

サイクル、潜在変数、選択バイアスを含む因果関係発見のための制約に基づくアルゴリズム

エリック・V・ストロブル

ペンシルバニア州ピッツバーグ

アブストラクト

自然界の因果過程はサイクルを含むことがあり、実際のデータセットは因果的充足性に反するだけでなく、選択バイアスを含むことがある。制約に基づく因果関係発見アルゴリズムで、サイクル、潜在変数、選択バイアス（CLS）を同時に扱えるものは今のところない。そこで、循環的因果過程を独立誤差を持つ非再帰的線形構造方程式モデルとして表現できることを条件に、CLSの下で条件付きインデペンデンスオラクルを用いて健全な推論を行う Cyclic Causal Inference (CCI) と呼ぶアルゴリズムを紹介する。CCIは、非周期的な因果過程の場合、FCIやRFCIのライバルであるCCDを凌駕することが実証されている。

1. 問題点

科学者はしばしば、ランダム化された実験から収集されたデータを用いて因果関係を推論する。しかし、ランダム化実験は、時間がかかり、一般化できず、非倫理的で、高価な場合がある。例えば、現代医学の一般的なシナリオである、人間の病気の原因を解明しようとすることを考えてみよう。ヒトに有害な結果をもたらす可能性のある介入を行うことは倫理的に許されないので、科学者は、動物で発見された因果関係が

ヒトに一般化されない可能性があることを十分承知で、代わりに動物で実験を行うことが多い。また、病気の原因には多くの可能性があるため、科学者はその原因を探るために何度も動物実験を行うのが一般的である。そのため、長い試行錯誤が続き、多大な経済的負担を強いられる。私たちは、このような科学的プロセスを短縮するために、より簡単に入手できるヒトの観察データから直接因果関係を発見することを理想とする。

因果関係の発見をより早く行う必要性から、観測データから因果関係を推論するアルゴリズムの開発が盛んに行われている。PC アルゴリズムは

を使った因果関係を推論する最も初期のアルゴリズムの1つである。非周期的な因果プロセスから収集されたi.i.d.データ(Spirtes et al., 2000)。PCは実際には、制約に基づく(CB)アルゴリズムと呼ばれる因果関係発見アルゴリズムの広いクラスに属し、条件付き独立性(CI)オラクル(有限サンプルの場合はCIテスト)を利用して、基礎となる因果グラフを再構築する。FCIアルゴリズムは、PCを拡張して潜在変数と選択バイアスを扱うCBアルゴリズムの別の例である(Spirtesら, 2000, Zhang, 2008)。さらに、CCDと呼ばれる別のCBアルゴリズムは、FCIのように潜在変数(とおそらく選択バイアス)を扱うことはできないが、CCDは、すべての因果関係が線形であれば、循環的な因果構造を推論できる(Richardson, 1996, Richardson and Spirtes, 1999)。他にも多くのCBアルゴリズムが存在し、これらの方法のほとんどは、その出力がCIオラクルで証明的に正しいという意味での健全性の保証が付属している。

前述のCBアルゴリズムや他の多くの非CBアルゴリズムは、それぞれの仮定下で因果関係を推論することに成功している。しかし、実際に遭遇する因果過程やデータセットは、アルゴリズムの仮定を満たさない場合がある。特に、多くの因果過程はフィードバックループを含むことが知られており(Sachs et al., 2005)、データセットには潜伏変数やある程度の選択バイアス(Spirtes et al., 1995)が含まれることがある。サイクル、潜在変数、選択バイアス(CLS)を同時に扱えるアルゴリズムはほとんどないため、科学者はしばしば、出力が不要なバイアスをもたらす可能性があると知りながら、不本

意ながら他の方法を適用しなければならない (Sachsら、2005、Mooij and Heskes、2013)。したがって、CLSのもとでの因果関係発見の問題を解決することは、実データで実行される因果関係発見アルゴリズムの出力を正当化するために必要な根拠を提供することになる。

CLS下での因果関係発見の問題に対して、CBによらない解決策を考案した研究者が数名いる。Hytinenら (2013) は、CI制約をSATソルバーに入力し、制約と一致するグラフを出力する最初のアプローチを紹介した。しかし、SATソルバーがCBアルゴリズムのように効率的なテストスケジュールを構築しないため、この方法は遅くなる可能性がある。Strobl (2017)は、周期的因果過程が非周期的なものの集合に分解できることを条件に、ガウスのケースで異なる解決策を提供しました。この方法は、条件付き独立性検定と混合モデリングの両方を用いているが、混合モデリングは、線形ケースでもノンパラメトリック設定へのストレートな拡張を阻害している。このように、CLSの下での因果関係発見の問題に対する既存の解決策は、効率性と一般性のいずれにおいても不十分である。

本論文の目的は、CLSの下で健全なCBアルゴリズムを初めて紹介することである。この方法は、小さなテストスケジュールを構築するため効率的であり、アルゴリズムが健全なCIテストを必要とするだけなので、ノンパラメトリック設定に一般化可能である。我々は、新しいCBアルゴリズムを以下のように紹介する。まず、第2節から第4節において、サイクルを伴わない因果関係発見に関する背景資料を提供する。次に、セクション5でサイクルを用いた因果関係の発見をレビューする。セクション6では、潜在変数と選択バイアスを持つ周期的なグラフを要約するための最大ほぼ祖先グラフ（MAAG）という新しい概念を紹介する。次に、セクション7では提案アルゴリズムの概要を、セクション8ではアルゴリズムのトレースを概説する。続いて、セクション9では、提案するCBアルゴリズムの詳細を列挙する。実験結果はセクション10に記載されている。最後に、本論文の結論をセクション11.ほとんどの証明は、付録にあります。

2. グラフ用語

A などのイタリック体の大文字は単一の変数を表し、 **A** などの太字およびイタリック体の大文字は変数の集合を表すとする（特に断りのない限り）。また、「変数」と「頂点」という用語も同じように使う。

グラフ $G = (\mathbf{X}, E)$ は、頂点の集合 $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_p\}$ と、各頂点間の辺の集合 E からなる。辺集合 E は次の6種類の辺を含むことができる： \rightarrow （有向）、 \leftrightarrow （双指向）、 $-$ （無向）、 $\circ\rightarrow$ （部分有向）、 $\circ-$ （部

分無向)、 $\circ-\circ$ (無指向)。これらの6つの辺は、*尾*、*矢印の頭*、*円*を含む3種類の終端を利用していることに注目されたい。

有向辺のみを含むグラフを*有向グラフ*と呼ぶ。本稿では、自己ループのない有向グラフのみを考えることにする。一方、有向、双向、無向の辺を含むグラフを*混合グラフ*という。 X_i と X_j が、エッジの種類に依存しないエッジによって接続されている場合、グラフ内で*隣接*していると言う。 X_i と X_j の間の(無向)パス Π は、どの頂点も2回以上訪れないように変数を接続する連続した辺の集合(これも種類によらない)である。 X_i から X_j への*有向パス*は、 X_i から X_j へ、矢印の方向に連続する有向辺の集合である。 X_i から X_j へのパスが存在し、 X_j と X_i が隣接しているとき、*サイクル*が発生する。より具体的には、 X_i から X_j への有向パスは、有向辺 $X_j \rightarrow X_i$ で*有向サイクル*を形成し、*ほぼ*

有向グラフを、 $X_j \leftrightarrow X_i$ の二方向エッジを持つ有向サイクルと呼ぶ。
有向無サイクルグラフ (DAG) 、有向サイクルが含まれない場合。

X_i と X_j が隣接し、 X_j と X_k が隣接し、 X_i と X_k が隣接しないとき、3つの頂点 $\{X_i, X_j, X_k\}$ は非遮蔽三角錐を形成する。一方、 X_i と X_k も隣接している場合、この3頂点は三角形を形成する。^{jj}同様に、コライダーでない Π 上の非端点頂点 X_j を非コライダーと呼ぶことにする。最後に、以下を含む非遮蔽トリプル

$\{X_i, X_j, X_k\}$ は、 X_j がサブパス $\square X_i, X_j, X_k \square$ 上のコライダーである場合、より具体的に V 構造と呼ばれます。

X_i から X_j または $X_i = X_j$ への有向パスが存在する場合に限り、 X_i は X_j の祖先 (および X_j は X_i の子孫) であると言う。 X_i が X_j の祖先であることを意味するために $X_i \in \text{Anc}(X_j)$ と書き、 X_j が X_i の子孫であることを意味するために $X_j \in \text{Des}(X_i)$ と書く。また、祖先と子孫の定義を頂点 $\mathbf{Y} \subseteq \mathbf{X}$ の集合に適用すると、以下のようになる：

$$\begin{aligned}\text{Anc}(\mathbf{Y}) &= \{X_i \mid X_i \in \text{Anc}(X_j) \text{ for some } X_j \in \mathbf{Y}\}, \\ \text{Des}(\mathbf{Y}) &= \{X_i \mid X_i \in \text{Des}(X_j) \text{ for some } X_j \in \mathbf{Y}\}.\end{aligned}$$

3. DAGの因果的解釈と確率的解釈

ここでは、DAGを因果的に解釈する (Spirtes et al., 2000, Pearl, 2009) 。そのために、マルコフ特性を満足する \mathbf{X} 上の分布 P を持つ確率的因果過程を考える。分布がMarkov特性を満たすのは、以下のよう
に「DAGに従って因数分解する」^p密度を認める場合である：

$$f(\mathbf{X}) = \prod_{i \in \mathbf{Y}}^p f(X_i \mid \text{Pa}(X_i)) \text{ とする。} \quad (1)$$

$$i=1$$

我々は、上記の式を、 d -接続と呼ばれるグラフ基準に関連付けることができる。具体的には、 G を有向グラフとし、 A 、 B 、 C を X における頂点の不連続集合とすると、有向グラフ G において A 、 B が C によって d -接続されるのは、 C を与えられた A のある頂点と B のある頂点の間にアクティブパスまたは d -接続パス Π が存在する場合のみである。 C を与えられた A と B の間のアクティブなパスとは、 Π 上の任意のコライダー X_i に対して、 X_i の子孫が C 内にあり、 Π 上の非コライダーが C 内にならないような、 A のある頂点と B のある頂点の間の無向きのパス Π を指す。ここで、 A および B は、以下の場合、 G において C によって d 分割される。

略記として、 A と B がそれぞれ C を与えられたときにd-separatedまたはd-connectedであるとき、 $A \perp_d B | C$ と $A \perp \perp_d B | C$ と書くことにする。条件セット C は、 $A \perp_d B | C$ が、 C の任意の適切な部分集合を与えられたときに A と B がd-connectedである場合にのみ、最小分離セットと呼ばれます。

$A \perp_d B | C$ とすると、 A および B は C が与えられたときに条件付きで独立し、 $A \perp B | C$ と表記され、次式に従って任意の結合密度因数分解を行う。

(1) (Lauritzen et al., 1990); この性質をグローバル有向マルコフ特性と呼ぶことにする。また、大域的有向マルコフ特性の逆を d -分離忠実性と呼ぶ。すなわち、 $A \perp B | C$ であれば、 C が与えられたときに A と B は d -分離される。での因数分解は、実際には、以下のように示すことができる。

(1)と大域的有向マルコフ特性は、 X 上の分布が密度を認める限り、等価である (Lauritzen et al., 1990)。このレポートでは密度を認める分布のみを考えるので、以後「分布」と「密度」という言葉を使い分けることにする。

4. DAGの祖先のようなグラフ

有向グラフ G と任意の辺を持つ混合グラフ G' 、次のように関連付けることができる。頂点 X を持つ任意の有向グラフ G に対して、以下のように考える。

ここで、 O 、 L 、 S はそれぞれ観測変数、潜在変数、選択変数の非重複セットである。次に、 O 上の混合グラフ G' を考える。ここで

、矢印と尾は以下の通りである。
 を解釈する。もし、矢印の $O_i \ast \rightarrow O_j$ 、ここでアスタリスクは
 j 一方、尾部 $O_i \square - O_j$ がある場合、 O_j は G の $O_i \cup \mathbf{S}$ の祖先であると言う
 。 $\text{Anc}(X_i)$ とする。

は G における X_i の祖先を表す。明らかに、有向グラフから構築された
 G^r は、 G^r の $O_i \rightarrow O_j$ と G の $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ の有向サイクルを持つこ
 とはできない。同様に、 G^r は、 $O_i \leftrightarrow O_j$ が G^r にあり、 $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup$
 $\mathbf{S})$ が G にある、ほぼ有向サイクルを持つことはできない。

また、 G が非周期的である場合、構成される任意の混合グラフが、以
 下のように示される。

G から $O_i - O_j$ の無向きの辺を持ち、 O_i または O_j に入射する矢尻を持
 つことはできない (Richardson and Spirtes, 2000)。そこで、祖先グラ
 フと呼ばれる混合グラフのサブクラスを検討することが有用である
 :

定義1. (祖先グラフ) 混合グラフ G^r は、 G^r が以下の3つの性質を満たす場
 合にのみ、より具体的に祖先グラフと呼ばれます:

1. ディレクションされたサイクルはありません。
2. ほぼ指向性のあるサイクルはありません。
3. 任意の無向辺 $O_i - O_j$ に対して、 O_i と O_j は、入ってくる矢印の頭がない。

DAGの混合グラフはすべて祖先のグラフであることを観察する。

最大祖先グラフ(MAG)とは、すべての欠落エッジが条件付き独立関係に対応する祖先グラフのことである。DAG G をMAG G' に変換するには、次のようにすることができる。まず、任意の頂点のペアに対して

$\{O_i, O_j\}$ は、 G' において、誘導経路が存在する場合に限り、隣接させる。 G の O_i と O_j の間の誘導経路を次のように定義する：

定義2. (誘導パス) G における O_i と O_j の間のパス Π は、 Π 上のすべての衝突者が $\{O_i, O_j\} \sqcap S$ の祖先であり、 Π 上のすべての非衝突者（終点を除く）が L にある場合にのみ誘導パスと呼ばれます。

2つの観測点 O_i, O_j は、 S と同様に $W \subseteq O \setminus \{O_i, O_j\}$ が d-connectedである場合にのみ、誘導経路で接続されることに注意してください（Spartes et al, 2000）。次に、 G' の各隣接関係 $O_i * - * O_j$ について、次のようになります。
をエッジ解釈しています：

1. $O_i * \rightarrow O_j$ とすると、 G において $O_j \notin \text{Anc}(O_i \cup S)$ となる。
2. $O_i * - O_j$ とすると、 G において $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup S)$ となる。

したがって、DAGのMAGは、潜在変数や選択変数を含まないが、DAGの観測変数と選択変数の間の祖先の関係についての情報を含む

、一種の限界グラフである。また、MAGは、DAGと同じd-separation 関係を持ち、特に、選択変数に条件付けられた観測可能な変数の間にある (Spirtes and Richardson, 1996) 。

5. 平衡化された因果過程としての有向環状グラフ

ここでは、有向グラフのサイクルを許容する。有向環状グラフの因果関係表現については、文献上、複数の異なるものが存在する。例としては、動的ベイズネットワーク (Dagum et al., 1995)、フィードバックを伴う構造方程式モデル (Spirtes, 1995)、チェーングラフ (Lauritzen and Richardson, 2002)、DAGの混合物 (Strobl, 2017) ）。については (Strobl, 2017) を参照されたい。

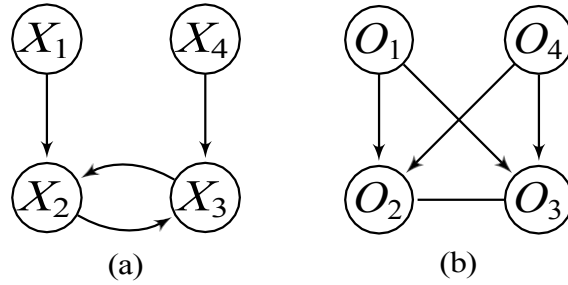


図1】 (a) 式 (2) のSEM-IEに関連するグラフG。 (b) 関連するMAAG。

をそれぞれ長所と短所とする。このレポートでは、フィードバック付きの構造方程式モデルのみを検討する。

DAG Gに関連する密度 $f(\mathbf{X})$ は、大域的マルコフ特性に従うことを思い出してください。しかし、Gがサイクルを含んでいる場合、密度はグローバル・マルコフ特性に従わないかもしれない。そこで、Pの密度がこの性質に従うように、Pにある仮定を課す必要がある。

