四角形<A,B,C,D>について。

- (i) P "OA->By-C
- (ii) Dは, 「I」において、A及びCの双方にp隣接していない。

SupSepset<A,B,C

>(D)が与えられたとき、A

およびDがd-connectedであれば、B\*-oDをBとして方向づける。

'P'で>D。

このアルゴリズムが正しいという証明は省略するが、CCDアルゴリズム自体が正しいという証明と非常によく似ている。2つのアルゴリズムの主な違いは、CCDアルゴリズムがSepsetとSupSepsetの集合を探索し、多くの異なる候補をテストしなければならないのに対し、PAG-from-graphアルゴリズムは、グラフそのものがあれば、これらの集合を構成するというはるかに単純なタスクに直面することにある。

定理2により、2つのグラフ $\epsilon$ を入力とすると、 $\epsilon$ と $\epsilon$ がd-separation同等である場合に限り、 CCDアルゴリズムは同じPAGを出力として生成するので、上で与えられたアルゴリズムは、 2つの有向グラフのd-separation同等性を決定する手続きを提供する。さらに、このアルゴリズムは複雑さ $O(n^7)$ であり、nはグラ

フの頂点の数である。このアルゴリズムは、Richardson(1994b)で示された  $O(n^9)$ の手順よりも大幅に高速である。

\$c-\$fのルールが持つd-separation関係の組み合わせが、\$c-\$fのルールが持つd-separation関係の組み合わせと一致することから導かれる。

は、どのDAGにも内包されない(Richardson 1994, 1994b参照)。

## §5 証明

### §5.1 定理1の証明

定理1: (健全性) 有向(環状または非環状)グラフGにおけるd個の分離関係をテストするためのオラクルが入力として与えられたとき、出力はJに対するPAG'Pである。

証明する。証明は、CCDアルゴリズムの各セクションが、,のd-separationオラクルからEquiv()の任意のグラフの構造への正しい推論を行うことを示すことによって進められる。

### セクション A-\$B

### レンマ1

グラフJのPAG'Pが与えられたとき、以下のうち少なくとも1つが成立すればよい:

- (i) でXがYの親である、または
- (ii) でYがXの親である 、または
- (iii) XとYの両方の子である頂点Zがあり、ZがXかYのどちらか(または両方)の祖先であるようなものであること

の他の頂点の 部分集合Sql(X,Y)があれば、XとYは1'でp-adjacent、すなわちd-connectedである。

証明する: (i)が成立する場合、任意の部分集合Set(X,Y)が与えられると、経路XmYはXとYをd-連結し、したがってXとYはグラフJの任意のPAG Pにおいてp-隣接する。(ii)が成り立つ場合も同様につまらない。

もし(iii)が成り立つなら、XまたはYの祖先であるXとYの共通の子(Z)が存在

する。したがって、 $Xm\ ZmA$ } という有向パスが存在する。 $M...An\ Y\ (n\ 0)$ 、または有向パスYwZmA1 ...が存在する。 $An\ O$ いずれかである。-般性をあまり損なわずに、前者であると仮定する。他の変数の任意の部分集合をSとする( $Set(X,Y\ )$ )。考えるべきは2つのケースである:

ケース1: S(Z,Ai ·An1 · Ø;この場合、XMZ '=-Yはd-connecting pathである。ケース2: S(Z,Al ·An)' &; then XmZmA}M...An Y iSはd-connecting pathである。..

### レムマ2

頂点Vを持つグラフJにおいて、次のようなホールドル.

- (i) において、XはYの親ではない。
- (ii) でYはXの親ではない、とのこと。
- (iii) ZがXとYの共通の子であり、XまたはYの祖先である場合、頂点Zは存在しない。

<sup>11</sup>i.e. レンマ1の先行詞の条件はいずれも成立しない。

とすると、任意の集合Qに対して、XとYは次のように定義されるTが与えられるとd分離される:

 $S = \mathcal{F} \mathcal{N} \mathcal{V}(X)$  祖先((X,Y)mQ))

T = (Parents (S (X)))

S (X) (子孫

(子供(X) mChildren(Y))。

(X,Y)) である

0

証明する: Tのすべての頂点はXの親、Sの頂点、Sの頂点の親のいずれかであり、したがって、Tのすべての頂点はXまたはYまたはOの祖先である。

逆にTが与えられてXとYを結ぶパスdが存在するとする。

XからYへの経路上の最初の頂点をWとする(WAYは(i)と(ii)から成り立つ)。考えるべきケースは2つある:

ケース1: パスにはX'-W...Yが含まれる。

小ケースA: Wは、XとYの共通の子の子孫ではない。

Wが共通の子の子孫でない場合、We T(WはXの親であるため)。したがって、Wはパス上の非共有物であるので、T小ケースB: WはXとYの共通の子の子孫であることを考えると、パスはd-connectingでない。

この場合、XはWの子であるから、XはXとYのある共通の子Zの子孫であることになるが、これは③が成立するという仮定に反する。

ケース2: パスにはXmW...が含まれている。Y.

小ケースA: WはXとYの共通の子の子孫ではない。パス

上の次の頂点をVとする。

サブサブケースa. パスはX-'WwV...Yを含む。

このパスがd-connectingである場合、Wの子孫はTにいるが、Wの子孫は

XまたはYまたはOの祖先である。

パスはd-connectに失敗する。

Q.したがって、Wの何らかの子孫がTにいれば、WはSにいることになる。さらに、Wは(仮説により)共通の子の子孫ではないので、Vr Y. また、Vは共通の子の子孫ではない。なぜなら、その場合、仮説に反して、Wも共通の子の子孫になるからである。X V r Y, so Ve T. したがって、Vは非共役として発生するが、Ve T, したがって、Tが与えられると

小項目b: パスにはXmWwV...Yが含まれる。

しかし、WがTのある頂点の祖先である場合、Tのすべての頂点はX、Y、Qの祖先であるため、WはX、Y、Qの祖先である。したがって、We Sは、Wは(仮説により)XとYの共通の子の子孫ではなく、Xr W Y, W e Tであるから、Wはこのパス上の非共役として発生する。

は、Tが与えられたとき、X-'WwV...Yのどのパスもd-connectに失敗することになる(これは、V=Yの可能性を許容する).

サブケースB:Wは共通の子の子孫である。

したがって、Descendants (W)  $T = \emptyset$  、Wの子孫はXとYの共通の子の子孫でもあるので、Tには出現しない。

Wの子孫は条件付けされていないので、Wがd-connecting path上に発生する場合、Wはnon-colliderである。このようなd-connecting path上の他のどの頂点もnon-colliderでなければならないことを示すことができる: パス上にコライダーがあるとすると、Wの後にパス上の最初のコライダー、仮にSA, B, C>を取り、パスが次のような形になるようにする: XmWmV-'...-'...-しかし、もし経路がd-connectingであれば、Bの子孫、例えばDが条件付けされたことになり、すなわちDe Tとなる。しかし、DはBの子孫であり、BはWの子孫であるので、Descendants(W) $T=\emptyset$ であり矛盾となる。

しかし、この場合、WはXとYの共通の子の子孫で*あり、*Yの祖先となるが、これは(iii)と矛盾する。

これで、レムマ2...の証明は完了です。

#### コローリーA

グラフ および の PAG 'P与えられたときX と Y は、以下のいずれかが in で成立 する場合にのみ、'1' で p 接している:

- ① XはYの親である、または
- (ii) YはXの親である、または
- (iii) XとYの両方の子である頂点Zがあり、ZがXかYのどちらか(または両方)の祖先であるような場合。