Spirtes (1995) は、P について以下のような仮定を提案した。 $\mathbf{X}_i = g_i(\text{Pa}(\mathbf{X}_i), \varepsilon_i)$ として \mathbf{X} を記述できる場合に限り、Gに関して分布Pが独立誤差を持つ構造方程式モデル (SEM-IE) に従うと言う (\mathbf{X}_i が $\sigma(\mathbf{X}_i), \varepsilon_i$) 計測可能で、 $\varepsilon_i \perp \varepsilon$ のような $\mathbf{X}_i \perp \mathbf{X}$) (Evans, 2016). ここで、共同独立誤差 ε の集合を持ち、 $\sigma(Y)$ は確率変数Yによって生成されるシグマ代数に言及する。SEM-IEの例を、図1aに描かれた関連する有向グラフとともに以下に示す：

$$\begin{aligned}
 X_1 &= \varepsilon_1, \\
 X_2 &= B_{211} X_{211} + B_{233} X_{233} + \varepsilon_2, \\
 X_3 &= B_{344} X_{344} + B_{322} X_{322} + \varepsilon_3, \\
 X_4 &= \varepsilon_4,
 \end{aligned} \tag{2}$$

ここで、 ϵ は共同独立の標準ガウス誤差項の集合を表し、 B は 4×4 の係数行列である。の構造方程式は
(2) は線形構造方程式である。

SEM-IEからのデータは、固定点法 (Fisher, 1970) を用いてシミュレーションすることができます。固定点法では、サンプルごとに2つのステップがあります。まず、誤差項を独立分布に従ってサンプリングし、 X をある値に初期化する。次に、構造方程式のiter-を適用します。

を、確率変数の値が構造方程式を満たす値に収束するまで、つまり、値が固定点にほぼ確実に収束するまで、積極的に行う。¹なお、構造方程式と誤差分布のすべての集合に対して、確率変数の値が常に固定点に収束するとは限らないが、ここでは、この性質を満たす構造方程式と誤差分布のみを考える。定点で到達した分布を *平衡分布* と呼ぶことにする。

Spirtes (1995) は、*線形SEM-IE*、あるいは線形構造方程式を用いた SEM-IE について、以下のように証明した：

定理1. *線形SEM-IEの平衡分布Pは、SEM-IEの有向グラフG（非周期または環状）に関して、大域有向マルコフ特性を満足する。*

この定理をもとに、Richardsonはフィードバックを伴う因果関係発見のための Cyclic Causal Discovery (CCD) アルゴリズム (Richardson, 1996, Richardson and Spirtes, 1999) を構成し始めた。

6. 有向グラフのほぼ祖先のようなグラフ

先祖代々のグラフは、定義1で挙げた3つの性質を満たすことを思い出してほしい。ここで、祖先グラフの最初の2つの条件のみを満たす *ほぼ祖先グラフ* (AAG) を定義する。次の結果は自明であろう：

命題1. *有向グラフGから構成される任意の混合グラフ G^r (\mathbf{O} 上の（環状または非環状の）AAGである。*

証明する。 G^r_j には有向サイクルもほぼ有向サイクルも存在しない。
は、Gにおいて $O_i \sqsubset \mathbf{S}$ の祖先であり、 $O_i \sqsubset \mathbf{S}$ の祖先ではない。 □

ここで、 O_i と O_j の間に誘導経路が存在する場合に限り、任意の2つの頂点 O_i と O_j の間に辺が存在するとき、ほぼ祖先グラフは最大であるという。なお、最大ほぼ祖先グラフ (MAAG) G^*

¹構造方程式をまず行列形式で表現することで、一次方程式の場合、より効率的に固定点法を行うことができます： $\mathbf{X} = \mathbf{B}\mathbf{X} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 。そして、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ の値を引いた後、次の連立方程式を解くことで \mathbf{X} の値を得ることができる： $\mathbf{X} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}$ 、ここで \mathbf{I} は恒等行列を表す。

は、有向グラフ G の \mathbf{S} を与えられた \mathbf{O} の変数間のd分離関係を必ずしも保存しないが、 G が非周期的である場合には、 G はそうする^r (Spirtes and Richardson, 1996)。MAAGの一例を示す。

を図1bに示しますが、 $\mathbf{L}=\varnothing$ 、 $\mathbf{S}=\varnothing$ のため、 $\mathbf{X}=\mathbf{O}$ となります。

7. 提案アルゴリズムの概要

ここで、CLSの下で因果関係を発見するためのCyclic Causal Inference (CCI)と呼ばれる新しいCBアルゴリズムを紹介する。まず、アルゴリズムの鳥瞰図を提供する（詳細についてはセクション9を参照）。読者はPC、FCI、RFCI、CCDといった過去のCBアルゴリズムに精通していると仮定する。それぞれの簡単なレビューについては、付録のセクション12を参照のこと。

我々はCCIをアルゴリズム1にまとめた。このアルゴリズムは、まずステップ1でFCIのスケルトン発見手順（アルゴリズム5参照）を実行し、任意の2つの観測値 O_i と O_j の間の各隣接関係が、環状の場合でも誘導パスに対応するグラフをディスカバーする（この文の証明はセクション13のLemma 4参照）。次に、アルゴリズムは、FCIの v -構造発見手順（アルゴリズム4）を用いて、ステップ2で v -構造を方向付ける。

CCIのステップ3では、さらに長距離のd-separation関係をチェックする。PCアルゴリズムは、 v -structureを介した短距離のd-separation関係しかチェックしないことを再認識した。しかし、2つの環状有向グラフは、d-separation関係では局所的に一致しても、潜在変数や選択バイアスを含んでいなくても、d-separation関係では不一致になる場

合がある (Richardson, 1994) 。その結果、ステップ3では、アルゴリズムが追加の d-separation 関係をチェックすることで、追加のエッジを方向付けることができる。

CCIのステップ4では、ステップ1で発見されなかった非最小d分離集合を発見する。 $O_i \rightarrow O_j \leftarrow O_k$ で、 O_i と O_k が隣接していない場合、 O_i と O_k を d 分割するすべての集合は O_j を含まない。しかし、環状の場合、 O_i と O_k は O_j を含む集合があれば d 分割することができる。そのため、アルゴリズム1のステップ4では、アルゴリズム2を用いて、これらの非最小d分離集合を追加で発見する。ステップ5と6は、ステップ1と4で発見された d-separating set を利用して、追加のエッジを配向させる。最後に、ステップ7では、セクション9で説明した7つの配向規則を適用する。こうしてCCIは最終的に、部分的に配向された MAAG、またはテール、矢じり、丸で示された不特定の終点を持つ MAAG を出力する。

データです: CIオラクル
結果です: \mathbb{G}

- 1 FCIのスケルトン発見手順 (アルゴリズム5) を実行する。
- 2 FCIのV字構造オリエンテーション手順 (アルゴリズム4) を実行する。
- 3 $O_k \circ \ast O_i$ を満たすような頂点 $\square Ps_27E8, O_k, O_j \in \mathbb{G}$ のトリプルについて、ステップ1で発見した $\text{Sep}(O_i, O_j)$ に以下のような集合がある場合、その頂点は O となります。
 $O_k \in \text{Sep}(O_i, O_j), O_i \perp_d O_k \mid \text{Sep}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ とする。
 $O_j \perp \perp_d O_k \mid \text{Sep}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ とすると、 $O_k \circ \ast O_i$ を $O_k \leftarrow \square O_i$ として orient します。
- 4 アルゴリズム2を用いて、追加の非最小d分離集合を求める。
- 5 O_i と O_k が非隣接、 $O_i \ast \rightarrow O_l \leftarrow \square O_k, O_i \perp_d O_k \mid \mathbf{W} \cup \mathbf{S}$ で $O_j \in \mathbf{W}$ と $\mathbf{W} \subseteq \mathbf{O} \setminus \{O_i, O_k\}$ の頂点 $\square O_j, O_k, O_l$ の四重線を全て求める。ステップ1で発見したように $O_l \in \mathbf{W} = \text{Sep}(O_i, O_k)$ であれば、 $O_j \ast \rightarrow O_l$ として $O_j \square \circ O_l$ を志向する。また、以下のようにすれば
 $O_i \ast \rightarrow O_j \leftarrow \square O_k$ と $O_l \in \mathbf{W} = \text{SupSep}(O_i, O_j, O)$ を Step 4 で発見したように、 $O_j \square \circ O_l$ を $O_j \square \rightarrow O_l$ として方向づける。

6 $O_i \perp_d O_k | W \cup S$ が、ある $W \subseteq O \setminus \{O_i, O_k\}$ で $O_j \in W$ であるとする
ば。

が、 $O_i \perp \perp_d O_k | O_l \cup W \cup S$ となり、 $O_l \circ - * O_j$ を $O_l \leftarrow \square O_j$ として
方向付ける。

7 オリエンテーションルール1～7を実行する。

アルゴリズム1: 巡回型因果推論 (CCI: Cyclic Causal
Inference)

さて、アルゴリズム1は、以下の定理により健全である：

定理2. 有向環状グラフを持つDAGまたは線形SEM-IEを考える。

G は、 d -separation faithfulnessが成立する場合、CCIは G の部分配向MAAGを出力する。

8. アルゴリズム・トレース

ここで、CIオラクルを用いたCCIアルゴリズムのサンプル実行を説明する。図2bのMAAGを持つ潜在変数 L_1 を1つだけ含む図2aの有向グラフを考える。CCIは以下のように進行する：

ステップ1：図2cに示すスケルトンを発見する。

ステップ2： O_2 に2つの矢印を追加し、 $O_1 \perp_d O_5$ のため、図2dが得ら

れる。ステップ3： どの端点も方向付けない。

ステップ4： 追加d分離集合 $O_1 \perp_d O_5 \mid \{O_2, O_3\}$ を発見する。ステ

ップ5： 端点の向きを変えない。

ステップ6： エンドポイントの方向性を決めない。

ステップ7： ルール1は、 $O_2 \circ-* O_4$ を $O_2 -\square O_4$ として、 $O_2 \circ-* O_3$ を $O_2 -\square O_3$ として配向させる。次に、ルール4は、 $O_1 \circ-* O_3$ を $O_1 \leftarrow \square O_3$ として、 $O_4 \circ-* O_5$ を $O_4 \leftarrow \square O_5$ として配向させる。次に、規則1が再び2回起動し、 $O_3 \circ-\circ O_4$ を $O_3 - O_4$ として方向付ける。最後に規則3も2回起動し、 $O_2 \square-\circ O_4$ と $O_2 \square-\circ O_3$ をそ

れぞれ $O_2 \sqcap O_4$ と $O_2 \sqcap O_3$ として方向付ける。したがって、ステップ7の配向ルールにより、図2eが得られる。

有向グラフが1つの潜在変数と選択変数を含むだけであることから、CCDはかなり優れた部分指向MAAGを出力すると予想される。しかし、CCDは図2eのようなグラフを出力する。この出力には、1つのエラー（ O_1 is not an ancestor of O_2 ）と、CCIによって配向された8つの未配向の端点が含まれている。

9. アルゴリズムの詳細

CCIの詳細を紹介する。本論文では、特に断りのない限り、環状および非環状有向グラフの両方に対して、本論文の記述が成立することを主張する。証明の大部分は第13節にある。

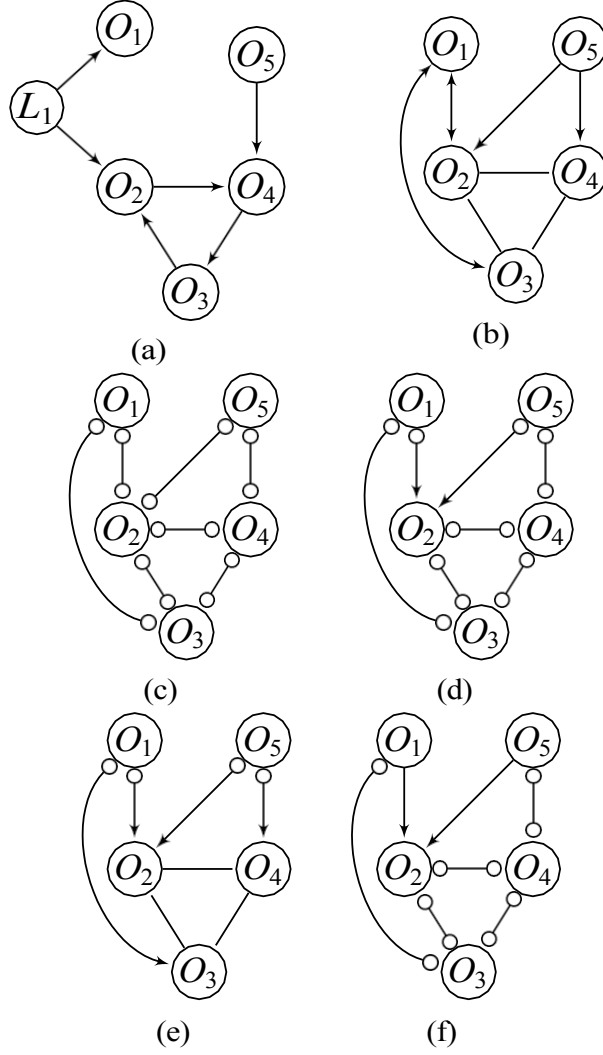


図2: CCIの実行例。(a)にグランドトゥールズ有向グラフを、(b)に対応するMAAGを示す。CCIのステップ1は(c)、ステップ2は(d)、ステップ7は最終出力(e)を出力する。一方、CCDは(f)を出力する。

9.1. ステップ1: スケルトン発見

まず、CIオラクルに相談することで、MAAGの骨格を発見する。
以下の結果は、すべての可能な分離集合を探索することができれば、MAAGの骨格を発見できることを実証する：

レマ1. O_i と O_j の間に誘導経路が存在するのは、 O_i と O_j が、 $W \subseteq O$ $\{O_i, O_j\}$ のすべての可能な部分集合に対して $W \sqsubseteq S$ が与えられたときに、*d-connected* である場合のみである。

しかし、すべての分離集合を検索するのは非効率的です。そこで、代わりに次のような集合を考えることにする：

定義3. (*D-SEP 集合*) 有向グラフ G において、 $O_k \sqsubseteq D-SEP(O_i, O_j)$ が存在するのは、 $ANC(\{O_i, \dots\} \sqsubseteq S)$ に観測値 $\Pi = \sqsubseteq O \sqsubseteq$ が存在する場合のみとする。 $\{O_k\}$ in $Anc(\{O_i, O_j\} \cup S)$ such that, any subpath $\sqsubseteq O_{h-1}, O_h, O_{h+1} \sqsubseteq$ on Π , we は、 O_{h-1} と O_h 間に、 O_h に入る誘導路があり、また、 O に入る誘導経路がある。
 O_{h+1} と O_h の間で、 O_h に入る誘導経路。

$D-SEP(O_i, O_j)$ と $D-SEP(O_j, O_i)$ は同等でない場合があることに注意してください。D-SEPセットは重要で、可能なすべての分離セットを検索することなく、誘導パスを発見するために使用することができるからです：

O_i と O_j の間に誘導パスが存在しない場合、 O_i と O_j は $D-SEP(O_i, O_j) \cup S$ が与えられると *d* 分離する。同様に、 O_i と O_j は $D-SEP(O_j, O_i) \cup S$ が与えられると *d* 分離する。

しかし、D-SEP集合は計算不可能である。そこで、D-SEP集合の

上位集合である計算可能なd-分離集合を考える：

定義4. (D分離可能集合) $O_k \in \text{PD-SEP}(O_i)$ とする。

が存在する場合に限り、任意の部分配向混合グラフ \tilde{G} において、パス Π が存在する。

\tilde{G} における O_i と O_k の間で、 Π 上のすべてのサブパス $\square O_{h-1}, O_h, O_{h+1}$)
に対して、以下のようなになる、

O_h が v -structure であるか、 $\square O_{h-1}, O_h, O_{h+1} \square$ が三角形を形成するかのいずれかです。

次のレンマは、D-SEPセットの代わりにPD-SEPセットを利用できることを示す：

レンマ3. O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合、 O_i と O_j は $MAAG \ G^r$ において $W \square \text{PD-SEP}(O_i)$ を持つ $W \square S$ が与えられると d 分離する。同様に、 O_i と O_j は、ある $W \square S$ で $W \subseteq \text{PD-SEP}(O_j)$ in G^r .

同様のレンマが非周期的な場合にも証明されていたことを思い出す (Spirites et al., 2000)。我々は、MAAGの骨格を発見する手順は、非周期的な場合のMAGのそれと同等であると結論付けている。

そして、アルゴリズム1のステップ1の正当性は、上記のレンマを、ステップ1で利用したPCのスケルトンおよびFCIのV構造発見手順によって発見された部分配向混合グラフである G^r に一般化することで得られる：

レンマ 4. G の O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合、 O_i と O_j は、 G^r の $W \sqsubseteq \text{PD-SEP}(O_i)$ を持つ $W \sqsubseteq S$ が与えられると d 分離する。同様に、 O_i と O_j は $W \subseteq S$ を持ついくつかの $W \sqsubseteq S$ が与えられると d 分離する。

G^r の $\text{PD-SEP}(O_i)$ 。

G^r を用いて形成された $\text{PD-SEP}(O_i)$ は、 G^r を用いて形成された $\text{PD-SEP}(O_i)$ の部分集合であるため、上記のレンマが成り立つ； $\text{PD-SEP}(O_j)$ も同様である。

9.2. ステップ2 & 3: 短距離・長距離の非先祖関係

V構造発見時に端点を方向付けるには、以下のレンマを用いる：

レンマ 5. 集合 $W \subseteq O \setminus \{O_i, O_j\}$ を考える。ここで、 O_i と O_k が $W \cup S$ で d -connected、 O_j と O_k が $W \cup S$ で d -connected であるとする。 O_i と O_j が $O_k \in W$ のように $W \cup S$ で d 分離している場合、 O_k は $\{O_i, O_j\} \cup S$ の先祖でないことがわかる。

O_i と O_k の間に誘導経路が存在し、 O_j と O_k の間に誘導経路が存在する場合、レンマ1により、 O_i と O_k は $W \sqsubseteq S$ が与えられれば d -connected、 O_j と O_k は $W \sqsubseteq S$ が与えられれば d -connectedであることを

思い出してください。さらに、 O_i と O_j が WUS で d -separated であれば、 O_i と O_j の間に誘導経路は存在しない。これは、図3aの部分配向 MAAG を扱っている場合、 O_i と O_j が $O_k \notin W$ のように WUS で d -separated **なら**、図3aの端点を図3bの矢尻のように方向づけることになる。したがって、Lemma 5は、短距離の非相関関係に対するCCIのステップ2における v -構造発見手順を正当化する。

なぜなら、 O_i 、 O_k 、 O_j 、 O_k は、MAAGの中で隣接している必要はないからである。実際、 O_k は O_i と O_j から離れた場所にあることもある。CCIはこのような長距離の関係を利用する。なぜなら、2つの環状有向グラフは d -separation relations では「局所的に」同意しても、離れた変数間のいくつかの d -separation 関係では同意しないことがあるからである (Richardson, 1994).

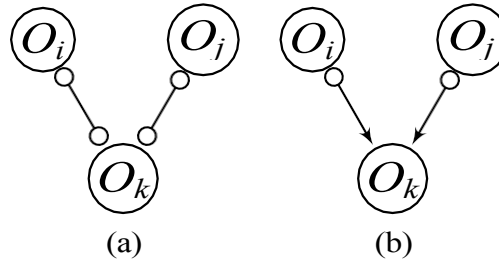


図3: CCIステップ2の後、(a)の非遮蔽トリプルから(b)のV字構造へ配向させたもの。

9.3. ステップ4: 最小でないD分離集合の発見

アルゴリズムは、追加のd-分離集合を見つけるために、ステップ3からのグラフを利用する。CCIのスケルトン発見フェーズでは、最小のd-分離集合を見つけるが、非最小のd-分離集合は、基礎となる環状因果グラフについてアルゴリズムに情報を与えることもできる。非周期的な場合、 $O_i \ast \rightarrow O_j \leftarrow \square O_k$ とすると、 O_i と O_j は、任意の $W \sqsubseteq O$ $\{O_i, O_j\}$ に対して $O_j \cup W \cup S$ があれば d-connectedである (Spirtes and Richardson, 1996) ことを思い出してください。しかし、環状の場合、同じ事実は成り立たない。例えば、図1aのグラフを考えてみよう。ここで、 X_1 と X_4 は、 ϕ が与えられるとd分離することが分かっているが、 $\{X_2, X_3\}$ が与えられるとd分離することも分かっている。さらに、図1bの対応するMAAGにおいて、 $O_1 \rightarrow O_3 \leftarrow O_4$ が存在することがわかる。

上記の例は、次のセクションで証明されるように、追加の円の端点を方向付けるために重要であることが証明される、追加のd-分離集合を検索する動機付けとなります。レンマ3から、 $PD-SEP(O_i)$ のある部分集合と $PD-SEP(O_k)$ のある部分集合は、**S**に追加条件をつけると O_i

と O_k を d 分離することが既に分かっています。そこで、 $\text{PD-SEP}(O_i)$ のすべての部分集合と $\text{PD-SEP}(O_k)$ のものをテストして追加の d 分離集合を探します。

ステップ 4 の詳細をアルゴリズム 2 にまとめる。このサブプロシージャは具体的には以下のように動作する。各 V 構造 $O_i * \rightarrow O_j \leftarrow \square O_k$ について、アルゴリズムは、最小分離集合 $\text{Sep}(O_i, O_k)$ の特定の su-persets を与えられた O_i と O_k が d 分離されるかどうかを決定する。特に、アルゴリズム 2 は、集合 $T = \text{Sep}(O_i, O_k) \cup O_j \cup W$ ($W \subseteq \text{PD-SEP}(O_i) \setminus \text{Sep}(O_i, O_k)$) を形成します。

7 行目で $\{\text{Sep}(O_i, O_k) \cup \{O_j, O\}\}$ とする。次に、アルゴリズムは、8 行目で $T \cup S$ を持つ CI オラクルを参照する。最後に、スケルトン発見フェーズと同様に、アルゴリズムは、まず CI オラクルに最小のサブセットを相談し、その後、そのような分離セット $T \cup S$ が見つかるか、 $\text{PD-SEP}(O_i) \setminus \{\text{Sep}(O_i, O_k) \cup \{O_j, O_k\}\}$ のすべてのサブセットがなくなるまで大きなサブセットへとプログレースする。

データです: G^\wedge 、CIオラクル

結果で G^\wedge 、SupSep

す:

1 $m = 0$

2 リピー

ト

3 くり返す

4 v-structure を持つ順序付きトリプル $\square O_i, O_j, O_k$ を選択しま
す。

$O_i * \rightarrow O_j \leftarrow \square O_k$ のような $|\text{PD-SEP}(O_i)| \geq m$

5 くり返す

6 サブセットを選択する

$W \subseteq \text{PD-SEP}(O_i) \setminus \{\text{Sep}(O_i, O_k) \cup \{O_j, O_k\}\}$ with m
かんてん

7 $T = W \cup \text{Sep}(O_i, O_k) \cup O_j$

8 $T \square S$ が与えられたとき、 O_i と O_k が d 分離していれ
ば、その集合 T を $\text{SupSep}(O_i, O_j, O_k)$ に記録する。

9 すべての部分集合 $W \subseteq \text{PD-SEP}(O_i) \setminus \{\text{Sep}(O_i, O_k) \cup \{O_j, O_k\}\}$ を検討するか、 $\text{SupSep}(O_i, O_j, O_k)$ に O_i と O_k の d 分割集合を記録するまで;

10 i -structure $O_i \rightarrow O_j \leftarrow O_k$ を持つすべてのトリプル (O_i, O_j, O_k) まで。

と $|PD-SEP(O_i)| \geq m$ が選択されています;

11 v 構造を持つすべての順序付き三重項 (O_i, O_j, O_k) まで。

$O_i \rightarrow O_j \leftarrow O_k$ は、 $|PD-SEP(O_i)| < m$ を有する;

アルゴリズム2: CCIのステップ4

9.4. ステップ5: 非最小d分離集合を用いたオリエンテーション

次のレンマは、前のステップで発見された非最小d-分離集合を利用するステップ5を正当化する:

レンマ6です。 頂点 $\square O_i, O_j, O_k, O_l \square$ の四重極を考える。があるとする:

1. O_i と O_k は非隣接です;
2. $O_i \ast \rightarrow O_l \leftarrow \square O_k$;
3. O_i と O_k は、 $O_j \in W$ と $W \subseteq$ を有するある $W \square S$ が与えられると d 分断される。
 $\bullet \diagup \{O_i, O_k\}$;
4. $O_j \square \rightarrow O_l$

$O_l \in W = \text{Sep}(O_i, O_k)$ とすると、 $O_j \ast \rightarrow O_l$ がある。 $O_l \in W = \text{SupSep}(O_i, O_j, O_k)$ とすると、さらに $O_i \ast \rightarrow O_j \leftarrow \square O_k$ とすると、 $O_j \square \rightarrow O_l$ となる。

上記のレンマは、ステップ4で発見された $\text{SupSep}(O_i, O_j, O_k)$ を利用していることに注意してください。

9.5. ステップ6: 遠距離祖先関係

次のような結果でステップ6を正当化することができます:

レムマ 7. $W \square S$ が与えられたとき、 O_i と O_k が d 分離している場合、
 $W \subseteq O \ominus \text{Sm}_{2296} \leftarrow \text{Sm}_{2296} \leftarrow \text{Sm}_{2296} \leftarrow \text{Sm}_{2296} \leftarrow S$
 $\{O_i, O_k\}$ 、 $Q \subseteq \text{Anc}(\{O_i, O_k\} \cup W \cup S) \diagup \{O_i, O_k\}$ 、 O_i と O_k も $Q \cup W \cup S$ があれば d 分離されることになる。

Q のすべての変数は $\{O_i, O_k\} \sqsubseteq W \sqsubseteq S$ の祖先であるため、上記のレンマによって長距離の祖先関係を推論できることに注目しよう：

コロラリ1。 O_i と O_k は $O_j \in W$ と $W \subseteq O \setminus \{O_i, O_k\}$ で $W \sqsubseteq S$ によって d 分断されているが、 O_i と O_k は $O_i \cup W \cup S$ によって d 接続されていると仮定する。そして O_i は $O_j \cup S$ の祖先ではないとする。

9.6. ステップ7：オリエンテーションルール

次に、ステップ7でのオリエンテーションルールについて説明する。オリエンテーションルールは常にステップ6の後に適用され、したがってv-構造発見後にも適用されることに注意する。この順序付けは、 O_i と O_j が非隣接で、 $O_i * - * O_k * - * O_j$ があり、 $O_i * \rightarrow O_k \leftarrow * O_j$ がない場合、 $O_k \in \text{Sep}(O_i, O_j)$ を意味する；これは、もし $O_k / \in \text{Sep}(O_i, O_j)$ ならば、v-structure discoveryによって $O_i * \rightarrow O_k \leftarrow \square O_j$ を持つことになるからです。

9.6.1. 第1回から第3回までのオリエンテーションのルール

レンマ5により、非祖先関係を推論することができる。次のレンマにより、祖先関係を推論することができる：

レンマ8. $W \setminus \{O_i, O_k\}$ が存在し、すべての適切な部分集合が $V \subset W$ は $V \cup S$ が与えられた O_i と O_k を d -connect している。 O_i と O_k が $O_j \in W$ が与えられた $W \cup S$ で d -separated であれば、 O_j は $\{O_i, O_k\} \cup S$ の祖先となる。

上記のレンマは、以下のオリエンテーションルールを正当化するものである：

レンマ9 $O_i \square \rightarrow O_j \circ \cdot * O_k$ で O_i と O_k が非隣接の場合、 $O_j \circ \cdot * O_k$ を $O_j - \square O_k$ として配向する。

証明する。 $O_i * \rightarrow O_j \circ \cdot * O_k$ で O_i と O_k が非隣接の場合、すでに v 構造発見を行っているので $O_j \in \text{Sep}(O_i, O_k)$ となる。レンマ8により、 $O_j \in \text{Anc}(\{O_i, O_k\} \cup S)$ となることがわかる。より具体的には、 $O_i * \rightarrow O_j$ という矢文が $O_j / \in \text{Anc}(O_i \cup S)$ を意味するため、 $O_j \in \text{Anc}(O_k)$) と分かる。

例えば、図4aのような構造であれば、図4bのようにundi-rected edgeを追加することができます。

また、いくつかの追加条件が満たされれば、図4bの O_k 、矢印を追加することができる。次のレンマは、サイクルを使った因果関係の発見の中心的なものである：

レンマ10 $O_i * \rightarrow O_j - O_k$ で O_i と O_k が非隣接であるとする、 O_i

$* \rightarrow O_j$ は O_i, O_j, O_l ($l \neq k$) で $O_j - O_l$ と $O_i * \rightarrow O_l$ を含む三角形内に存在する。さらに、 O_l と O_k の間には、 O_j を含まない無向きのエッジの並びが存在する。

上記の文は一見難解に見えるかもしれないが、複数のオリエンテーションルールを正当化するものである。

以下の定義は、レンマ10を適用する上で有用である：

定義5 (潜在的無向パス) 潜在的無向パス Π は

は、 Π 上のすべての端点がテールまたはサークルである場合にのみ、 O_i と O_j の間に存在する。

定義6. (潜在的2-三角形化) 辺 $O_i * - * O_j$ は、以下の場合に限り、潜在的2-三角形化であると言う...。 O_k は、(1) O_i, O_j と他の頂点 O_l が三角形になる場合、(2) $O_j - O_l, O_j \circ - O_l, O_j \circ - O_k$ または $O_j \circ \circ - O_l$ を持つ場合にのみ可能、

(3) $O_i \square \rightarrow O_l$ または $O_i \square \circ - O_l$ があり、(4) O_l と O_k の間には、 O_j を含まない無向性の経路が潜在的に存在すること。

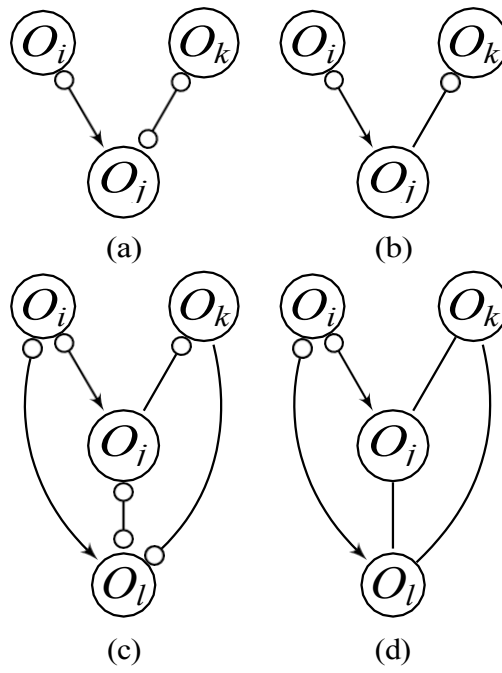


図4: ルール1の最初の部分は、グラフ(a)を(b)に向かわせるものである。ただし、 $O_i \rightarrow O_j$ は、(c)の O_k に対して潜在的に2三角形であるため、規則1の後半は発動しない。しかし、さらに $O_j - O_k$ があれば、ルール3で3つの端点を方向付けることができ、(d)が得られます。

これで、ポテンシャル2三角形の概念を利用した3つのオリエンテーションルールが完成しました：

Lemma 11. 以下のオリエンテーションルールは健全である：

#1. $O_i * \rightarrow O_j \circ * O_k$ で O_i と O_k が隣接していない場合、 $O_j \circ * O_k$ を $O_j - \square O_k$ として方向づける。さらに、 $O_i * \rightarrow O_j$ が O_k に対して潜在的に2-triangulatedでない場合、 $O_j \circ * O_k$ を $O_j \rightarrow O$ として配向する。_k