証明する:もし」はレンマ1により証明され、「もしだけ」はレンマ2よりQ-Ø

で逆説的に導かれる。

定義: グラフにおけるp-adjacent

従って、頂点X,Yのペアが $\mathcal{O}$ ラフ()  $\mathcal{C}$ p-adjacent  $\mathcal{C}$ あることは、(i), (ii), (iii)の少なくとも1つが成立することを意味する、と言うことができます。

のすべてのPAGにおいてp-adjacentである場合にのみ、頂点のペアがp-adjacentであることは、Corollary Aから導かれる。このため、グラフとPAGのどちらを指しているのかを明示せずに、変数のペアをp-adjacentと呼ぶことがある。

コロラリB

グラフにおいて、XとYがある集合Rによってd個分離されている場合、XとYは、すべての頂点がXまたはYの祖先である集合Tによってd個分離され、さらに、TがXにp個隣接する頂点の部分集合であるか、XがYの祖先であるかである。

**証明する:** XとYはある集合Rで

d個に区切られているので、XとYはp個に隣接しない

。Q=Øとして、Lemma 2を適用する。その場合

 $T = (Parents(S \{X)) S) X (子孫 (子供 (X) m子供 (Y)) 。 {X,Y})$ 

Sに含まれるすべての頂点はXまたはYの祖先であり、Tに含まれるすべての頂点はXの親、Sの頂点、またはSの頂点の親のいずれかであり、したがってTのすべての頂点はXまたはYの祖先であることが、レンマ2より、Tを与えられたXとYはd-分離していることがわかります。

あとは、TがXにp隣接する頂点の部分集合であるか、XがYの祖先であることを示すだけである。CがXの祖先である場合、VはXにp-adjacentであり、CがYの祖先である場合、XはYの祖先である・・・。

### レンマ3

グラフ においてAとBがp隣接していない場合、AとBは、Aにp隣接する頂点の集合TAか、Bにp隣接する頂点の集合TBによってd分離していることになります。

証明する:レンマ2の補則Bにより、AとBがp隣接していない場合、TAwhere

があればAとBはd分離していることになる:

SA= チルドレン(A) 祖先((A,B}))

 $To = (親(S \qquad {A})) \quad S) \ X (子孫(子供(A) m子供(B))。 (A,B)) である、$ 

ケース1: AはBの祖先ではない

付言Bからレンマ2より、AはBの祖先ではないので、TAz ( $X \mid X$  p-adjacent にA)。

ケース2: BはAの祖先ではない。

ここで、TBはケース1のTAと対称に定義される。

ケース3: BはAの祖先であり、AはBの祖先である。

ここで、TA中の任意の頂点Vは、Aの子、Aの親、またはそれ自体がAの子であるSA中の頂点Cの親のいずれかである。明らかに、最初の2つのカテゴリーの頂点はAにp隣接している。AはBの祖先であり、BはAの祖先であるから、 $S_A$ のすべての頂点はAの祖先であることになり、したがって

TAのすべての頂点はAにp隣接している[TBのすべての頂点はBにp隣接している場合もあることに注意]。

アルゴリズムの入力が有向グラフJのd-separationオラクルであるとする。ある組の変数AとBをd-separate するセットを見つけるために、アルゴリズムはPにおいてAにp-adjacent する頂点のサブセットとPにおいてBにp-adjacent する頂点のサブセットをテストして、AとBをd-separate するか確認する。においてAとBにp隣接する頂点は、常に $F^{2$ においてAとBにp隣接する頂点の部分集合であるから、ステップAは、.においてAとBをd分離する集合があれば、AとBをd分離する集合を見つけることが保証されるということは、レンマAから成り立つ。

### セクション 'J{B

次のレンマは、(CCDアルゴリズムのように)その集合のすべての適切な部分 集合をすでにテストしていない限り、集合を決してテストしない探索によっ て見つかるd-分離集合の重要な特性を与えるものである。

Lemma 4 グラフJにおいて、YがXやZやRの祖先でないとする。 Ye Sと、Yを含まないすべての適切な部分集合T s.t. RmTmSが、XとZをd-連結するような集合S、RSSが存在するなら、Sは( )においてXとZをd-連結する。

**証明** T"=Ancestors({X,Z}wR)mSとする。ここで、RQ"、T°はSの適切な部分集合であるから、仮説により、T "を条件とするd-connecting path、Pが存在する。d-連結パスの定義により、P上のすべての要素は、終点のいずれかの祖先か、T "のいずれかである。さらに、定義により、T "のすべての要素はXかZかR

の祖先である。したがって、経路P上のすべての要素はXかZかRの祖先である。YもSET "のどの要素もXかZかRの祖先ではないので、IT'の頂点はP上にないことになる。

IT'の要素はパス上にある(TでアクティブなコライダーはすべてSでもアクティブである)。したがって、PはSを与えてもXとZをd-connectする...。

### 定義最小d分離集合

XとYがSを与えられてd分離し、Sの任意の適切な部分集合を与えられてd連 結する場合、SはXとYの*最小d分離*集合である。

<sup>\*\*</sup>これは、頂点X,Yのペアがp個隣接している場合、それらをd個分離する集合が見つからないため、XとYの間の辺が削除されないからです。

ここで役に立つのが、次のようなコローリーである:

**コロラリ:** グラフJにおいて、SがXとYの最小d分離集合であるとき、S中の任意の頂点はXまたはYの祖先である。

**証明する:** 定理4から、 $R=\emptyset$  を用いて、禁則処理により、直ぐに帰結する。.

このことから、\$Bの非遮蔽非コライダー配向規則が正しいことがわかる。AとB、BとCがp隣接しているが、Sepset(A,C)にBが含まれている場合、探索手順の性質から、Sepset(A,C)のどの部分集合でもAとCはd分離されないことがわかる。したがって、A\*-\*B\*-\*Cは、PAGにおいてA\*-\*B\*-\*Cとして配向されるべきである。

この後の証明では、以下のLemmaを頻繁に使用する。(これは、*Causation, Prediction and Search,* Spirtes *et al.,* 1993 のLemma 3.3.1 の環状ケースを拡張したものである。証明はRichardson(1994)を参照)。このLemmaは、「短い」d-connecting pathのセットをまとめて1つのpathを形成することができる条件を与える。

**CPS** Lemma **3.3.1**+ (Richardson 1994b)

頂点 V の集合にかかる有向(環状または非環状)グラフ において、 以下の条件が成立する IF:

- (a) Rは、VにおけるAからBまでの頂点の列であり、R  $< A Xo_. Xn + 1 B>$ 、Hi, Oin , XiXi + 1(Xiは*ペア的に異なるだけ*、すなわち必ずしも異なるわけではない)となるようなものである。
- (b) S m W(A,B)
- (c) Iは、以下のような無向きのパスの集合である。
  - (i) Rの連続する頂点XiとX;+iの各対に対して、XiとXi+1をd-connectするユニ

- ークな無向パスがIに存在し、R (Xi'Xi+1) が与えられる。
- (ii) Rのある頂点XkがSにある場合、IのうちOkを終点とする経路は はXkで衝突する。(すなわち、両方のパスがXkに向けられる)
- (iii) がRに存在する3つの頂点Xk-1.Wk.について、XkとXk+1.がXkで衝突する場合。Xk+がRに発生し、Xy-iとXpを結ぶIのd-connecting path、Xkと Xk+1.がXkで衝突する場合、XpはSに子孫を持つ。

*そして、*Sが与えられたときに、A- $\mathbf{X}0$ とB- $\mathbf{X}$ viiをd-connectするパス $\mathbf{U}$ が存在する。