#2. $O_i - \square O_j \circ - \square O_k$ で O_i と O_k が隣接しておらず、 $O_j \circ - \square O_k$ が O_i に対して潜在的に2三角形分割されていない場合、 $O_j \circ - \square O_k$ を $O_j - \square O_k$ として方向付ける。

#3. $O_i * \rightarrow O_j - O_k$ で、 O_i と O_k が隣接しておらず、 $O_i * \rightarrow O_j$ が O_k と潜在的に2三角形になるとします。 $O_i * \rightarrow O_j$ が潜在的に2三角形になるとします。 O_i, O_j, O_l を含む三角形の頂点 O_l を1つだけ使って O_k を *r.t.* できる場合、 $O_i \square \circ O_l$ を $O_i * \rightarrow O_l$ 、 $O_j \circ - \square O_l$ を $O_j - \square O_l$ および/または $O_j \square \circ O_l$ を $O_j \square - O_l$ と方向づける。次に、 O_l と O_k の間に潜在的な無向パス $\Pi_{O_l O_k}$ が1つだけ存在する場合、 $\Pi_{O_l O_k}$ 上のすべての円の端点を尾の端点で置き換える。

証明する。 以下の論証は、関連するオリエンテーションルールに対応している：

#1. 最初の部分は、レムマ8から導かれる。第2部分は、レンマ10の逆接により、導かれる。

#2. 仮に、 $O_i - O_j$ と $O_j \leftarrow \square O_k$ があるとします。しかし、これはレンマ

10に矛盾する。代わりに、 $O_i \rightarrow O_j$ と $O_j \leftarrow *O_k$ があったとします。しかし、 $O_j \in \text{Sep}(O_i, O_k)$ がわかっているので、レンマ8により $O_j \in \text{Anc}(\{O_i, O_k\} \cup \mathbf{S})$ となり、矢印は別の矛盾を生じさせる。

#3.Lemma 10から直接導かれる。

□

例えば、 $O_i \circ \rightarrow O_j$ は、図4aでは潜在的に三角形になっていない（変数が3つしかない）ので、最初の配向規則に従って、終点 $O_j \circ \rightarrow O_k$ を $O_j \rightarrow O_k$ として配向することができます。一方、 $O_i \circ \rightarrow O_j$ は、図4cの O_k と三角形になる可能性があるので、 O_k の円の端点を矢印のように方向付けることはできない。しかし、さらに $O_j - O_k$ があれば、ルール3を適用して $O_j \circ \rightarrow O_l$ を $O_j - O_l$ として、 $O_l \circ \rightarrow O_k$ を $O_l - O_k$ として、最終的に図4dが得られるように方向づけることができる。

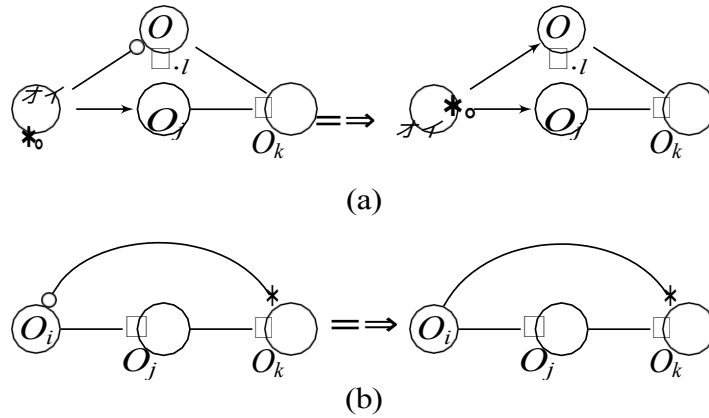


図5】 (a) のルール4と (b) のルール5の例をそれぞれ示す。

9.6.2. 第4回・第5回オリエンテーションルール

Lemma 12. 以下のオリエンテーションルールは健全である：

#4. $O_i \rightarrow O_j \rightarrow O_k$ のとき、 $O_k \rightarrow O_i$ に少なくとも $n \geq 3$ の頂点を持つパス $\Pi = \langle \dots \rangle$ が存在する、 $O_i \rightarrow O_k$ のように少なくとも $n \geq 3$ の頂点を持つパスが存在し、 $O_h \rightarrow O_{h+1}$ が、 $O_l \rightarrow O_{l+1}$ を持つたった一つのインデックス l を除くすべての $1 \leq h \leq n-1$ に対して存在し、 $O_l \rightarrow O_{l+1}$ を $O_l \leftarrow O_{l+1}$ として方向づける。

#5. 頂点 O_1, \dots の列があるとする。、 $O_n \rightarrow O_i \rightarrow O_{i+1}$ で $1 \leq i \leq n-1$ となり、 $O_1 \rightarrow O_n$ となるように、 $O_1 \rightarrow O_n$ を $O_1 \leftarrow O_n$ として方向付ける。

証明する。 以下の論証は、関連するオリエンテーションルールに対応している：

#4. 矛盾のために、 $O_l \rightarrow O_{l+1}$ があったとします。しかし、そうする

と O_j は尾の過渡性によって $O_i \cup S$ の祖先となる。

#5.尾の推移性によって続く。

□

図5a、図5bにルール4、ルール5の例をそれぞれ示す。

9.6.3. 第6回・第7回オリエンテーションルール

CCIアルゴリズムにはさらに2つのオリエンテーションルールがあり、最初のオリエンテーションルールの適用を成功させる必要があります。まず、以下の定義が必要である：

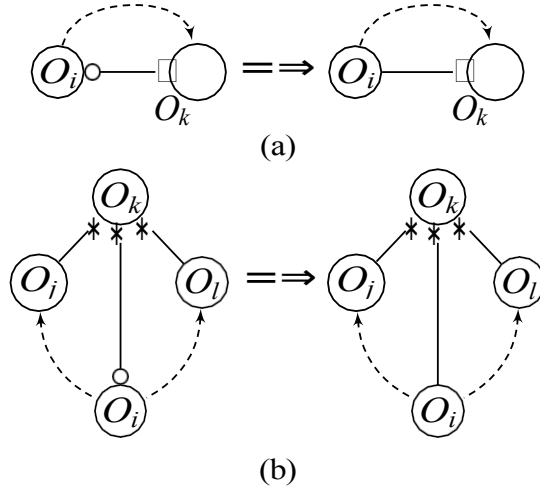


図6: (a)と(b)のそれぞれのルール6と7。点線は非ポテンシャル2三角形化パスを示す。

定義7. (非-潜在的2-三角形パス) パス $\Pi = \square O_1, \dots, O_n$ である。

は、以下の条件が成立する場合、非電位的2三角形化であるという：

1. $n \geq 3$ の場合、頂点 O_{i-1} 、 O_{i+1} は、あらゆる点で非隣接である。
2. $2 \leq i \leq n-1$ (すなわち、連続するすべてのトリプルが非隣接である)、および

$O_{i-1} \ast \ast O_i \ast \ast O_{i+1}$ は、 $2 \leq i \leq n-1$ のすべてについて非-構造である。

2. $n \geq 4$ の場合、頂点 $O_i \ast \ast O_{i+1}$ は潜在的に2三角形化されることはない
w.r.t. O_{i+2} for every $1 \leq i \leq n-3$.

以下のオリエンテーションルールは、上記の定義を利用しています：

レマ13 以下のオリエンテーションルールは健全である：

#6. $O_k \square \circ O_i$ とすると、非摂理的な2三角形のパスが存在する。

$\pi = \square O_i, O_j, O_l, \dots, O_k \square O_k \square \circ O_i$ が潜在的に2三角形化されていないよ

うなもの。

w.r.t. O_j 、 $O_j \square \square O_i \square \square O_k$ が非構造である場合、orient $O_k \square \square O_i$ を $O_k \square \square O_i$ としています (図6a)。

#7. $O_i \circ \square O_k$ 、 $O_j \square \square O_k \square \square O_l$ 、 O_i から O_j への非潜在的2三角形パス Π_1 、 O_i から O_l への非潜在的2三角形パス Π_2 を持っているとする。
 O_m を Π_1 上の O_i に隣接する頂点 (O_m は O_j になりうる) とし、 O_n を Π_2 上の O_i に隣接する頂点 (O_n は O_l になりうる) とする。

さらに $O_m \ast \dots \ast O_i \ast \dots \ast O_n$ が非構造で、 $O_i \circ \ast O_k$ が O_n と O_m の両方に対して潜在的に 2-triangulated ではない場合、 $O_i \circ \ast O_k$ を $O_i - \square O_k$ として方向づける (図6b)。

証明する。以下の論証は、対応するオリエンテーション・ルールにも適用される：

#6. 矛盾のために、 $O_i \leftarrow \square O_k$ があるとする。すると、追加された尾部の推移が O_i の矢印と矛盾するまで、 Π に最初の方位規則を繰り返し適用することができます。

#7. 矛盾のために、 $O_i \leftarrow \square O_k$ があるとします。そして、 Π_1 か Π_2 (あるいはその両方) に沿って、最初の配向規則を繰り返し適用する。いずれにせよ、 $O_i \in \text{Anc}(O_k \cup \mathbf{S})$ は、追加された尾部の推移により、 O_i での矢面に矛盾する。

□

10. 実験風景

次に、実証結果を報告する。

10.1. 合成データ

以下の手順で、近傍サイズ $E(N)=2$ 、頂点数 $p = 20$ のガウス型有向環状グラフ (少なくとも1つのサイクルを持つ有向グラフ) をランダムに1000個生成した。まず、 $\text{Bernoulli}(E(N)/(2p))$ の独立した実測値で random隣接行列 B を生成した。

-2))の確率変数を対角線外のエントリに使用する。そして、 B の非ゼロ項目をUniform([-1, -0.1] \cup [0.1, 1])確率変数の独立した実測値で置き換える。非ゼロエントリ B_{ij} は、以下の線形モデルにおいて、係数 B_{ij} を持つ X_i から X_j への辺と解釈できる：

$$X_i = \sum_{r=1}^p B_{ir} X_r + \varepsilon_i, \quad (3)$$

について、 $i = 1, \dots, p$ ここで、 $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_p$ は相互に独立な $N(0, 1)$ 個の確率変数である。変数 X_1, \dots, X_p は、平均ベクトル 0、共分散行列 $\Sigma = (I - B)^{-1} (I - B)^{-T}$ を持つ多変量ガウス分布となる、ここで、 I は $p \times p$ の恒等式行列である。

同様に、同じパラメーターを持つ1000個のランダムなガウスDAGを生成したが、各ランダム隣接行列 B は、下三角形と対角線外のエントリーにベルヌーイ ($E(N) \sim (p-1)$) 確率変数の独立した実測値で作成した (Colombo et al, 2012)。

各DCGとDAGに以下のように潜在変数と選択変数を導入した。まず、0-3個の潜在的な共通原因 L の集合を、置換なしでランダムに選択した。次に、少なくとも2つの親を持つ頂点 $X \setminus L$ から、0-3個の選択変数 S のセットを置換なしで選択した。最終的に、1000個のDCGと1000個のAGのそれぞれについて、500、1000、5000、10000、50000、100000のサンプルサイズを持つデータセットを作成した。DAGを作成した。そのため、合計 $1000 \times 6 \times 2 = 12000$ 個のデータセットを作成した。

10.2. アルゴリズム

以下の4つのCBアルゴリズムを比較した。また、各アルゴリズムの前提条件を列挙する：

1. CCI: 非環状または環状で線状のSEM-IE
2. FCI: 非周期的
3. RFCI: 非周期的
4. CCD: 非周期的または周期的で線形SEM-IEを持つ、潜在変数なし²

すべてのアルゴリズムは、さらにd-separationの忠実性を仮定している。CCIのみがCLSの下で音を再現している。 α をサンプルサイズ500

と1000では1E-2、5000と10000では1E-3、それ以外では1E-4に設定して、Fisherのz-testを使用してすべてのアルゴリズムを実行しました。一貫性を確保するために、サンプルサイズが大きくなるとp値が小さくなることを要求していることを思い出してください（Kalisch and Bühlmann, 2007, Colombo et al., 2012）。

10.3. メトリックス

補正されたオラクルグラフに対する構造的ハミング距離（SHD）（Tsamardinos et al, 2006）を用いてアルゴリズムを評価した。補正されたオラクルグラフは以下のように構築する。まず、CIオラクルを持つアルゴリズムを実行し、オラクルグラフを取得する。次に、不正確な矢じりを

²CCDは(Richardson and Spirtes, 1999)で提案されたような選択バイアスを扱うことはできませんが、証明を修正すれば、このアルゴリズムでも可能かもしれません。

テール、またその逆も同様である。例えば、オラクルグラフに $O_i \ast \rightarrow O_j$ があるが、 $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ の場合、 $O_i \ast \rightarrow O_j$ を $O_i \square - O_j$ に置き換えます。健全なアルゴリズムは、アルゴリズムの仮定が満たされているならば、常に修正を必要としないオラクルグラフを出力します。

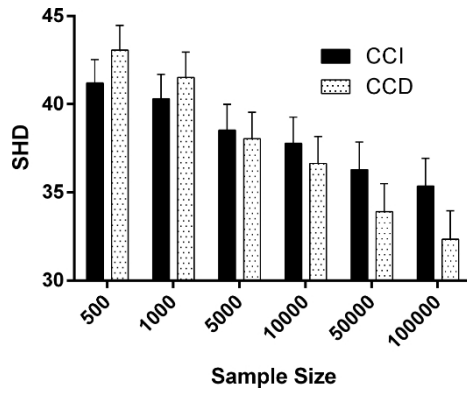
10.4. サイクリック・ケース

まず、周期的なケースでCCIとCCDを比較した。ここでは、CCDが潜在的な共通原因を扱えないため、CCIがCCDを上回ることが期待する。その結果を図7にまとめた。予想に反して、6つのサンプルサイズのうち最大の4つのサンプルサイズにおいて、CCDがCCIを有意に上回ることがわかった（図7a; $\min t = -2.94, p = 3.34\text{E-}3$ ）。また、CCDはCCIよりもはるかに短い時間で完了した（図7b）。しかし、CCIは複数の方位規則を適用することで、CCDよりも長距離の推論を行うことを想起してほしい。そこで、CCIからORを引いたCCI-OR（CCI-OR）でも、CCIとCCDを公平に比較することができた。CCI-ORは、すべてのサンプルサイズにおいてCCDを上回った（最大 $t = -26.64, p < 2.2\text{E-}16$; 図7c）。さらに、CCIの配向ルールをCCDに追加し、CCDプラスOR（CCD+OR）と呼ぶことにした。CCIは、すべてのサンプルサイズにおいてCCD+ORを再び上回った（最大 $t = -13.13, p < 2.2\text{E-}16$; 図7d）。このように、CCIは配向規則を考慮すると、CCDよりも優れていると結論づけられる。

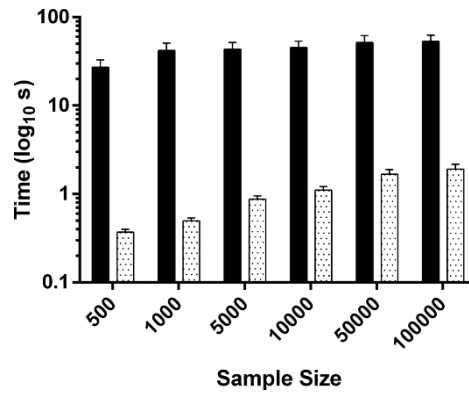
10.5. 非周期的な場合

次に、非周期的なケースでCCIとFCIおよびRFCIを比較した。CCIは非周期性を仮定していないため、平均してFCIやRFCIよりも性能が劣ることが予想される。しかし、CCIが大きく劣ることはないだろうと期待する。