次のLemmaは、Bのオリエンテーションルールの正しさを示している:

**Lemma 5:** AとBがp-adjacent、BとCがp-adjacent、BがAまたはCの祖先である場合、AおよびCは、任意の集合S、s t. A,B,C e Sが与えられるとd-connectedである。

証明する: 一般性を損なわない範囲で、BがCの祖先であるとする。Sを条件として、AとCがd-connectedであることを証明すれば十分である。Bの(適切な)子孫がS内にあるかどうかによって、2つのケースが考えられる。

ケース1: Bのある(適切な)子孫はSにいる。

レンマ1とAとBのp-隣接性から、任意の集合Sが与えられたとき、Sを条件として、AからBへのd-連結パスが存在し、同様にBからCへのd-連結パスが存在することがわかる。Bの子孫はSに存在するが、B自身はSに存在しないので、AからBへの経路とBからCへの経路がBで衝突するかどうかは問題ではないので、Lemma 3.3.1+ を簡単に適用すれば、AとCはd-connectedであることがわかる。

ケース2: Bの子孫はSにいない。

AとBをd-連結する経路が存在することは、レンマ1から導かれる。Bの子孫は有向経路Be...-'Cを条件としていないため、d-連結する。Sによって、AとCがd-connectedであることは、Lemma 3.3.1+によって、Sが与えられていることから、次のようになる。

AおよびBがp隣接し、BおよびCがp隣接し、AおよびCがSepset<A,C>、Be Sepset<A,C>でd分離される場合、BはAまたはCの祖先ではないので、A\*-\*B\*-\*CはA->B<-Cとして方向付けられるべきであることが逆接により得られる。

# セクション\$C

定理6: グラフJにおいて、XがYの祖先であるとし、Sが与えられたときにAとYがd分離し、Sが与えられたときにXとYがd連結し、Xc Sが与えられたときにAとXがd分離するような集合Sが存在すれば、Sが与えられたときにAお

よびXはd分離しているとする。

証明する: XをYの祖先とし、SをXとYがSでd-connected、Xc S、AとYがSでd-separatedとなる任意の集合とする。矛盾のために、AとXがSでd-connectedだとすると、Aから

X.現在、2つのケースがあります:

ケース1: Xの何らかの子孫がSにいる。

Xz Sで、Xの何らかの子孫がSにいるので、Lemma~3.3.1+ から、Sを与えられたAからXへのd-connecting path ESを与えられたEXからEYへのEConnecting path を合わせて、ESを与えられたEAからEYへのEConnecting pathを形成できることになる。これは、ESを与えられたEAとEYがED・かると仮定したので矛盾している。

ケース2: Xの子孫はSにいない。

この場合、XはYの祖先であるため、d-連結有向パスXm...BYが存在する。ここでも、レンマ3.3.1+により、AからXへのd-connecting pathとXからYへのd-connecting directed pathを合わせて、AからYへのd-connecting pathを形成することができる。

Sが与えられれば、AとYはd分離されると仮定していたので、これは再び矛盾することになる。

ここまでで、前件の条件下で、SがAとXのd分離集合であることを示しました

Lemma 7: A、X、Yを グラフ

の3頂点とし、XとY

がp隣接するようにする。というような集合Sがある場合:

- (i) Xc Sです、
- (ii) AとYは、Sが与えられるとd個に分離される。
- (iii) AとXは、Sが与えられるとd-connectedとなる。

すると、XはYの祖先ではない。

証明する: XとYがp-adjacentであれば、XとYは他の変数のすべての部分集合によってd-connectedである。SはAとYをd-separateするが、AとXをd-connectするので、XはYの祖先ではないことがレンマ6から導かれる...。

ステップ\$Cは、単にLemma 7を適用するだけである。<A,X,Y>が次のような三重項であるとする:

- (i) AはXまたはYにp隣接しない
- (ii) XとYは「P」においてp隣接しており
- (iii) X z Sepset<A,Y>

C(i)は次のようにして正当化される。Sepset<A,Y>がSepset<A,X>であるとする。Sepset<A,X>を見つけるためにAで使われた探索手順は、Sepset<A,X>をテストする前に、Sepset<A,X>のすべての部分集合がAとXをd分割するかどうかテストすることを思い出してください。特に、Sepset<A,X>の場合、Sepset<A,X>があればXとXはX0-connectedなので、X1-connectedなので、X2-connectedなので、X3-connectedなので、X4-connectedなので、X5-connectedなので、X5-connectedなので、X6-connectedなので、X7-connectedなので、X7-connectedなので、X8-connectedなので、X8-connectedなので、X9-connected X9-connected X9-co

、Lemma 7を適用してX \*-\*Y をX<-Yとして方向づけることができる。

C(ii)は次のようにして正当化される。Sepset<A,Y>が与えられたとき、AとXがd-connectedであるとする。X c Sepset<A,Y>なので、S = Sepset<A,Y>とすると、再びLemma 7を適用してX \*-\*YをX<-Yとして方向づけることができる。

C(ii)のSepset<A,X> Sepset<A,Y> という条件は、SC(ii)を正しくするために必要ではなく(この規則の正当化において何の役割も果たしていないことからも明らか)、d-分離のテストを冗長に行うのを避けるために含まれています。 Sepset < A, X > Sepset < A, Y > の場合、Sepset<A,Y > が与えられると、AとX はd-connectedではない。(これはYcがSepset<A,X>だからです。したがって、X\*-\*Yは、C(i)の別の適用により、最終的にPAGの中でX->Yとして配向される。このことから、Xは

<sup>13</sup>アルゴリズムの正しさを証明するためにこの最後の事実は必要ないが、この推論が可能な状況を示しているため、この事実を含める。

のYの祖先である。レンマ6により、XはYの祖先であるため、Sepset<A,Y>が与えられたとき、AとXはd-connectedではない)。Sepset<A,Y> - Sepset<A,X> ならば、(Sepset<A,X>の定義から)AとXがd-connectedでないことは既知であるから、Sepset<A,Y>でAとXがd-connectedかどうかを検証する必要はない。

Richardson(1994b)で示されたように、2つの環状グラフはd-separation関係では「局所的に」一致しても、遠い変数間のあるd-separation関係では一致しないことがあるので、このタイプの規則は環状発見アルゴリズムに必要である。(このような規則が、統計的検定によって一般に「遠い」変数が独立であることが判明している実データで使われるかどうかは別問題である)。

## セクションD

このセクションでは、シールドされていないコライダーのための「余分な」d 分離集合を見つけるために検索します。非周期的な場合、頂点X\*-\*Y\*-\*Zの 三重集合で、XとYがp隣接、YとZがp隣接、しかしXとZがp隣接していないも のは、XとZのd分離集合がすべてYを含む、またはXとZのd分離集合がすべて 以下を含まないという特性を持つ。

しかし、環状の場合、XとZがYを含む集合とYを含まない集合によってd分割 されることがあり得るのである<sup>14</sup>。XとZがYを含まない集合によってd個分離 されている場合、YはXやZの祖先ではないことは、すでにレンマ5からわかっ ている。これには次のレンマとコローリで答える:

**定理8:** グラフにおいて、YがXとZの共通の子の子孫である場合、XとZはYを含む任意の集合によってd-connectedとなる。

証明する: YがXとZの共通の子Cの子孫であるとすると、XwC'=-Zの経路は

、Yを含む任意の集合を与えてXとZをd-connectする。

コロラリ:グラフにおいて、XとYがp隣接し、YとZがp隣接するが、XとZがp隣接せず、YがXまたはZの祖先ではなく、YeS、XとZがSを与えられてd分離するような集合Sがある場合、YはXとZの共通の子の子孫ではない。