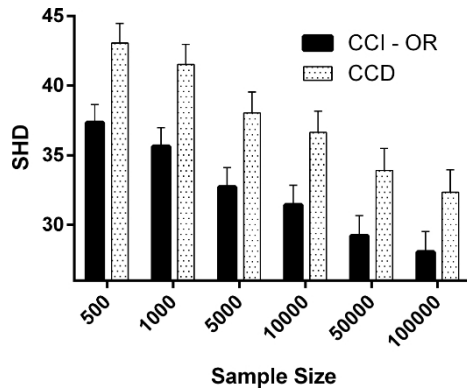
SHDの結果を図8aに、タイミングの結果を図8bにまとめている。CCIは、サンプルサイズ ≤ 10000 でFCIよりも非周期的な因果グラフを有意差をもって回収した ($\min t = 4.23, p = 2.59E-5$)。それ以上のサンプルサイズでは、統計的に有意な差は見られなかった ($p > 0.05/6$)。また、サンプルサイズが1000から10000の場合、CCIはRFCIよりも優れていた ($\min t = 2.78, p = 5.50E-3$)。しかし、その効果は非常に小さく、CCIは、すべてのサンプルサイズにおいて、FCIおよびRFCIよりも平均SHDが最大0.91ポイント大きかった。CCIはFCIとRFCIに比べ、非周期的な原因では劣るが、ごく僅かな差であると結論付けた。



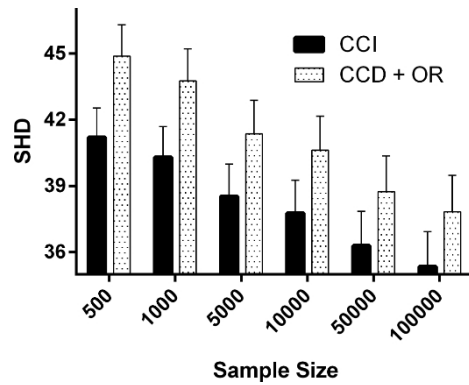
(a)



(b)



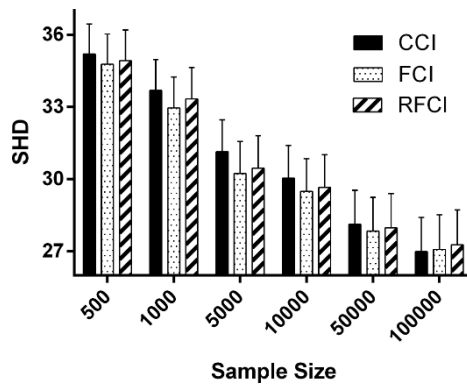
(c)



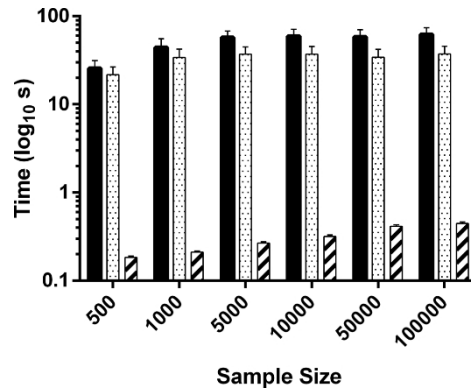
(d)

図7: 潜在変数と選択バイアスを含む周期的グラフの回復におけるCCIとCCDの比較。エラーバーは常に平均値の95%信頼区間を表す。

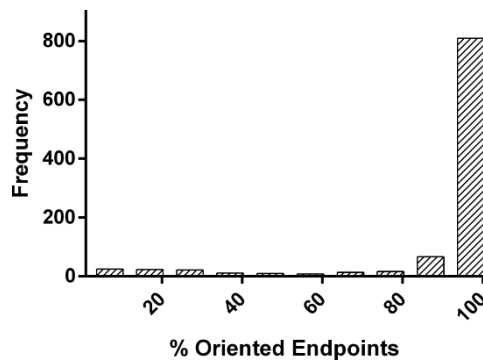
(a) CCDは、サンプルサイズが1000を超える場合、CCIより優れている。(b) CCDもCCIより実行時間が短い。しかし、(c)ではCCI-ORがCCDを上回った。(d)では、CCIがCCD+ORを上回った。



(a)



(b)



(c)

図8: 潜在変数と選択バイアスを持つ非周期グラフの回復におけるCCIとFCIおよびRFCIの比較。(a) FCIとRFCIは、サンプルサイズにおいて、わずかな差でCCIを上回った。
 ≤ 10000 。(b) CCIはFCIよりも完了までに若干時間がかかる。(c) CCIは、FCIでオリエンテーションした端点の大部分をオリエンテーションする。

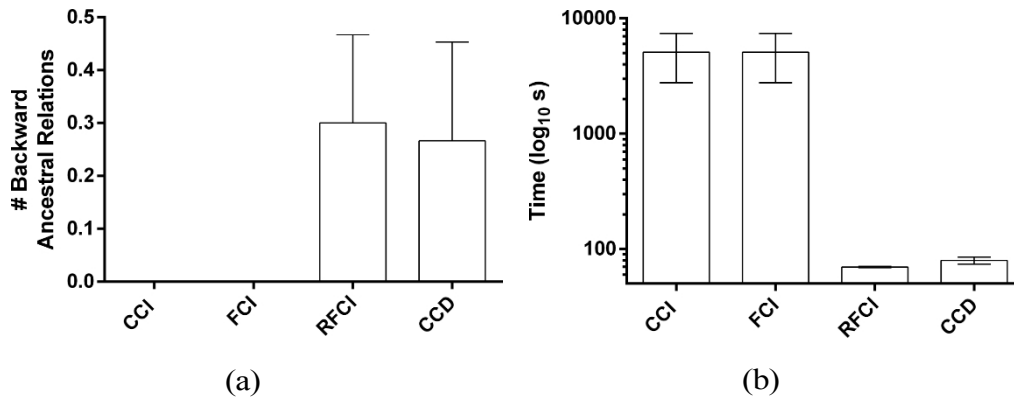


図9: 実データを用いたアルゴリズムの結果。(a) FCIとCCIは、後方祖先関係を発見しないため、最も優れた性能を示す。(b)ただし、これらのアルゴリズムは、いずれも他のアルゴリズムよりはるかに長い時間を要する。

また、非周期的な場合、FCIと比較してCCIは何本の端点を配向させることができるのか、という疑問にも答えようとした。FCIは非周期性を仮定しているのに対し、CCIは仮定していないため、CCIがFCIの指向する端点の100%を指向することは不可能である。しかし、理想的には、非周期的な場合、CCIがFCIによって方向づけられた端点のほとんどを方向づけるようにしたい。

この疑問に答えるため、CIオラクルを用いて1000個のランダムなDAGに対してCCIとFCIアルゴリズムを実行した。CCIはFCIによって配向された端点の89.98%(SE: 0.74%)を平均して配向した。さらに、パーセンテージのヒストグラムは重い左スキューを持ち（図8c）、CCI対FCIの中央値は100%であった。このことから、非周期的なケースでは、FCIによって配向された端点の大部分をCCIが配向していると結論づけられる。

10.6. リアルデータ

我々は最終的に、科学者が心臓の健康に関連する様々な臨床変数を測定したFramingham Heart Study (Mahmood et al., 2014)からの一般に入手可能な縦断データセットで、RCoT (Strobl et al., 2017) というノンパラメトリックCI検定を $\alpha = 0.01$ で使用して同じアルゴリズムを実行しました。このデータセットには、28の変数、3つの波、リストワイズ削除を実行した後の2008のサンプルが含まれています。2つの変数を除くすべての変数が、3つのウェーブすべてで測定されました。

この場合、ゴールドスタンダードの解集合を入手することはできないことに注意してください。しかし、時間情報を利用することで、近似的な解集合を作成することができます。

である。このため、波 b の変数は、波 $a < b$ の変数の祖先にはなれない。部分配向MAAGの観点からは、これは、波 b の頂点に尾と矢尻の両方を持つ波 a と波 b 間のエッジが不正確であることを意味する。そこで、時間的に逆方向を向いた誤った祖先関係の平均数を用いて、アルゴリズムを評価した。30個のブートストラップデータセットで平均した結果を図9aに要約した。FCIとCCIはCCDを大幅に上回っており、FCIとCCIはエラーを起こさない ($t=2.80$, $p=8.90E-3$) ことがわかる。さらに、RFCIは最悪の結果を示し、速度のために支払わなければならない代償が浮き彫りになった (図9b)。我々は、潜在的な変数を考慮することでこのデータセットでより正確な因果関係の発見ができるようになりました。

11. 結論

本報告では、循環的な因果過程を線形SEM-IEとして表現できることを条件に、CLSで因果発見を行うためのCCIというアルゴリズムを紹介した。私が知る限り、CCIはこれまでに提案された最も一般的なCBアルゴリズムである。前節の実験結果は、選択バイアス、潜在変数および/またはサイクルを許容しない従来のアルゴリズムと比較した場合、CCIの優れた性能または同等の性能を強調するものである。

参考文献 参考文献

D.コロンボ、M.マーティウス、M.カリーシュ、T.リチャードソン。
高次元有向非循環グラフを潜在変数と選択変数で学習する。その

ため、このような問題を解決するために必要な情報を提供する。
URL <http://projecteuclid.org/euclid.aos/1333567191>.

P.ダグム、A.ガルパー、E.ホービッツ、A.シーヴァー。不確実な推論
と予測。 *International Journal of Forecasting*, 11:73-87, 1995.

R.J. Evans. ベイジアンネットワークのマージンのためのグラフ。
Scandinavian Journal of Statistics, 43(3):625-648, 2016.

F.M. Fisher. 連立方程式モデルに対する対応原理. *Econometrica*,
38(1):73-92, 1970. URL [https://EconPapers.repec.org/
RePEc:ecm:emetrp:v:38:y:1970:i:1:p:73-92](https://EconPapers.repec.org/RePEc:ecm:emetrp:v:38:y:1970:i:1:p:73-92).

- A. Hyttinen, P. O. Hoyer, F. Eberhardt, and M. Järvisalo. 潜在変数による周期的な因果モデルの発見：潜在変数による周期的因果モデルの発見：一般的なSat-basedプロセス。In *Proceedings of the Twenty-Ninth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, UAI 2013, Bellevue, WA, USA, August 11-15, 2013*. URL https://dslpitt.org/uai/displayArticleDetails.jsp?mmnu=1&smnu=2&article_id=2391&proceeding_id=29.
- M. Kalisch and P. Bühlmann. pc-algorithmによる高次元有向非周期グラフの推定. *J. Mach. Learn. Res.*, 8:613-636, 2007年5月。issn 1532-4435. URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1248659.1248681>.
- S.L. Lauritzen と T. S. Richardson. チェーングラフモデルとその因果関係の解釈。 *王立統計学会誌：(統計手法)*, 64(3):321-348, 2002. doi: 10.1111/ 1467-9868.00340. URL <https://rss.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/1467-9868.00340>.
- S.L. Lauritzen, A. P. Dawid, B. N. Larsen, and H. G. Leimer. 有向マルコフ場の独立性。 *Networks*, 20(5):491-505, Aug. 1990. doi: 10.1002/net.3230200503. URL <http://dx.doi.org/10.1002/net.3230200503>.
- S.S. Mahmood, D. Levy, R. S. Vasan, and T. J. Wang. The framingham heart study and the epidemiology of cardiovascular disease: a historical perspective. *The Lancet*, 383(9921):999 - 1008, 2014. ISSN 0140-6736. doi: [http://doi.org/10.1016/S0140-6736\(13\)61752-3](http://doi.org/10.1016/S0140-6736(13)61752-3). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0140673613617523>.
- C. ミーク因果推論と背景知識による因果説明。 In *Proceedings of the Eleventh Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, UAI'95*, pages 403-410, San Francisco, CA, USA, 1995. Morgan Kaufmann Publishers Inc. ISBN 1-55860-385-9. URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2074158.2074204>.

J.M. Mooij と T. Heskes.連続エクイリブリアムデータからの周期的な因果関係発見。In A. Nicholson and P. Smyth, editors, *Proceedings of the 29th Annual Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI- 13)*, pages 431-439.AUAI Press, 2013.URL [http://auai.org/uai2013/ prints/papers/23.pdf](http://auai.org/uai2013/prints/papers/23.pdf)。

J.パール因果関係：モデル、推論、推察。Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2nd edition, 2009.ISBN 052189560X, 9780521895606.

T.リチャードソン環状グラフモデルの特性.修士論文、カーネギーメロン大学、1994年。

T.リチャードソン有向環状グラフの発見アルゴリズム。In *Proceedings of the Twelfth International Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, UAI'96, pages 454-461, San Francisco, CA, USA, 1996.モルガン・カウフマン・パブリッシャーズ・インクISBN 1-55860-412-x.URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2074284.2074338>.

T.リチャードソン、P.スパーテス。線形フィードバックの下での自動的な因果関係発見。In *Computation, Causation, and Discovery*, pages 253-302.AAAI Press, Menlo Park, CA, 1999.

T.リチャードソン、P.スパーテス。祖先のグラフマルコフモデル。*Annals of Statistics*, 30:2002, 2000.

K.Sachs, O. Perez, D. Pe'er, D. A. Lauffenburger, and G. P. Nolan. マルチパラメータ単一細胞データから導き出される因果的なタンパク質シグナルネットワーク。 *Science*, 308(5721):523-529, Apr 2005.

P.Spirtes. フィードバックモジュールの有向環状グラフ表現。人工知能における不確実性についての第11回会議、UAI'95、ページ491-498、サンフランシスコ、カリフォルニア、USA、1995年において。モルガン・カウフマン・パブリッシャーズ・インク.ISBN 1-55860-385-9.URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2074158.2074214>.

P.Spirtes and T. Richardson.潜在変数と選択バイアスの存在下でダグ同

値性を決定するための多項式時間アルゴリズム.*Proceedings of the 6th International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics*, 1996.

P.Spirtes, C. Meek, and T. Richardson. ラテン変数と選択バイアスの存在下での因果推論。 In *Proceedings of the Eleventh Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, UAI'95, pages 499–506, San Francisco, CA, USA, 1995. Morgan Kaufmann Publishers Inc. ISBN 1-55860-385-9. URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=2074158.2074215>.

P.Spirtes, C. Meek, and T. Richardson. 潜在変数と選択バイアスの存在下での因果推論のためのアルゴリズム。 *計算、因果関係、および発見*、 ページ211-252で。 AAAI Press, Menlo Park, CA, 1999.

P.スピルテス、C.グリモア、R.シャイネス。 *因果関係、予測、そして探索*。 MIT press, 2nd edition, 2000.

E.Strobl. 非定常フィードバック下での因果関係発見. 2017年7月の記事。
URL

<http://d-scholarship.pitt.edu/32790/>。

E.V. Strobl, K. Zhang, and S. Visweswaran. Fast Non-Parametric Causal Discovery のための近似カーネルベース条件付き独立性検定。 2017. URL <http://arxiv.org/abs/1702.03877>.

I.Tsamardinos, L. E. Brown, and C. F. Aliferis. ベイジアンネットワーク構造学習アルゴリズム *Mach.Learn.*、 65(1):31- 78、 Oct. 2006. ISSN 0885-6125. doi: 10.1007/s10994-006-6889-7. URL <http://dx.doi.org/10.1007/s10994-006-6889-7>.