これは、潜在変数を持つ非周期的なケースでも同様です。

Lemma9: グラフにおいて 、YがXとZの共通の子の子孫でない場合、XとZは次のように定義される集合Tでd分離される:

**証明する:** Q=(Y)を用いて、 $X \ge Z$ がTを与えられたときにd分割されることは、Lemma 2から成り立つ。あとは、Ye Tを示すだけである:

ケース1: YはXの子である。

YがXの子であれば、YはYの祖先なので、Ye S。YはXとZの共通の子の子孫ではないので、どちらの場合も、Ye T。

ケース2: YがXの親である

YはXの親であり、YはXとZの共通の子の子孫ではないので、Ye T. ケース3: XとYはXまたはYの祖先である共通の子Cを持つ。

CはXの子であり、XまたはYの祖先であるから、Ce S. YはCの親であり、Yは XとZの共通の子の子孫ではないので、Ye T. 。

レンマ10: XとZがある集合Rによってd分離されている場合、すべての集合Q Ancestors(R (X,Z))X(X,Z} について、XとZはR Q に よ っ て d分離される。

**証明する:** 矛盾のために、 $X \times Z \times E$ 結ぶ経路P dが存在すると仮定すると、R Q.P上のすべての頂点は、X、Z、R Qのいずれかの祖先であることがわかる。 QはAncestors(R (X,Z))なので、P上のすべての頂点はX、ZまたはRの祖先であることになる。P上のXから最も遠いコライダーでXかつR以外の祖先(そのようなコライダーが存在しない場合はX)であるものをA、P上のAの後の最初のコライダーでXかつX以外の祖先であるものをX0とする(そのようなコラ

イダーがない場合はZ)。X'-...'=-A、Be...-'Zの経路は、AおよびBの定義により、これらの経路上のどの頂点もRに存在しないので、明らかにRを与えられたd-connectingである。

R.さらに、A-B間のPのサブパスも、すべてのコライダーはRの祖先であり、 非コライダーはRに存在しないので、仮説により、PはR Qでd-connectするので、Rでd-connectすることになる. Lemma 3.3.1+ により、RでXとZをつなぐパスがある。

セクション\$Dの探索は、'F'の各三重項AmB'-Cを順番に考え、R (B} Sepset<A,C>) が与えられたときにAとCがd-separatedであるような Local(T,A)X $\{C\}$ の部分集合である集合Rを見出そうとするものである。この場合、Bを含み、AとCをd-separateし、すべての頂点がAの親、Aの子、またはAの子の親のいずれかである、レンマで与えられた集合Tという部分集合が存在することが、レンマ9から導かれます(T Local('F,X).Sepset<A,C>はAとCの最小d-分離集合であるから、

となり、Sepset<A,C> Ancestors ((A,C))X(A,C) (c Ancestors (T(A,C))) が成立することがわかる。したがって、レンマ10により、T Sepset<A,C>もAとCをd-separateする。

読者は、\$DがT Local('P,A))という形式の集合をテストするのではなく、T Sepset<A,C>, (ここでT Local('I',A))という形式の集合をテストするのはなぜかと思うかもしれませんが、Lemma 9は後者の種類の検索が、Bを含むAおよび Cのd分割集合を見つけることに成功することを示しました。答えは、レンマ10より、AとCをd分割する任意の集合T Local(T,A) は、T Sepset<A,C>もAとCをd分割するようなものであるが、その逆は成り立たないということである。特に、T Sepset<A,C>がAとCをd-separateするような最小の集合Tは、AとCをd-separateする最小の集合Tだけよりもかなり小さく、したがって検索はかなり速くなる可能性がある1\*。

アルゴリズムが\$Dの探索をm=1で開始し、T=Øをテストしない理由を説明するために、もう1つのレンマが必要である:

**Lemma 11:** XとYがp隣接、YとZがp隣接、XとZがp隣接でなく、YがXまたは Zの祖先でなく、SがXとZの最小d分離集合であるとき、XとZはS in(Y) があれ ばd連結する。

**証明する:** レンマ2の補題Aは、XとYがp隣接している場合、X-'Y、Y-'X、XmC'-Yのいずれかとなり、CはXまたはYの祖先であることを意味する。したがって、YがXの祖先ではないという仮説の下では、XがYの祖先であることが成り立つ。さらに、XからYへの有向パスPが存在し、その上にはX以外のすべての頂点がYの子孫であり、したがってX以外のすべての頂点がXまたはZの祖先ではないことが導かれる(X-'Yの場合、最後の主張は些細なことであ

る。他の場合は、単に経路XmCm…Yの性質を述べているだけであり、CはXとYの共通の子である)。同様に、Zを除くすべての頂点がXまたはZの祖先でない、ZからYへの経路Qがある。

Sが最小d分離集合である場合、S中のすべての頂点はXまたはZの祖先である(そしてX,Z c S)。したがって、PまたはQ上の頂点はSにはない。PはSが与えられたときにXとYをd-connect U、QはSが与えられたときにYとZをd-connect U S

これで、アルゴリズムのステップ\$Dは、A->B<-Cの各二プルに対して、AとCをd分割し、Bを含む集合が存在すれば、そのような集合を見つけることに成功することの証明が完了しました。

<sup>15</sup>場合によっては、最小の集合(T Sepset<A,C>)のカーディナリティは、最小のTのカーディナリティよりも大きいかもしれないが、一般的にはそうではなく、我々は線形モデルの発見だけを意図しているので、これは重要ではない。(離散モデルでは、条件付き独立性検定で大きな変数の集合を条件付けると、検定の検出力が劇的に低下することがあります)。

## セクション J{E

次のLemmaは、A->B<-C、A->D<-C、Dが**SupSepset<A,B,C>に**ない場合、B\*-oDがB->Dとして指向される\$Eの正当性を示す。

**Lemma 12:** PAG 'P for , X- V -Z, X- W -Zにおいて、XとZがp隣接せず、WがJにおけるVの祖先である場合、Ve S、XとZがSによってd分離されるような任意の集合Sは、Wをも含む。

証明 Vを含みWを含まないXとZのd分割集合Sがあったとする。WはVとVe Sの祖先であるがWe Sであるから、Lemma 3.3.1+ により、Sが与えられたXからWへの d接続パスとSが与えられたWからZへのd接続パスは、(これらのパスがWで衝突するかどうかにかかわらず)一緒になってSが与えられたXからZへの新しいd接続パスを形成できることが分かる。XはWにp隣接し、WはZにp隣接しているので、このようなXとWの間、WとZの間のG-連結経路は(レンマ1の補題Aにより)存在します。

**注:** 実はこのレンマの逆もまた真である: Vを含むすべてのd個の分離集合がWも含むならば、WはVの祖先である<sup>16</sup>。

レンマ12に対する**逆の証明**: WがVの祖先でない場合、XとZをd分割するがWを含まない集合が存在することを証明すれば十分である。

Vを含む集合Rの中に、 $X \times Z \times d$ 分離するものがあることは、レンマ9 $\times PAG$  Pの  $X - V - Z \times V -$ 

したがって、WがVの祖先でない場合、XとZをd分割し、Vを含み、Wを含まな

い集合、すなわちSが存在することになります。

A- B -C, A->Do-C, D が SupSepset<A,B,C> にある場合、アルゴリズムは B\*-oD を B\*-D として方向づけるが、この推論は次のように正当化できる:

DがSupSepset<A,B,C>にあれば、Dが(B)Sepset<A,C>の祖先であることは、Lemma 4と、SupSepset<A,B,C<sup>>17の</sup>検索の性質から、導かれます。Sepset<A,C>はAとCの最小d分割集合であり、さらにSepset<A,C>のすべての頂点はAまたはCの祖先であるから、DがSupSepset<A,B,C>にあれば、DはA、C、Bの祖先であることになるが、AからCへの辺にはDへの矢尻があるので

<sup>16</sup>逆は、この後のどの証明でも必要とされないので、別途記載する。

<sup>17</sup>セクションDが、AとCをd分割する(B)Sepset<A,C>の最小のスーパーセットを探すという事実があること。

したがって、B\*-\*DをB\*-Dとして配向するのが正しい。

PのA-'D'-Cの場合(AとCはp隣接せず、点線A-yD<-Cは存在しない)、レンマ 8以降の議論と帰結から、AとCはDを含む(AもCも含まない)任意の集合Sに よってd接続されるので、DはAとCの共通子の子孫である。さらに、AとCは Bを含む何らかの集合によってd分離されるので、BはAの共通子の子孫でない

0

C.したがって、「P, A-B-C, A->D<-C, BとDがp-adjacentである」場合、B\*-\*DはB<-Dとして配向されるべきである。

注 この最後の推論を行う際に、SepsetもSupSepsetも参照されないので、この ケースは「方向づけルール」ではなく「伝播ルール」と呼ぶのがよいかもし れません。

セクション

AとCはSupSepset<A,B,C>、Be SupSepset<A,B,C>によってd個分離される。したがって、レンマ10により、DがBの祖先である場合、AとCはSupSepset<A,B,C>(D)によりd個分離される。したがって、逆接により、もしAとCがSupSepset<A,B,C> (D)でd-connectedであれば、DはBの祖先ではない。(実際、DはA,BまたはCの祖先ではないことが成り立つ)DはBの祖先ではなく、BとDはp隣接するので、BはDの祖先となる。したがって、B\*-\*Dは「1」におけるB->Dとして指向されるべきである。

これで、CCDアルゴリズムの正しさの証明は完了した。...

§5.2 定理2の証明: d-separation completeteness

CCDアルゴリズムのd分離完全性を証明するために必要なことは,CCDアルゴリズムへの最初の入力が出力+i.をもたらすd分離オラクルで,CCDアルゴリズムへの2番目の入力が出力+2.を もたらす

d分離オラクルで、+1および't tが同一の場合、次のことを示すだけである。

と€2が

d-separationと同等であることを証明する。のd-separationオラクルを使用する場合、そのオラクルは、以下のようになることを証明することによって、これを行う。

をCCDアルゴリズムの入力とし、出力として同じPAGを生成する場合、J、 $\epsilon 2$  は互いに環状等価定理CET(I)-(V)の5条件(以下に示す)を満たす。この5つの条件を満たす場合に限り、2つのグラフtと $\epsilon$ が互いにd-分離等価であることは、Richardson(1994b)で既に示されている。

周期的等価性を述べるためには、いくつかの余分な定義が必要である。 定理

### 定義非シールド導体および非シールド非導体

(環状または非環状)グラフにおいて 、頂点<A,B,C>の三重が*非遮蔽導体を*形成するのは次のような場合であるとする:

- (i) AとBはp-adjacent、BとCはp-adjacentではない
- (ii) BはAまたはCの祖先である

<A,B,C>が(i)を満たすが、BがAまたはCの祖先でない場合、<A,B,C>は、(i)を満たすとする。

非シールドの不導体です。

### 定義非シールド型完全・不完全非導電体

(環状または非環状)グラフ において頂点 <A,B,C> の三重が、以下の場合に*非 遮蔽完全不導体*であるとされる:

- (i) AとBはp-adjacent、BとCはp-adjacentであるが、AとCはp-adjacentではない。
  p-adjacentです。
- (ii) BはAやCの祖先ではありません。
- (iii) Bは、AとCの共通の子の子孫である。

<A,B,C>が(i)と(ii)を満たすが、BがAとCの共通の子の子孫でない場合、<A,B,C>は*非遮蔽不完全不導体*であると言われます。

### 定義旅程表

Xo.Xi....Xn+i>が、.t. Hi 0i

、XiとXi+iがp隣

接する、異なる頂点の列であるとすると、 <Xo,Xi'-,Xn+1> iS Said to be an itinerary. .¹

定義定義: 旅程に関する相互排他的な非シールド導体。 0-'..Xn+i>は以下のような旅程である:

(i) それはIN t  $\tilde{n}$  n、<Xt-i XX x+i >は非シールド導体である。

- (ii) \fk 1ñ k n、Xy-iはXkの祖先であり、Xk+IはXpの祖先であり。
- (iii) はXiの子孫ではなく、XnはXn+の祖先ではない}とすると、<@,X,X2 and Ibn-1Xn'Xn+i>は行程<Xo,...Xn+i> 上の $Mutuall\ y\ exclusive\ (m.e)\ unshielded$  conductors で $f_o$

### 定義アンカバー・イティネラリー

とすると、<X0'- .Xn+i>が Hi,j る。 < j-1<jml となるような旅程であ iとXjがグラフ上でp-adjacentで

ない場合、<Xo..Xp+i>は*覆われない旅程*である。すなわち、旅程は以下の通りである。

旅程上の他の頂点にp個隣接する頂点が、旅程上で連続して出現する頂点だけである場合、覆われない。

<sup>18</sup>このように、旅程はPAGにとって、無向きのパスが有向グラフであるのと同じです。

巡回**等価定理** (Richardson 1994b)

グラフ と は、以下の5つの条件が成立する場合にのみ、d-separation equivalentとなる:

CET(I) と は同じp-adjacenciesを持つ。

CET(II) とは、同じ非シールド要素すなわち(

Ha) 同じ非シールド導体を有し、か

つ

(11b) 同じくシールドされていない完全な非電導体

CET(III) すべての三重項<A,B,C><と<X,Y,Z><について、<A,B,C><と<X,Y,Z><は以下の場合にのみ、ある無蓋行程P=<A,B,C,...X,Y,Z>+ 上のME導体です。

<A,B,C>と<X ,Y,Z >はm.e.

conductorsonsome

unovereditinerary Q -<A,B,C,...X,Y,Z> inです。

CET(IV) <A,X,B>と<A,Y,B>が遮蔽されていない不完全な非導電体である場合(in ; and

€z)、XがJtにおけるYの祖先である場合に限り、XはJt に お け る Yの祖先となる。

CET(V) ある無蓋行程P = <A,B,C,...X,Y,Z> において、<A,B,C> と <X,Y,Z> が相互に排他的な導体で、<A,M,Z> が非シールド不完全不導体(in とJ)であるとき、M がB の子孫であれば、( )でB の子孫がある。

定理13: Okという性質を持つ有向グラフの頂点の列<Xo $_{\cdot}$ Xn+1>が有向グラフに存在し、Ok $_{\cdot}$ O $_{i}$ k  $_{i}$ n $_{\cdot}$ XkはXk+iの祖先であり、XkはXk+tにp隣接するという性質を持つとき、次の性質を持つXiの部分列が存在する:

- (a) Xo=o
- (b) Hj, Yj iSは、Jj+1の祖先である。
- (C) Hj,kj < k のとき Yj と Y は、k=j+1 のときだけ、グラフ上で p 個の隣

接を持つ。 p-adjacentであるkは連続して出現するものだけである。 証明する: は、以下のように構成されます。 ks は次のように構成できる:

Let= $X_0$ 

(a)の性質は、この構成から直ちに得られる。性質(b)は、祖先関係の他動性と、kがXiの部分列であることから導かれる。また、k=j+1であれば、Yjとkはp-adjacentであることは構成から明らかである。さらに、Yj-Xml\*k-Xpareがp-adjacentで、j < kであれば、Yj+1-Xyであれば、 $\S$ ñ yなので、k ñ j+1 という構成から再び導かれます。(kはXiの部分配列なので)したがって、Yj+1=k--。

 $<sup>^{19}</sup>$  つまり、Yの頂点列のj°頂点は、Xの頂点列のo "頂点となる。

Lemma 14:  $\epsilon_i$  と  $\epsilon_2$  を CET(I)-(III) を満たす2つのグラフとする。Jtに有向パス D1 ...Dn.が存在するとする。Dt,...yDn'とは異なる頂点をDoとする。 D0 iSはDi にp-adjacentで、DoはD2にp-adjacentでない。...Dnまたは $\epsilon_2$ 、DoはDtのinまたは  $\epsilon_2$ の子孫でない。

証明する: nに対する

帰納法により、基本ケ

-x: n=2

仮説により、DoはD2にp隣接しないので、<Do.D1.D2>が形成するのはの遮蔽されていない導体(DiはDtの祖先であるため)。したがって、この頂点のトリプルも、CET(Ha)により、€2.において遮蔽されていない導体を形成しています。したがって、Dtは…のドアD2の祖先である。仮説により、DiはDo inの祖先ではないので、DiはJにおいてDtの祖先であることがわかる。

帰納的な場合:長さnのパスに対して仮説が真であるとする。

レンマ13から、p隣接する頂点は連続して現れるものだけであり、 各頂点が次の頂点の祖先となるような 部分列<Dq(0)-Do.Dq(1)-Dq(2).Dq(t)-Dn>が存在することがわかります。さらに、仮説により、DoはD2,-.Dnにp-adjacentではないので、それはfOllOWである。.DnはDq i)-Dtとなる。Hiと $\in$ zはCET(I)を満たすので、同じp-隣接を持ち、したがって $\in$ 2においてp-隣接する頂点は、連続する配列に現れる頂点だけである。の矛盾として、Dq(,.t)が のDp,)の祖先する。ここで、DQ(j)が $\in$ zにおけるDay i)の祖先でないような最小のiをsとする(Dq 1)+DtとDq(0)-Doは存在しないのでこのようなjは存在する)。

a の子孫 の Dt.の子孫ではないので、このようなjは存在する)次に となる。  $< D\{y (s-1)9D@(s)9D(y(+1)> となる。$ 

<Dq(t\_2) Dty(p >)yDct(r)> 遮蔽されていない旅程で相互に排他的な導体を発射する。 <DCt(s-1)-' -Dq(,)> となる。しかし、Dq( i, )は7iにおいてDq(, )の祖先であるため、これら2つのトリプルは相互に排他的ではなく、したがってCET(III)を満

たさず、矛盾となる。

したがって、 $Dq_{.i}$ )は72-におけるDq(,)の祖先である。 次に、帰納仮説から、 $D_{i}$ は $Dq_{i}$ (t) $D_{i}$ 1-の祖先である。

定理2: (d-separationの完全性)

CCDアルゴリズムが、グラフIのd-separation oracleを入力として与えられたとき、出力としてPAGs +I+2を それぞれ 生成する 場合、thenlは、がd-separation equivalent、すなわち **Equiv(J) の**場合に限り+2と同一であり、その逆も同様です。

**証明する:** 2つのグラフtとS2md-separationで等価でない場合、入力として与えられたCCDアルゴリズムによって発見されたPAGは、ある点で異なっていることを示します。

fiと $\epsilon$ zがd分離等価でない場合、5つの条件CET(I) $\sim$ (V)のうち1つ以上を満たさないことは、循環等価定理から導かれます。ここで、+i

を入力としたときにCCDアルゴリズムが出力するPAGを れぞれ示している。 そ

ケース1: CET(I)を満たさない。

この場合、2つのグラフは異なるp-adjacenciesを持つ。一般性を損なわない範囲で、C2においてp-adjacentでp-adjacentでない変数のペアXとYがあるとしよう。 XとYはHiにおいてp-adjacentであり、Yは他の頂点の任意の部分集合を条件としてd-connectedである。したがって、XとYの間には、iにおいてXとYはp隣接しないので、XとYが隣接するような部分集合S、(X,Ye S)が存在する。

XとYは、与えられたSにおいてd個に分離されている。レンマ3から、Xに隣接する頂点pの部分集合であるTか、Yに隣接する頂点pの部分集合であるTという変数集合によってd個に分離されていることがわかる。エッジはアルゴリズムの後の段階で再び追加されることはないので、+2にはXとYの間のエッジは存在しない。したがって、+1および+2が違います。

### ケース2: CET(Ha)を満たせず

Hiと $\epsilon_{\text{Z}}$ がCET(I)を満たすと仮定する。この場合、2つのグラフは異なる非遮蔽非伝導体を持つ。一般性をあまり損なわずに、Si.ではYがXまたはZの祖先であり、 $\epsilon_{\text{Z}}$ ではYがXまたはZの祖先でないような頂点 $\epsilon_{\text{X}}$ , $\epsilon_{\text{Z}}$ の三重が存在するとする。YはXまたはZの祖先であるが、 $\epsilon_{\text{Z}}$ においてYはXまたはZのいずれの祖先でもない。

したがって、ステップBで<X,Y,Z>はX\*-\*Y\*-\*Zとマークされ、アルゴリズムの正しさから、PtではX\*->Y-\*Z、X\*-Y<-\*Z、またはX\*-\*Y\*-\*Zのいずれかであることがわかります。

もしYが€2.のXまたはZの祖先でなければ、YはXとZの最小d分離集合にはな

い。特にYc Sepset(X,Z) for .この場合も、アルゴリズムの正しさから、<X,Y,Z> はX\*->Y<-\*Z、またはX\*-Y<-\*Zとして'P2'に配向していることがわかります。したがって、+iと +2が違います。

ケース3: CET(IIb)を満たさない。

と $\in$ 2がCET(I), CET(Ha)を満たすと仮定する。この場合、2つのグラフは異なる非遮蔽不完全不導体、すなわち、tと $\in$ 2の両方で非遮蔽不導体を形成するような三重項<X,Y,Z>が存在するが、一方のグラフではYはXとZの共通の子の子孫であり、他方のグラフではそうでない。ここで、YはIrではXとZの共通の子の子孫であるが、Irではそうでないと仮定する。

を含む任意の部分集合が与えられると、Çtにおいて、XとZはd-connectedであることは、レンマ8から導かれる。

Y.この場合、CCDセクションDの検索では、Supsepset<X,Y,Z>の集合を見つけることができない。したがって、'Pでは<X,Y,Z>はX\*->Y<-\*Zのように(つまり、点線の下線なしで)方向づけられることになる。Yが $\in$ 2.においてXとZの共通の子の子孫でない場合、Lemma9とLemma10から、T (Y) Sepset<X,Z>が与えられるとXとZがd分離するような、Localt\*z.X)の部分集合Tが存在することがわかります。セクション $\in$ Dでは、そのような集合Tを見つけ、それゆえ<br/>
<X,Y,Z>は't'2においてX\*->Y<-\* Zのように配向されることになる。後続の配向規則が点線の下線を削除したり追加したりしないので、Hiと'Ptは異なることが即座に判明する。