J.Zhang. 潜在的交絡因子と選択バイアスが存在する場合の原因究明のためのオリエンテーションルールの完全性について。 *Artif.Intell.*, 172(16-17) : 1873-1896, Nov. 2008. ISSN 0004-3702. doi: 10.1016/j.artint.2008.08.001. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.artint.2008.08.001>。

12. 付録アルゴリズム

PC、FCI、RFCI、CCDの各アルゴリズムで開発されたアイデアを

CCIの構築に活用する。そこで、次の4つのサブセクションでPC、FCI、RFCI、CCDを簡単に説明する。

12.1. PCアルゴリズム

PCアルゴリズムでは、以下の問題を考える：Pが未知のDAG G に対してd-分離忠実であると仮定する。そして、Pにおける任意の $W \subseteq X \setminus \{X_i, X_j\}$ の変数 X_i と X_j のペア間の条件付き独立性についてのオラクル情報が与えられたら、基盤となるDAGをできるだけ多く再構築する。PCアルゴリズムは、最終的にDAGをマルコフ同値類まで再構築することで、この目標を達成する。

\mathbf{X} の変数間の条件付き依存・独立関係が同じであるDAG (Spirtes et al, 2000, Meek, 1995)。

PCアルゴリズムは、DAGのマルコフ同値クラスを完成された部分有向無サイクルグラフ (CPDAG) を用いて表現します。部分有向非循環グラフ (PDAG) とは、有向および無向のエッジを持つグラフである。PDAGは以下の条件が成立するときに完成する: (1)すべての有向辺は、そのDAGのマルコフ同値クラスに属するすべてのDAGにも存在し、(2)すべての無向辺 $X_i - X_j$ に対してマルコフ同値クラスに $X_i \rightarrow X_j$ のDAGと $X_i \leftarrow X_j$ のDAGが存在する。CPDAGの各辺も以下の解釈を持つ:

(i) 2つの頂点 X_i と X_j の間にエッジ (有向または無向) が存在しないのは、 $X_i \perp\!\!\!\perp X_j \mid \mathbf{W}$ が存在するような $\mathbf{W} \subseteq \mathbf{X} \setminus \{X_i, X_j\}$ が存在する場合のみである。

(ii) X_i から X_j への有向辺が存在する場合、 $X_i \in \text{Pa}(X_j)$ となる。

PCアルゴリズムは、3段階の手順でCPDAGを学習する。ⁱⁱまず、アルゴリズムは完全連結の無向グラフを初期化し、次に以下の事実を用いて各無向辺の有無を決定する: d-separation faithfulnessの下、 X_i と X_j が $\text{Pa}(X_i) \setminus X_j$ のある部分集合または $\text{Pa}(X_j)$ 坊主のある部分が与えられた条件付独立であればのみ X_j は非同一となる。なお、PCは無向グラフを用いると、ある頂点の親と子をその近傍から区別することはできない。したがって、PCは、最終的な隣接関係を決定するために、 $\text{Adj}(X_i) \setminus X_j$ のすべての部分集合と $\text{Adj}(X_j$

) X_i のすべての部分集合 ($\text{Adj}(X_i)$ は $G(\text{Pa}(X_i))$ の上位集合) において X_i に隣接する頂点を表す) が与えられたときに、 X_i と X_j が条件付き独立かどうかをテストする; このPCのサブプロセスをスケルトン発見と呼び、その擬似コードをアルゴリズム3に示します。したがって、PCアルゴリズムは、このような条件付き独立性が見つかれば、スケルトン発見時に X_i と X_j の間のエッジを削除する。

PCアルゴリズムのステップ2では、アルゴリズムのスケルトン発見フェーズで X_i と X_k を条件付きで独立させた変数のセットに X_j がいない場合、遮蔽されていないトリプルを v 構造に配向させる $X_i \rightarrow X_j \leftarrow X_k$ を行う。PCアルゴリズムの最終段階では、できるだけ多くの尾を矢印に置き換えるために、3つの方向ルールを繰り返し適用する (Meek, 1995)。

データです: CIオラクル

結果です: G^\wedge , Sep, M

1 完全なグラフを形成する G^\wedge を頂点とする O 上の $\circ-\circ$ 。

2 $l \leftarrow -1$

3 **リピート**

4 $l = l + 1$ とする。

5 **くり返す** **する**

6 G^\wedge のすべての頂点
を対象とする

7 $\text{Adj}(O_i)$ を計算する。

8 **エンド**

9 隣接する頂点の新しい順序ペア (O_i, O_j) を選択する。

O_j を G^\wedge の中で満たし、 $|\text{Adj}(O_i) \cap \text{Adj}(O_j)| \geq l$

10 **くり返す**

11 新しい集合 $W \subseteq \text{Adj}(O_i) \setminus \text{Adj}(O_j)$ で $|W| = l$ を選ぶ。

12 **if** $O_i \perp O_j$ **then**

13 W からエッジ $O_i \circ-\circ O_j$ を削除する。

14 $\text{Sep}(O_i, O_j) = \text{Sep}(O_j, O_i) = W$ とする。

15 **エンド**

16 G^\wedge において O_i と O_j が隣接しなくなるまで、またはすべて

$W \subseteq \text{Adj}(O_i) \setminus \text{Adj}(O_j)$ with $|W| = l$ が検討されました;

17 隣接する頂点の順序付きペア (O_i, O_j) がすべて
揃うまで。

$|\text{Adj}(O_i) \setminus \text{Adj}(O_j)| \geq l$

を検討しました;

と

18 の隣接する頂点 (O_i, O_j) のすべてのペアが \wedge おうじる
揃うまで。

$|Adj(O_i) \setminus O_j| \leq l$;

19 遮蔽されていないすべての三重項 $\{O_k, -, O_m\}$ のリスト M を形成す
る (すなわち、中間の
頂点は不特定多数とする) を G で $k < m$ とする。

アルゴリズム3: PCのスケルトン発見手順

12.2. FCIアルゴリズム

FCIアルゴリズムは次の問題を考える： $\mathbf{X}=\mathbf{O}\cup\mathbf{L}\cup\mathbf{S}$ の分布が未知のDAGに対してd分離忠実であると仮定する。次に、任意の $\mathbf{W}\subseteq\mathbf{O}\setminus\{O_i, O_j\}$ と \mathbf{S} を与えられた変数 O_i と O_j の任意のペア間の条件付き独立性に関するオラクル情報が与えられ、基礎となるDAGに関するできるだけ多くの情報を再構成する (Spirtes et al., 2000)。FCIアルゴリズムは、最終的にMAGをそのマルコフ同値クラスまで再構築すること、つまり、 \mathbf{S} を与えられた \mathbf{O} の変数間の条件付き依存関係や独立関係が同じMAGの集合まで再構築することでこの目的を達成する (Zhang, 2008)。

FCIアルゴリズムは、MAGのマルコフ同値クラスを、完成された部分最大祖先グラフ (CPMAG) を用いて表現する。³部分最大祖先グラフ (PMAG) は、おそらくいくつかの円の端点を持つMAGに過ぎない。(1)すべての尾と矢尻は、MAGのマルコフ同値クラスに属するすべてのMAGにも存在し、(2)すべての円の端点に対して、マルコフ同値クラスに尾と矢尻を持つMAGが存在する。また、CPMAGの各辺は、以下のような解釈を持つ：

- (i) O_i と O_j の間に、 $O_i \perp\!\!\!\perp O_j \mid \mathbf{W} \sqcup \mathbf{S}$ が存在するような $\mathbf{W} \sqcup \mathbf{O} \not\supseteq \{O_i, O_j\}$ が存在する場合に限り、エッジは存在しない。すなわち、 O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合に限り、エッジは存在しない。
- (ii) O_i と O_j 間のエッジが O_j に矢尻を持つ場合、 $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ です。

(iii) O_i と O_j 間のエッジが O_j でテールを持つ場合、 $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ となる。

FCIアルゴリズムは、スケルトン発見、 v 構造の配向、配向ルール適用を含む3段階の手順でCPMAGを学習する。スケルトン発見手順では、PCのスケルトン発見手順を実行し、アルゴリズム4を用いて v -structuresを配向させ、可能な d -分離セット (Definition

³CPMAGは、部分祖先グラフ (PAG) とも呼ばれる。しかし、ここではCPDAGという用語の使い方を模倣して、CPMAGという用語を使用することにする。

4) が構築される。そして、FCIは最終的なスケルトンに対して、アルゴリズム4を用いて再びv-構造の配向を行う。FCIの第3ステップでは、10個の配向ルールを繰り返し適用する (Zhang, 2008)。

データです: $G^{\wedge}, \text{Sep}, M$

リザルトです: G^{\wedge}

```

1 forall elements  $\{O_i, O_j, O_k\}$  in  $M$  do
2   if  $O_j \in \text{Sep}(O_i, O_k)$  then.
3     Orient  $O_i \square \rightarrow O_j \leftarrow O_k$  as  $O_i \rightarrow O_j \leftarrow O_k$  in  $G$ 
4   エンド
5 エンド

```

アルゴリズム4: v-structの方向づけ

12.3. RFCI アルゴリズム

誘導経路の発見には大きなd分離可能集合が必要となるため、FCIアルゴリズムでは完了までに時間がかかりすぎることが多い。RFCIアルゴリズム (Colombo et al., 2012) は、エッジの有無が以下のように修正された解釈を持つグラフを回復することでこの問題を解決している:

(i) 2つの頂点 O_i と O_j の間にエッジが存在しないことは、 $O_i \perp O_j \mid W \cup S$ となるような $W \subseteq O \setminus \{O_i, O_j\}$ が存在することを意味する。

(ii) 2つの頂点 O_i と O_j の間にエッジが存在することは、 $O_i \perp O_j \mid W \cup S$ for all $W \subseteq \text{Adj}(O_i) \setminus O_j$ and for all $W \subseteq \text{Adj}(O_j) \setminus O_i$ を暗示する

。ここで、 $\text{Adj}(O_i)$ は、RFCIのグラフにおいて O_i に隣接する頂点の集合を表す。

これらのエッジ解釈とFCIのCPMAGのエッジ解釈とを比較することをお勧めします。

RFCIアルゴリズムは、そのグラフ（CPMAGである必要はない）も3段階のプロセスで学習する。このアルゴリズムは、PCスケルトン発見手順（アルゴリズム3）を用いてスケルトン発見を実行する。次に、RFCIはアルゴリズム6を用いてv-structuresを配向させる。アルゴリズム6は、PCのスケルトン発見手順を実行しただけでは、隣接する2つの頂点間に誘導経路が存在しない可能性があるため、FCIで使用するアルゴリズム4よりも多くの手順を必要とすることに注意してください。そのため、RFCIは、非相関関係を推論するために、さらに条件付き依存関係をチェックする必要がある。RFCIは、最後にFCIの10個の配向規則を繰り返し適用する。

データです: G^\wedge , 9月

結果です: G^\wedge , Sep, M

```
1 forall vertices  $O_i$  in  $G^\wedge$  do
2   PD-SEPを計算する( $O_i$ )
3   forall vertices  $O_j \in \text{Adj}(O_i)$  do
4      $l = -1$  とする。
5     くり返す
6      $l = l + 1$  とする。
7     くり返す
8     を持つ (新しい) 集合  $W \subseteq \text{PD-SEP}(O_i) \setminus O_j$  を選びます
9      $|W| = l$ 
10    if  $O_i \perp O_j \mid W \cup S$  then
11       $\text{Sep}(O_i, O_j) = \text{Sep}(O_j, O_i) = W$  とする。
12    エンド
13     $G^\wedge$  において  $O_i$  と  $O_j$  が隣接しなくなるまで、またはすべて
14     $W \subseteq \text{PD-SEP}(O_i) \setminus O_j$  が検討されました;
15    G で  $O_i$  と  $O_j$  が隣接しなくなるまで、または
16     $|\text{PD-SEP}(O_i) \setminus O_j| < l$ ;
17  エンド
18  端
```

17 G のすべての辺を $\circ-\circ$ として方向転換する。

18 G において、 $k < m$ であるすべての非遮蔽三重項 $\{O_k, -, O_m\}$ のリスト M を形成する。

アルゴリズム5: FCIアルゴリズムにおける最終スケルトンの取得

第4の方向性ルールの修正（詳細は(Colombo et al., 2012)を参照）。

12.4. CCD アルゴリズム

CCD アルゴリズムは以下の問題を考える： P が未知の環状有向グラフ G に対して d -separation faithful であると仮定する。そして、 P における任意の $W \subseteq X$ $\{X_i, X_j\}$ の変数 X_i と X_j のペアの間の条件付き独立性についてのオラクル情報を与え、その下にある有向グラフの部分指向 MAG（定義はセクション6参照）を出力せよ（Richardson、1996、Richardson and Spirtes、1999）。CCD は潜在変数や選択変数を考慮しないことに注意。

CCD アルゴリズムには6つのステップがある。最初のステップは、スケルトン発見に相当し、PC の手順と類似している（アルゴリズム3）。また、CCD は PC と同様に v -structure を配向させる。しかし、このアルゴリズムでは、第3段階で特定の長距離 d -separation 関係をチェックし、さらに非遺伝子関係を推測する。第4ステップでは、追加の非最小 d -分離集合を発見することで、CCI のステップ4と同様に（しかし正確には）進行する。最後に、CCD の第5ステップと第6ステップでは、前述の非最小 d -分離集合を利用して、追加の端点を配向させる。なお、CCD は配向規則を適用しない。

13. 付録証明

以降の議論では、常に頂点 $X = O \cup L \cup S$ 、 O 、 L 、 S は不連続集合である有向グラフ（環状または非環状）を考えることにする。

13.1. ユーティリティ・レンマ

Lemma 14. (Colombo et al., 2011 の Lemma 2.5) X_i と X_j が $W \subseteq X \setminus \{X_i, X_j\}$ になく、 X に X_i から X_j までの異なる頂点の列 σ があり、次のような経路の集合 T が存在すると仮定する:

1. σ において隣接する頂点 X_v と X_w の各対に対して、 W が与えられたときに X_v と X_w を d -connect するユニークなパスが T 内に存在する;
2. σ の頂点 X_q が W にある場合、 X_q を終点として含む T のパスは、 X_q で衝突する;
3. σ にこの順で出現する3つの頂点 X_v 、 X_w 、 X_q について、 T における X_v と X_w 、 X_w と X_q の間の d -connecting path が X_w で衝突する場合、 X_w は W において子孫を持つ。

データです：初期スケルトン \hat{G} 、Sep、M
 結果です： \hat{G} , Sep

1 Lを空リストとする

2 Mが空でない間do

3 Mから非遮蔽三重奏 $\square O_i, O_j, O_k \square$ を選択する。

4 $O_i \perp O_j \mid \text{Sep}(O_i, O_k) \cup \mathbf{S}$ and $O_j \perp O_k \mid \text{Sep}(O_i, O_k) \cup \mathbf{S}$ ならば。

5 | Lに $\square O_i, O_j, O_k \square$ を追加する。

6 エンド

7 さもないと

8 for $r \in \{i, k\}$ を行う。

9 if $O_r \perp O_j \mid (\text{Sep}(O_i, O_k) \setminus O_j) \cup \mathbf{S}$ then

10 | Oの最小分離集合 $\mathbf{W} \subseteq \text{Sep}(O_i, O_k)$ を求めよ。 $_r$

と O_j

11 | $\text{Sep}(O_r, O_j) = \text{Sep}(O_j, O_r) = \mathbf{W}$ とする。

12 | 三角形を形成するすべてのトリプル $\square O_{\min(r,j)}, -, O_{\max(r,j)}$

\square を追加する。

を \hat{G} にM

13 M と L から、 (O_r, O_j) を含むすべてのトリプルを削除
 する：

$\square O_r, O_j, -\square, \square O_j, O_r, -\square, \square, O_j, O_r \square$ と $\square, O_r, O \square_j$

14 $\textcircled{\omega}$ エッジ $O_r ** O_j$ を削除する。

15 エンド

16 エンド

17 **エンド**

18 M から $\square O_i, O_j, O_k \square$ を削除する。

19 **端**

20 **forall** *elements* $\square O_i, O_j, O_k \}$ *of* L **do**

21 $O_j \notin \text{Sep}(O_i, O_k)$ かつ $O_i \ast \ast O_j$ および $O_j \ast \ast O_k$ の両方が存在する
場合。

 であれば、 G

22 Orient $O_i \square \circ \circ O_j \circ \ast O_k$ として $O_i \ast \rightarrow O_j \overset{\wedge}{\leftarrow} \ast O_k$ in G

23 **エンド**

24 **エンド**

アルゴリズム6: RFCIアルゴリズムにおけるv-structの方向付け

すると、 W を与えられた X_i と X_j をd-connectするパス $\Pi_{X_i X_j}$ が G 内に存在する。また、 X_i を含む Γ のすべてのパスのエッジが X_i に入る（入らない）場合、 $\Pi_{X_i X_j}$ は X_i に入る（入らない）、 X_j も同様である。

Lemma 15. 頂点 O_i 、 O_j 、および $O_i, O_j \in R$ のような頂点集合 R を持つ有向グラフを考えよう。

$\{R \sqsubseteq W$ と、 $R \subseteq V$ が O_i と O_j をd-connectするすべての適切な部分集合 $V \subseteq W$ が、 $V \cup S$ を与えられたとき、 O_i と O_j が $O_k \in W$ となる $W \cup S$ を与えられたとき、 O_k は $\{O_i, O_j\} \cup R \sqsubseteq S$ の先祖である。

証明する。 この主張を逆接で証明する。すなわち、次の文を証明する： 集合 $W \setminus \{O_i, O_j\}$ があり、 $R \subseteq V$ が O_i と O_j をd-connectするあらゆる適切な部分集合 $V \subseteq W$ が $V \cup S$ を与えられたとする。 O_k が $\{O_i, O_j\} \cup R \cup S$ の祖先でない場合、 O_i と O_j は、 $O_k \in W$ が与えられた $W \cup S$ でd-connectedになる。

$W^* = \text{Anc}(\{O_i, O_j\} \cup R \cup S) \cap W$ とする。 W_k^* は W の適切な部分集合であることに注意。 W^* は W の部分集合であるため、 O_i と O_j は仮定により $W^* \cup S$ がパス Π によって与えられるとd-connectedである必要があります。d-連結パスの定義により、 Π のすべての要素は O_i 、 O_j 、 R 、 S 、 W^* の祖先（または何らかの結合）でなければならないことがわかる。さらに、 $W^* = \text{Anc}(\{O_i, O_j\} \cup R \cup S) \cap W$ なので、 W^* のすべての要素は $\{O_i, O_j\} \cup R \cup S$ の祖先である。

*は、パス Π 上の $\{O_i, O_j\} \cup R \cup S$ の祖先である。

Π が O_i と O_j を $W \cup S$ でd-connectできない方法は、 $W \setminus W^*$ のある要素が Π 上に位置する場合である。しかし、 O_k も、 $W \not\subseteq W^*$ のどの要素も $\{O_i, O_j\} \cup R \cup S$ の祖先ではないので、 $W \not\subseteq W^*$ の頂点は Π 上にないことになる。 $W \cup S$ が与えられたとき、 O_i と O_j はd-connectedであると結論づけられる。

13.2. ステップ1: スケルトン発見

レンマ1. O_i と O_j の間に誘導経路が存在するのは、 O_i と O_j が、 $W \subseteq O$ $\{O_i, O_j\}$ のすべての可能な部分集合に対して $W \sqsubseteq S$ が与えられたときに、*d-connected* である場合のみである。

証明する。 まず、順方向について証明する。 任意の集合 $W \subseteq O$ を考える。

$\{O_i, O_j\}$ とする。 O_i と O_j の間に誘導経路 Π が存在するとする。 2つの状況がある：

1. Π 上に、有向パス $C_1 \sim O_i$ を介して O_i の祖先であるが、 $W \cup S$ の祖先ではないコライダー C_1 が存在する。より具体的に C_1 とする。
。

は、 O_j に最も近い Π 上のそのようなコライダーである。ここで、次の2つの条件のいずれかが成立する：

(a) また、有向パス $C_2 \sim O_j$ を介して O_j の祖先であるが、**WuS** の祖先ではない、 Π 上のコライダー C_2 が存在する。より具体的には、 Π 上の C_1 に最も近いコライダーを C_2 とする（もし、2つのコライダーが C_1 から等距離なら任意に1つを選ぶ）。 $\Pi_{C_1 C_2}$ は、 C_1 と C_2 の間の誘導パスの一部を示すとする。 $\Pi_{C_1 C_2}$ 上のすべての非コライダーは、 Π が誘導パスであるため、**L** のメンバーであることを想起する。さらに、 $\Pi_{C_1 C_2}$ 上のすべてのコライダーは、構成上、祖先 **WuS** である。そして、パス $T = \{O_i C_1, \Pi_{C_1 C_2}, C_2 \sim O_j\}$ は、 T でレンマ 14 を発動することにより d-connecting path となる。

(b) 有向パス $C_2 \sim O_j$ を介して O_j の祖先であり、**WuS** の祖先ではない Π 上のコライダー C_2 は存在しない。 Π 上のすべてのコライダーが $O_i \cup \text{WuS}$ の祖先であることがわかる。より詳細には、 $\Pi_{O_j C_1}$ 上のコライダーはすべて構築により **WuS** の祖先である。また、 Π は誘導パスであるため、 $\Pi_{O_j C_1}$ 上のすべての非コライダーは **L** のメンバーであることを思い出してください。 $T = \{\Pi_{O_j C_1}, C_1 \sim O_i\}$ が d-connecting path であることは、 T で Lemma 14 を呼び出すことによって結論づけられる。

2. 有向パス $C_1 \sim O_i$ を介して O_i の祖先であり、**WuS** の祖先でない Π 上のコライダー C_1 は存在しない。これは、 Π 上のすべての

コライダーが $O_j \cup W \cup S$ の祖先であることを意味する。 $\Pi_{O_{iC_3}}$ を O_i と C_3 の間の誘導パスの部分に対応させ、 C_3 を有向パス $C_3 \sim O_j$ を介して O_j の祖先であるが $W \cup S$ の祖先ではない、 O_i に最も近いコライダーに対応させる。そのようなコライダーに遭遇しない場合、 $C_3 = O_j$ とする。また、 Π は誘導パスであるため、 $\Pi_{O_{iC_3}}$ 上のすべての非結託者は L のメンバーであることを思い出してください。したがって、 $T = \{\Pi_{O_{iC_3}}, C_3 \sim O_j\}$ は、 T で Lemma 14 を呼び出すことにより、 d-connecting path である。

後方については、 O_i と O_j が、 $W \cup S$ が与えられたとき、 $W \subseteq \mathbf{O} \setminus \{O_i, O_j\}$ のすべての可能な部分集合について d-connecting であると仮定する。そして、 O_i と O_j は、 $((\text{Anc}(\{O_i, O_j\} \cup S) \cap \mathbf{O}) \cup S) \setminus \{O_i, O_j\}$ が与えられたときに d-connected である。後ろ向きは、 (Spirtes et al., 1999) の Lemma 8 を呼び出すことにより、環状有向グラフの場合でもその論法は変わらない。

O_i と O_j の間に誘導パスが存在しない場合、 O_i と O_j は $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ が与えられると d 分離する。同様に、 O_i と O_j は $D\text{-SEP}(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}$ が与えられると d 分離する。

証明する。矛盾によってこれを証明する。 $O_i \perp\!\!\!\perp_d O_j \mid D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ があるとする。 O_i と O_j の間に誘導パスが存在しない場合、レンマ1により $O_i \perp\!\!\!\perp_d O_j \mid \mathbf{W} \sqcup \mathbf{S}$ が存在するように $\mathbf{W} \subseteq \mathbf{O} \setminus \{O_i, O_j\}$ がある。 $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ を与えられた O_i と O_j を結ぶパス d に Π が対応するとする。

2つの条件があるんです：

1. Π 上の \mathbf{O} のすべての頂点が Π 上のコライダーであるとする。しかし、この場合、 Π は不活性であるため、 Π 上の非コライダーは \mathbf{S} には存在し得ない。したがって、 Π 上のすべての非コライダーは、より具体的には \mathbf{L} に存在しなければならない。ここで、 $O_i \perp\!\!\!\perp_d O_j \mid D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ と仮定したことを思い出し、 Π 上のすべてのコライダー（ \mathbf{O} 内のものを含む）は $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ の祖先でなければならない、したがって $\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S}$ の祖先でもある。以上のことから、 O_i と O_j の間に誘導経路が存在することになる。
2. Π 上の \mathbf{O} に、非結託者である頂点が少なくとも1つ存在するとする。 O_k は、 O_i に最も近い Π 上のそのような最初の頂点を示すとする。 Π 上のすべての頂点は、 d -connection の定義により $\{O_i, O_j\} \cup D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ の祖先であり、したがって $\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S}$ の祖

先であることに注意。これは、 O_k が $\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S}$ の祖先であることを意味しています。

$D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ が与えられると、 Π は O_i と O_j を d-connect しないという矛盾に到達するために、 $O_k \in D\text{-SEP}(O_i, O_j)$ を示す。サブパス $\Pi_{O_i O_k}$ を考える。ここで、 $\square C_1, \dots$ とする。 $C_m \square$ は、 $D\text{-SEP}(O_i, O_j)$ の祖先であるが \mathbf{S} ではない、 $\Pi_{O_i O_k}$ 上のコライダの空かもしれないシーケンスを示す。また、 C_n は、 $\square C_1, \dots$ の任意のコライダーを示すとしよう。、 $C_m \square$ の任意のコライダを表す。 $O_n \in D\text{-SEP}(O_i, O_j)$ を持つ有向パス $C_n \sim O_n$ が存在することをノータイムとする。

F_n は、 $C_n \sim O_n$ 上の最初の観測点を示すとする。 $C_n \sim O_n$ 上に他の観測点がない場合、 O_n となる可能性がある。

F_n と F_{n+1} の間に誘導パスが存在することを示す。 F_{n+1} は $C_{n+1} \sim O_{n+1}$ の最初の観測値に対応する。まず、 $C_n, C_{n+1} \notin \text{Anc}(\mathbf{S})$ なので、 $F_n, F_{n+1} \notin \text{Anc}(\mathbf{S})$ に注意。 $C_n \sim F_n, \Pi_{C_n C_{n+1}}$ and $C_{n+1} \sim F_{n+1}$ のパスを連結することによって構築されたパス Φ_n を考える。構築によって、唯一の観測可能性は

n は $\Pi_{C_{nCn+1}}$ 上に存在する。さらに、 $\Pi_{C_{nCn+1}}$ 上のすべての観測値は、 O_k が Π 上の非結合体である最初の観測値であるため、結託者である。これは、 $\Pi_{C_{nCn+1}}$ 上の潜伏変数または選択変数のみが非結合体になり得ることを意味する。しかし、 $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ を考えると、 Π は O_i と O_j をd-connectするので、選択変数も $\Pi_{C_{nCn+1}}$ 上の非結託者になることはない。 $\Pi_{C_{nCn+1}}$ では、潜伏変数だけが非結託者になれると結論づける。次に、 $\Pi_{C_{nCn+1}}$ 上のすべてのコライダーは、以下の構成により \mathbf{S} の祖先である。

$\square C_1, \dots, C_m \square$ である。 Φ_n 上の全てのコライダーは、以下の先祖であることを示した。

n このことは、 Φ_n が F_n と F_{n+1} の間の誘導経路であることを意味する。特に、構成上、 F_n と F_{n+1} に入るものである。

これから終点を結んでいきます。また、パス $\Pi_{O_i C_1}$ と $C_1 \sim F_1$ を連結して、 F_1 に入る O_i と F_1 間の誘導パス Φ_0 を形成することができる。同様に、パス $\Pi_{O_k C_m}$ と $C_m \sim F_m$ を連結して、 F_m に入る O_k と F_m 間の誘導パス Φ_m を形成できる。

我々は、頂点 $\square O_i \equiv F_0, F_1, \dots, F_m, F_{m+1} \equiv O_k \square$ 、ここで各頂点は $\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S}$ の祖先であり、任意の F_l は F_l への誘導経路によって F_{l-1} へ、 F_{l+1} へは次の経路によって接続されている。は、 F_l への誘導経路でもある。したがって、 $O_k \in D\text{-SEP}(O_i, O_j)$ となる。しかし、この

は、 O_k が Π 上のノンコライダーであるため、 $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ を与えられた Π が O_i と O_j をd-connectしないことを意味する；矛盾する。

O_i と O_j の間に誘導パスが存在しない場合、 $O_i \perp_d O_j | D\text{-SEP}(O_i, O_j) \cup \mathbf{S}$ となることを示した。今、 $O_i \perp_d O_j | D\text{-SEP}(O_i, O_j) \square \mathbf{S} \Rightarrow O_j \perp_d O_i$

$|D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}|$ は i と j が任意のインデックスなので、 j さらに、 $O_j \perp_d O_i | D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S} \Rightarrow O_i \perp_d O_j | D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}$ なぜなら、 $O_j \perp_d O_i | D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}$ の場合のみ d 分離の対称により $O_i \perp_d O_j | D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}$ の場合のみ。 O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合、 $O_i \perp_d O_j | D-SEP(O_j, O_i) \cup \mathbf{S}$ も存在すると結論づける。

□

レンマ 3. G の O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合、 O_i と O_j は、 $MAAG G^r$ の $\mathbf{W} \subseteq PD-SEP(O_i)$ で $\mathbf{W} \cup \mathbf{S}$ が与えられれば d 分離する。同様に、 O_i と O_j は、 $\mathbf{W} \cup \mathbf{S}$ で以下のように d 分離している。
 $\mathbf{W} \subseteq PD-SEP(O_j) \text{ in } G^r$.

証明する。 $D\text{-SEP}(O_i, O_j) \subseteq PD\text{-SEP}(O_i)$ が Lemma によって示されることを示せば十分である。

2. $D\text{-SEP}(O_j, O_i) \subseteq PD\text{-SEP}(O_j)$ についても同様に論証が成立することになる。 $O_k \in D\text{-SEP}(O_i, O_j)$ の場合、 O_i と O_k の間に、任意の2つの SEC-SEP の間に誘導経路が存在するような観測値 Π_{O_i, O_k} のシーケンスが存在する。

Π_{O_i, O_k} における実用的な観測値 $\square O_h, O_{h+1}$ 。したがって、パス Π も存在する。

G^r の O_i と O_k の間で、その頂点が Π_{O_i, O_k} の頂点にすべて、そして唯一関与する。また、連続する三重項 $\square O_{h-1}, O_h, O_{h+1}$ において、 O_{h-1} から O_h への誘導経路は O_h に、 O_{h+1} から O_h への誘導経路は O_h に入ることが分かっている。したがって、 O_h は G のコライダーとなる。

$O_{h-1}, O_h, O_{h+1} \square \text{ on } \Pi^r$ の任意のトリプレットは、 G^r の v-structure または三角形になります。

G^r 。2つの状況があります：

1. コライダー $O_h \notin \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \cup \mathbf{S})$ があるとする。すると、 O_{h-1} と O_h の間、そして O_h と O_{h+1} の間のパスは、誘導パスではない。したがって、 O_h は、以下のような非遮蔽三重に存在する。

$\square O_{h-1}, O_h, O_{h+1} \square \begin{matrix} O_i \\ O_k \end{matrix}$ 。 O_h が非遮蔽三重にある場合、 O_h on Π^r

というのも、 $O_h \notin \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \square)$ は、v-structure に存在するからです。

\mathbf{S} を想定しています。

2. $O_h \in \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \cup \mathbf{S})$ とする。そのとき、イン-が存在する。は、 O_{h-1} と O_{h+1} の間のパスを引き出しているので、 O_h は、 Π^r 上の三角形にある。

□

レマ 4. G の O_i と O_j の間に誘導経路が存在しない場合、 O_i と O_j は、 G^r の $W \square PD\text{-SEP}(O_i)$ を持つ $W \square \mathbf{S}$ が与えられると d 分離する。

同様に、 O_i と O_j は $W \subseteq S$ を持ついくつかの $W \sqcup S$ が与えられると d 分離する。

G^r の $\text{PD-SEP}(O) \circ_j$

証明する。レンマ3を考慮すると、MAAG G^r を使って形成された $\text{PD-SEP}(O_i)$ が、 G^r を使って形成された $\text{PD-SEP}(O_i)$ の部分集合であることを示せば十分である。 G^r のすべての辺は G^r にもあることを思い出してほしい。したがって、 G^r のすべての三角形は G^r にも三角形がある。

ここで、 G^r のすべての v -structures が G^r の v -structures でもあるか、 G^r の三角形であることを示す必要がある。 (O_{h-1}, O_h, O_{h+1}) は G^r の任意の v -structure を表すとしよう。 O_{h-1} と O_h の間の辺、および O_h と O_{h+1} の間の辺は、 G^r になければならない。なぜなら、 G^r のすべての辺は、 G^r にもあるからである。