ケース4: CET(III)を満たさない。

Çtと€2がCET(I), CET(Ha), CET(IIb)を満たすと仮定します。この場合、2つのグラフは同じp-adjacenciesを持ち、非シールド導体、完全非導体、不完全非導体を持つ。しかし、2つのグラフは異なる相互排他的導体を持っている。したがって、HiとÇ2の両方において、覆われていない旅程が存在する、

0'..Xn+i>は、この行程表上のすべての三重項<Xk-1.Xk<sub>.</sub>Xiii>(lúkñn)が、 以下のようになる。

の導体であるが、一方のグラフでは<Xo,Xt,Xø><<Xn-1'Xn'Xn+1>は相互に排他的、すなわちXIはXo.の祖先ではなく、XnはXn+1の祖先ではないのに対し他方では相互に排他的でない。一般性を損なわない範囲で、<Xo,t,X2>と仮定してみよう。

は最小であるため、AncestorS(X0'Xn+1)の部分集合となる(ここでは€iについて 計算したSepset(Xo,Xn+I)を参照) 同じ理由でDescendants((XI。  $X_{n)}$  セプセット Ø.のm.e.導体の定義から、以下のようになります。  $(X_{0}X_{n+}I_{-})$ 

Xk は Xiii(1 < n) の祖先であると仮定すると、有向パス \*-k= k が存在する。
.mXt+I Xi ..Xnの子孫はSepset(Xo.Xn+1)には存在しないので、**Sepset(**,Xn+I)を条件に、各有向パス skは各頂点Xk tOその後継Xk+1(1 < n) をd接続する。また、XoとXIはp-adjacentなので、Sepset(Xo.Xn+I)を条件として、XoとXをd-connectするパスQがある。各P;はXiから出ているので(つまり、パス

がXi-'...になる。- $X_i$ )、レンマ3.3.1+を適用して、 $\check{z}$ = (Q. 1-'. p}R < 0' ...Xn> となる。

- Sepset( $Xo_*Xn+1$ )\*のうち、Sepset( $Xg_*Xn+1$ )が与えられたX0とInをd-connect するものが構成されることができる。対称的な議論により、Sepset( $o_*Xn+i$ )が与えられると、X1とXn+iもd-connectedであることが示される。そして、CCD アルゴリズムのステージ\$Cによって、 $Xo_*-*XI$ と $Xn^*$  Xn+iは、 $Xo_*->Xi$ とXn< Xn+1 >iとして配向されることがわかります(ただし、それらが

は、アルゴリズムの前の段階で既にこのように配向されている)。したがって、再びアルゴリズムの正しさによって、これらの矢印はiに存在することになる(アルゴリズムの後続の段階では、「-」と「>」の端点のみが追加され、「o」端点は追加されない。もし矢尻It X1 I Xnのどちらかが'-'に置き換えられていたら、アルゴリズムは不正確である)。

仮説によれば、 $_{0}$ Xi $_{1}$ X2>と $_{n-1}$ Xn-Xn+1>は相互に排他的ではないので、 $_{1}$ Xtは  $_{1}$ X0の祖先、または $_{2}$ Xn İsは $_{2}$ Xml+Iの祖���Itからな���。

CCDアルゴリズムの配向ルールの正しさで、エッジo --\*Xi $_{n**Xn+1W0}$  両方が $_{Nn+1W0}$  両方が $_{Nn+1W0}$  で  $_{Nn$ 

ケース5: CET(IV)またはCET(V)のいずれかを満たさない。

Hiと $\in$ 2がCET(I)~(III)を満たすと仮定する $^{20}$ もし $\in$ 2がCET(IV)とCET(V)のどちらかを満たさない場合、どちらの場合でも次のような状況になる: Hiとunoに venices の列が存在する。 1,...Xn'Xn+1>.\*1が

## 以下を満たす:

- (a) i > j ならば、Xi と Xj は i=j+1 のときだけ、p-adjacent となる、
- (b) XはXoの祖先ではなく、XnはXn+iの祖先ではなく、(c)Hk
- 、1k n、Xy-i、Xk+1はXkの祖先である。

また、Hio Xo と Xn+i に p隣接し、tまたは92 o XoまたはXn+i o 祖先ではなく、tまたはXo と Xxx o 共通の子の子孫ではないいくつかの頂点Vが存在する。ケース3で説明したように、これはPAGo+i と 't't o 両者で意味する、 $X_0 \longrightarrow V < X_{n+1}$ .

とはCET(IV)またはCET(V)を満たさないので、一方のグラフではVはXtの子孫であり、他方のグラフではVはXIの子孫ではない。 一般性を損なわずに、VがXinの子孫であり、VがXi inの子孫ではないと仮定しよう。前の場合と同様に、iと'P2がそれぞれ $\epsilon$ 2と $\epsilon$ 2に対応するCCD PAGであれば、  $\epsilon$ 4と $\epsilon$ 2が異なることを示せばよいことになる。また、VがJの任意の $\epsilon$ 3のXk (IN k n)に最も近い頂点であると仮定すると、最短有向パスP-Xk - 'V inは、任意の $\epsilon$ 4の最短有向パスと同じ数の頂点を多く含むという意味で、一般性を損なわない範囲で、次のように考えることができる。

Vの条件を満たす他の頂点V'がある。

主張する: Vにp隣接するP上の最初の頂点をWとする (CET(I);と€2が同じp

隣接性を持つことから、両方において)。VがXpに最も近い頂点であるという仮定(7i)と、次のような仮定を合わせて示す。

を満たし、CET(I)-(III)を満たすことは、Wが $\in$ 2における $X^1$ の子孫であることを意味する以下、これを証明する。

tの有向サブパス $P(Xk_-)+Xk_-$ ...Wのすべての頂点は、UのXの子孫でもあることを示す。

主張の証明: パスP(Xk.)ベース 上に存在す

る頂点への帰納により: Xp. 仮説により

、XpはXiの子孫である とJの両方において。

20CET(IV)やCET(V)が失敗する条件は、CET(I)~(III)を満たすという仮定が、グラフが多くの点で一致することを意味するため、非常に複雑なものとなっているのです。 CET(IV)が失敗した場合はn=1、CET(V)が失敗した場合はn>1となります。

サブケース1: X9とXn+iの両方がp-adjacent tO r-でない。

Xoはr-にp隣接していないと仮定する。

この頂点列Q=<Xo-. r>のように、Oの連続する頂点が

p-adjacentであるが、これらの頂点だけがp-adjacentである。さらに、XはYにp-隣接していないので、この頂点列の長さは2より大きい。つまり、Q-<Xo.D..

r> ここでDはo以降の 部分列の最初の頂点である 。いずれの場合も、Dは両者 および $\in$ 2.において XIの 子孫であるが(帰納的仮説またはケース5の仮説による)、XoはorにおいてXiの子孫ではないので、

Dは または においてXoの先祖ではないことが

わかる。したがって、レンマ14を適用して、 rがDの子孫であることを 推論することができる。

XIはDの祖先である。

サブケース2: XoとXn+iの両方がp-adjacent tO r.

rはVの祖先であり、VはSIにおけるXoとXeoiの共通の子の子孫ではない。したがって、rはtにおけるXoとXp+の共通の子の子孫ではない。

を満たすので、€2はCET(I)、(Ha)、(IIb)を満たす\*<sup>2</sup>。

S2 の X, ならば +r は V の条件を満たすが、V よりも Xp に近い(r は J の最短有向パス fOlTl Xk to V で V の前に出現する)。これは矛盾であり、したがってr

は.S2のXkの子孫である。

これで主張の証明は完了です。ここで、+iと'P2が異なることを示す。

iHiのエッジW\*-\*Vを考えてみよう。WはVの祖先であり、したがって+iのアルゴリズムの正しさから、このエッジはWe-\*VまたはW-\*Vとして配向される。