の2件です：

1. G^r において、 O_{h-1} と O_{h+1} の間にエッジが存在する。そして、トリプル (O_{h-1}, O_h, O_{h+1}) は G^r において三角形を形成する。

2. G^r の O_{h-1} と O_{h+1} の間にはエッジは存在しない。

$\square O_{h-1}, O_h, O_{h+1} \square$ は G^r の v 構造なので、 $O_h \notin \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \cup S)$.
 なお、PCのスケルトン発見手順は最小分離集合しか発見しない
 ので、 $O_{h-1} \perp_d O_{h+1} \mid W \cup S$ で $W \subseteq O \setminus \{O_{h-1}, O_{h+1}\}$ と $O_h \in W$ が
 あれば、 $O_h \in \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \cup S)$ は
 を $R = \emptyset$ とする Lemma 15により、 $O_h \notin \text{Anc}(\{O_{h-1}, O_{h+1}\} \cup S)$ と
 いう事実に矛盾する。したがって、 $O_h \notin W$ なので、 $\square O_{h-1}, O_h,$
 $O_{h+1} \square$ も G^r の v 構造となる。

□

13.3. ステップ3 & 4: 短距離・長距離の非先祖関係

Lemma 16. O_i が $O_j \cup S$ の祖先であり、 O_j とある頂点 O_k が $W \subseteq O \setminus \{O_j, O_k\}$ で $W \cup S$ が与えられたとき d -分離し、 O_i と O_j が $W \cup S$ で d -連結し、 $O_i \notin W$ とすると、 O_i と O_k は $W \cup S$ で d -分離している。

証明する。 矛盾のために、 O_i と O_k が d -connected であるとする。

$W \cup S$ は2つのケースがあります。

最初のケースでは、 O_i が $W \cup S$ に子孫を持つものとする。
 しかし、 $O_i \notin W \cup S$ があるので、 O_j と O_i の間の d 接続パス $\Pi_{O_j O_i}$ と O_i と O_k の間の d 接続パス $\Pi_{O_i O_k}$ を、 $T = \{\Pi_{O_j O_i} \mid \Pi_{O_i O_k}\}$ Lemma 14 を呼び出してマージすることができます、 $\Pi_{O_j O_k}$ を用いて、 $W \cup S$ が与えられた O_j と O_k の間に d -連結経路を形成するためである。矛盾に到達している。

2番目の場合、 O_i が $W \cup S$ に子孫を持たないとする。また、 O_i は仮定により $O_j \cup S$ の祖先であることを想起してほしい。これら二つの事実は、 $W \cup S$ を含まない有向パス $O_i \sim O_j$ が存在することを意味

する。したがって、 $O_i \sim O_j$ は d-connecting となる。 $W \sqcup S$ が与えられた O_j と O_k の間に d-connecting path を形成するために、 $T = \{O_j, O_i, \Pi_{O_i O_k}\}$ で再び Lemma 14 を呼び出すことができる。したがって、別の矛盾にたどり着いた。

あらゆる可能性を追求した結果、 O_i と結論づけました。

O_k は、 $W \cup S$ を考えると、実は d 分離している。 □

上記のレンマの逆接を次のように書くことができる：

コロラリ2。 $W \sqcup O \setminus \{O_j, O_k\}$ とする。 O_i と O_j が $W \cup S$ で d-連結、 O_k と O_i が $W \cup S$ で d-連結、 O_k と O_j が $W \cup S$ で d-分離、 $O_i \in W$ であれば、 O_i は $O_j \cup S$ の祖先ではない。

レマ5. 集合 $W \subseteq O$ $\{O_i, O_j\}$ を考える。ここで、 O_i と O_k が $W \cup S$ で d -connected、 O_j と O_k が $W \cup S$ で d -connected であるとする。 O_i と O_j が $O_k \notin W$ のように $W \cup S$ で d 分離している場合、 O_k は $\{O_i, O_j\} \cup S$ の先祖でないことがわかる。

証明する。 O_i と O_k が d -connected、 O_j と O_k が d -connected の状態で、 \square Corollary 2 を 2 回適用することで導かれる。

13.4. ステップ5: 非最小 D 分離集合を用いたオリエンテーション

レマ6です。頂点 $\square O_i, O_j, O_k, O_l \square$ の四重極を考える。があるとする:

1. O_i と O_k は非隣接です。
2. $O_i \rightarrow O_l \leftarrow O_k$.
3. O_i と O_k は、 $O_j \in W$ と $W \subseteq$ を有するある $W \subseteq S$ が与えられると d 分断される。
 $O \vdash \{O_i, O_k\}$;
4. $O_j \square - O_l$.

$O_l \in W = \text{Sep}(O_i, O_k)$ とすると、 $O_j \rightarrow O_l$ 。 $O_i \rightarrow O_j \leftarrow O_k$ とすると。

$O_l \in W = \text{SupSep}(O_i, O_j, O_k)$ とすると、 $O_j \square - O_l$ がある。

証明する。最初の結論を逆接で証明する。 $O_j \square - O_l$ があると仮定する。ここで、矛盾のために、 $O_l \notin W$ (ただし、 $O_j \in W$) と仮定する。 $O_j \cup S$ は、 $O_l \in \text{Anc}(O_j \cup S)$ なので、 O_l の子孫を少なくとも1つ含むこ

とに注意する。レンマ14により、**WUS**を与えられた O_i と O_l 間のd-connecting pathと、**WUS**を与えられた O_k と O_l 間のd-connecting pathを用いて、 O_l で衝突するかどうかにかかわらず、**WUS**を与えられた O_i と O_k 間の d-connecting pathを形成することができる。このことは、**WUS**が与えられたときに O_i と O_k がd個に分離しているという事実と矛盾する。

第二の結論として、 $O_l \in \mathbf{W}$ があるとする。 ik このとき、 $\mathbf{R} = O_j \cup \text{Sep}(O_i, O_k)$ のレンマ15から、 O_l は $\{O_i, O_j, O_k\} \sqcup \text{Sep}(O_i, O_k) \cup \mathbf{S}$ の祖先であることがわかっています。

$\mathbf{R} = \emptyset$ とすることで $\{O_i, O_k\} \cup \mathbf{S}$ となる。したがって、 O_l は、より具体的には、以下の祖先である。

$\{O_i, O_j, O_k\} \cup \mathbf{S}$. さて、 $O_i * \rightarrow O_l \leftarrow \square O_k$ があるので、 $O_l \in \text{Anc}(O_j) \sqcup$ があることも主張できる。したがって、 $O_j \sqcup -O$ がある。 l

13.5. ステップ6: 遠距離祖先関係

レマ7. $W \sqsubseteq S$ が与えられたとき、 O_i と O_k が d 分離している場合、
 $W \subseteq O \oplus \text{Sm_2296} \leftarrow \text{Sm_2296} \leftarrow \text{Sm_2296} \leftarrow \text{Sm_2296} \leftarrow S$
 $\{O_i, O_k\}$ 、 $Q \subseteq \text{Anc}(\{O_i, O_k\} \cup W \cup S) \setminus \{O_i, O_k\}$ 、 O_i と O_k も $Q \cup W \cup S$ があれば d 分離されることになる。

証明する。 逆接により証明する。ある $Q \cup W \cup S$ が与えられたとき、 O_i と O_k を d -connect するパス $\Pi_{O_i O_k}$ があるとする。すると $\Pi_{O_i O_k}$ 上のすべての頂点は、 d -connecting path の定義により $\{O_i, O_k\} \sqsubseteq Q \sqsubseteq W \sqsubseteq S$ の祖先となる。 $Q \sqsubseteq \text{Anc}(\{O_i, O_k\} \cup W \cup S) \setminus \{O_i, O_k\}$ なので、 $\Pi_{O_i O_k}$ 上のすべての頂点は、より具体的には $\{O_i, O_k\} \cup W \cup S$ の祖先である必要があります。

O_a は、 $O_i \cup S$ の祖先であり、 $W \cup S$ に存在しない $\Pi_{O_i O_k}$ 上の O_i から最も遠いコライダーを示すとする（そのようなコライダーが存在しない場合は O_i ）。同様に、 O_b は、 $O_k \cup S$ の祖先であり、 $W \cup S$ に存在しない $\Pi_{O_i O_k}$ 上の O_k の後の最初のコライダーを示す（そのようなコライダーが存在しない場合は O_k ）。 O_a から $O_i \sqsubseteq S$ への有向パス $\Pi_{O_a O_i}$ 、および O_b から $O_k \sqsubseteq S$ への有向パス $\Pi_{O_b O_k}$ は、パス $\Pi_{O_a O_i}$ または $\Pi_{O_b O_k}$ 上の頂点が $W \sqsubseteq S$ にないため、 $W \cup S$ が与えられると d -connecting です。また、 $\Pi_{O_i O_k}$ 上の O_a と O_b の間の $\Pi_{O_a O_b}$ サブパスは、すべてのコライダーが $W \cup S$ の祖先であり、すべての非コライダーが L にあるので、 $W \cup S$ が与えられると d -connecting となる。レマ14は、 $T = \{\Pi_{O_a O_i}, \Pi_{O_a O_b}, \Pi_{O_b O_k}\}$ を、 $W \cup S$ を与えられた O_i と O_k の間の d -connecting path を形成するように取ることができることを意味している。

13.6. ステップ7: オリエンテーションルール

レンマ 8. $W \setminus \{O_i, O_j\}$ が存在し、すべての適切な部分集合が $V \subset W$ は $V \cup S$ が与えられた O_i と O_j を d -connect している。 O_i と O_j が $O_k \in W$ が与えられた $W \cup S$ で d -separated であれば、 O_k は $\{O_i, O_j\} \cup S$ の祖先となる。

証明する。これは、 $R = \emptyset$ を用いた Lemma 15 の特殊なケースである。□

レンマ 10 $O_i \rightarrow O_j - O_k$ で O_i と O_k が非隣接であるとする、 $O_i \rightarrow O_j$ は O_i, O_j, O_l ($l \neq k$) で $O_j - O_l$ と $O_i \rightarrow O_l$ を含む三角形内に存在する。 さらに、 O_l と O_k の間には、 O_j を含まない無向きのエッジの並びが存在する。

証明する。 O_j または O_k (またはその両方) は S の祖先にはなれないことに注意。これは、 O_j の矢尻と矛盾するからだ。したがって、 O_j は O_k の祖先であり、 O_k は O_j の祖先だから、 O_j と O_k を含むサイクルが存在する。 O_j に矢尻があるので、 O_i と O_j の間には、 O_j から出るか O_j に入る誘導パス $\Pi_{O_i O_j}$ があるはずである：

1. $\Pi_{O_i O_j}$ が O_j の外にあるとする。 $\Pi_{O_i O_j}$ 上のすべての頂点は、誘導パスの定義により $\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S}$ の祖先となる。したがって、 $O_j \in \text{Anc}(\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S})$ となる。また、矢印 $O_i * \rightarrow O_j$ があるので、より具体的には $O_j \in \text{Anc}(O_j)$ という自明な関係もあることを思い出してください。 C_1 は、 $\Pi_{O_i O_j}$ 上の O_j に最も近いコライダを表すとします。このようなコライダが存在しなければ、 $O_j \in \text{Anc}(O_i)$ は矢文 $O_i * \rightarrow O_j$ に矛盾する。 $\Pi_{O_i O_j}$ は誘導パスなので、 $C_1 \in \text{Anc}(\{O_i, O_j\} \cup \mathbf{S})$ を持たなければならない。しかし、 C_1 は $O_i \cup \mathbf{S}$ の祖先にはなりえない。なぜなら、それは $O_j \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ を持つことを意味するからである。したがって、より具体的には、 $C_1 \in \text{Anc}(O_j)$ となる。 $C_1 \sim O_j$ は O_j への有向パスを表すとする。

(a) $C_1 \sim O_j$ は、 O_j 以外の \mathbf{O} のメンバーを含む。 C_1 に最も近い \mathbf{O} のメンバーを O_l とする($C_1 = O_l$ とすることもできることに注意)。そして、 $\Pi_{O_i C_1}$ 、 O_i と C_1 の間の $\Pi_{O_i O_j}$ の部分、および $C_1 \sim O_l$ を合わせて、 O_i と O_l の間の誘導パスを形成する($C_1 \sim O_l$ 上のすべての非コライダは構築により \mathbf{L} にある)。さらに、 $O_l \in \text{Anc}(O_i \cup \mathbf{S})$ が成り立つので、 $O_i * \rightarrow O_l$ を持たなければならない。また、 O_j と O_l の間に誘導経路 $\Pi_{O_j O_l}$ が存在するが、これは $\Pi_{O_j O_l}$ 上のすべての非結合員が \mathbf{L} にあるからである。さらに具体的には、 $O_j \in \text{Anc}(O_l)$ と $O_l \in \text{Anc}(O_j)$ が構成上存在するので、 $O_j - O_l$ が必要。最後に、 O_l と O_k の間の $C_1 \sim O_j$ 上の \mathbf{O} のメンバーはすべて O_k の祖先であり、 O_k はそれらの祖

先であるので、 O_k への無向辺の列が存在する。

- (b) $C_1 \sim O_j$ は、 O_j 以外の **Oのメンバー** を含まない。しかし、 $C_1 \sim O_j$ 上のすべての非結合員は **L** に含まれなければならないので、 $\Pi_{O_i C_1}$ と $C_1 \sim O_j$ は誘導パスを形成する。したがって、 O_i と O_j 間に O_j への誘導パスが存在する。論議の続きについては以下を参照。

2. O_j また、 O_j と O_k の間に誘導パスが存在することも分かっている。さらに、最初の段落によって、 O_k から O_j への有向パスが存在する。したがって、ある変数 O_l (O_l は O_j と O_k を含むサイクルの中にあり、 $l = k$ かもしれない) と O_j に入る O_j の間に誘導パス $\Pi_{O_j O_l O_i}$ が存在する。しかし、 $\Pi_{O_i O_j}$ と $\Pi_{O_j O_k}$ は、 O_i と O_k (コライダー O_j は O_k の祖先) の間の誘導パスを形成するので、これは O_i と O_k が MAG で隣接していることを意味することになる。したがって、誘導経路は

j_l この誘導経路を $\Pi_{O_j O_l}$ と呼ぶ。 O_j が O_l の祖先であるため、パス $\{\Pi_{O_i O_j}, \Pi_{O_j O_l}\}$ は O_i と O_l 間の誘導パスであることに注意。したがって、 $O_i * \rightarrow O_j$ は O_i, O_j および O_l を含む三角形の中にある。

最後に、 O_l は O_j と O_k を含むサイクルのメンバーであることを思い出してください。したがって、 O_l は O_j の祖先であり、 O_j は O_l の祖先です。さて、 O_l も **S** の祖先ではありません。そうしないと O_j と O_k も **S** の祖先であることになってしまいます。次に、矛盾のために、 O_l が O_i の祖先であると仮定する。すると、 O_j は O_i の祖先でなければならず、矢文 $O_i * \rightarrow O_j$ に矛盾する。

□

13.7. 主な結果

定理2. (健全性) *d-separation faithfulness* が成立する場合、CCIはGの部分配向性MAAGを出力する。

証明する。 d-分離の忠実性の下では、 O_i と O_j は、 $W \subseteq \mathbf{O} \setminus \{O_i, O_j\}$ が与えられたとき、 $O_i \perp O_j \mid \{W \cup S\}$ の場合にのみd-分離する。したがって、d-separationと条件付き独立、およびd-connectionと条件付き依存という用語を互換的に使用することができる。

Lemma 1は、 O_i と O_j が、 **S** と同様に $\mathbf{O} \setminus \{O_i, O_j\}$ のすべての可能な部分集合を与えられたときに条件付きで独立である場合にのみ、誘導パスが最大祖形グラフに存在することを意味している。Lemma 2と3は、PD-SEP (O_i) とPD-SEP (O_j) の部分集合を使って誘導パス

を発見できることを意味している。したがって、CCIのステップ1は健全である。

ステップ2とステップ3はレマ5を援用することで正当化できる。ステップ5の正しさは、レマ6によって、ステップ6はレマ7の逆接によって導かれる。最後に、オリエンテーションルールの正しさは、オリエンテーションルール1-3、4-5、6-7について、それぞれ、レマ11、12、13を呼び出すことで得られる。□