<sup>2</sup>Ift と  $J_2$  CET(I), CET(Ha), CET(IIb) を満たすなら、それらは同じ p-adjacencies, 同じ 非シールド導体および同じ非シールド完全非導体である。したがって、導体でも完全非導体で もない他のすべての非シールド三重奏は不完全非導体である。したがって、 $)_1$  と  $)_1$  には は、不純物の多い不導体である。

しかし、 $\epsilon_{2.}$ では、iはVの祖先ではなく、先ほど示したように $X_i$ はWの祖先であるので、WはVの祖先ではないことになります:

## **サブケース1:** n=1、かつW-XI

この場合、Xo->Xi-X2である。Supsepset(Xo,V,z)は、Sepset(o.X)m $\{V\}$ を含み、 $Xo \times X2$ をd分離する最小の集合であり、**Supsepset**(0.V,X2) の部分集合でSepset(Xo.X2)  $\{V\}$ は $o \times X2$ をd-separateする。Supsepset(Xo,V,X3)のすべての頂点がX0の祖先であることは、Lemma 4 (with R=Sepset(Xo.X2)  $\{V\}$ ) から導かれる。2またはSepset(Xo.Xy) ( $V\}$  となる。Sepset(Xo.X3)のすべての頂点はXoまたはX2の祖先なので、Supsepset(Xo.V,X2)のすべての頂点はX0の祖先であることがわかる。Xiは $Xo \times X3$ 、あるいは2におけるVの祖先ではない。したがって、C2のd分離オラクルを入力として与えられたアルゴリズムのステップSDでは、XiSupsepset(Xo.V,X2).このように、CCDアルゴリズムのステップSEでは、SUD で既にこのように配向されていた場合は除く)。

のアルゴリズム)。したがって、'Ptと+2 は等価ではない。

## ケース2: n>l、またはWhXi

主張:  $X_0$ と n+iは、 $Supsepset(X_0,V,X_0+i)'-iW$ )でd-connectedとなる。 . **証明する:** でWが $X_t$ の子孫であり、 $X_0$ の子孫であることは既に示しました。 であり

.tとXoはXiにp隣接するが、XiはXoの祖先ではないので、XoはXiの祖先である。したがって、tとS2の両方において、XoからXiまで、Xo以外のすべての頂点がXiの子孫である有向パス\*-oがある(Xo X1の場合、最後の主張は些末である。X0とXtがXoまたはXiの祖先である共通の子を持ち、iがX0の祖先でない場合、これは単にXo Cm・・・Xtという経路の性質を述べているだけで、CはXoとXiの共通の子である)X0とX0の子孫であるから、X1からX1かの有向経路X2の子孫である。X3のとX3の方かる。X4のとX3の方ができ、X4の以外のすべての頂点はX5の子孫である。X5の以外の祖先ではないので、X5の以外ので、X6の以外の

頂点はXo'Xn+iやVの祖先でないということになる。同様に、Xn+1.以外のどの頂点も $Xo_iXn+1$ またはVの祖先とならない経路frOITLQ' froITLXn+1tO Wを構築することができる。

Supsepset(Xo,V,Xn+1)のすべての頂点はXo Xn+iまたはSepset(Xo'Xn+1)<\$V}の祖先であるので、前と同様にSupsepset(,V,Xn+1)iS のすべての頂点はoの祖先であると言うことができます。したがって、Supsepset(Xo,V,Xq+i)の頂点はP "やQ'に存在しない(定義によりXo, Xn+i \* Supsepset(Xo,V,Xq+i))。ここで、Lemma 3.3.1+により、P'とQ°を連結して、XoとXn+1をd-connectするパスを形成することができることがわかります。

サプセプセット(Xo,+,Xn+1)( -)

この主張から、CCDアルゴリズムのステップ\$Fは、V\*-oWを+2のV->Wのように方向付ける(アルゴリズムの前の段階で既にこのように方向付けされている場合を除く)ことが直接導かれる。したがって、+iと'Ptは異なるものである。

ケース1-5は、tとtがCET(I)-(V)を満たさない可能性を排除しているので、これでCCDアルゴリズムがd-分離同値クラスを見つけることの証明が完了したことになる。

## 参考文献

- AHO, A.V., HOPCROFT, J.E., & ULLMAN, J.D., (1974) The Design and Analysis of Computer Algorithms. アディソン・ウェスリー, リーディング・マス.
- BOLLEN, K. (1989) Structural Equations with Latent Variables, Wiley, New York.
- DAWID, A. P. (1979) 統計理論における条件付き独立性(考察付き) Journal Ro yal Statistical Society Ser. B 41, 1-31.
- FRYDENBERG, M. (1990) チェーングラフのマルコフ特性. Scandinavian Journal of Statistics 17, 333-353.
- Geiger, D. (1990).グラフォイド: 確率的推論のための質的フレームワーク。博士 論文、Univ. California, Los Angeles.
- ゴールドバーガー、A. S. (1964).エコノメトリック・セオリーWiley, New York.
- haavelmo,t.(1943).連立方程式の統計的意味合い.

エコノメトリカ、11、1-12。

KIIVERI, H. and SPEED, T.P. (1982). 多変量データの構造解析: A review.In Sociological Methodolog y, 1982 (S. Leinhardt, ed.) 209-289. Jossey Bass, San Francisco.

KOSTER, J.T.A.(1994) 非再帰的因果モデルのマルコフ特性.MS.

lauritzen, s., d awid, a., larsen, b., leimer, h. (1990)."独立性"の特性の有向マルコフ場。"ネットワークス, 20, 491-505.

LEE, S. (1957) 共分散構造モデリングにおけるモデルの等価性。オハイオ州立大学心理学部博士号論文。

メイソン、S. (1956)。フィードバック理論:シグナルフロー・グラフのさらなる特性.

**電波工学研究所紀要44** 920-926.

- MUTHÉN, B. (1984) 二項対立型、順序型、連続型潜在変数指標を用いた一般 的構造方程式モデル. *Psychometrika* 49: 115- 132
- PEARL, J. (1985) Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems.Morgan Kaufman, San Mateo, CA.
- RICHARDSON, T. (1994a).非再帰的構造方程式モデルにおける等価性. Proceedings:CompSiai 94, Physica Verlag
- RICHARDSON, T. (1994b).環状グラフモデルの特性.MS論文、カーネギーメロン 大学
- SOBEL, M. E. (1993) Comment in Statistical Science Vol.8 3 p.271
- SPIRTES, P., (1993) Directed Cyclic graphs, Conditional Independence and Non-Recursive Linear Structural Equation Models. 哲学・方法論・論理学 Technical Report 35, カーネギーメロン大学
- SPIRTES, P., (1994) フィードバックや混合物を表現する有向環状グラフモデルにおける条件付き独立性.哲学・方法論・論理学 Technical Report 59, カーネギーメロン大学
- SPIRTES, P., GLYMOUR C. and SCHEINES R. (1993), Causation, Prediction and Search. Lecture Notes in Statistics, Springer-Verlag.
- Verma, T. & pearl, J., (1990).因果関係モデルの等価性について.Technical Report R-150, Cognitive Systems Lab., UCLA.
- WERMUTH, N. (1992) On Block-Recursive Linear Regression Equations, ficviiia Brasileira de Probabilidade e Estatistica 6, pp.1-56 (with discussion)
- WHITTAKER, J. (1990).応用多変量統計学におけるグラフィカル・モデル, Wiley, NY.