NOTEARS 在因果结构学习中诱导的专家知识评估

Jawad Chowdhury、Rezaur Rashid 和 Gabriel Terejanu美国北卡罗来
纳大学夏洛特分校计算机科学系，美国北卡罗来纳州夏洛特，邮编 *NC*
mchowdh5@uncc.edu、*mrashid1@uncc.edu*、*gabriel.terejanu@uncc.edu*

arXiv:2301.01817v1 [cs.LG] 4 Jan 2023

关键词: 因果关系、结构化预测与学习、监督式深度学习、神经网络优化 s.

摘要: 因果建模为我们提供了强大的反事实推理能力和干预机制，使我们能够在各种假设情境下进行预测和推理。然而，由于未观测混杂因素、有限采样以及数据分布的变化，利用观测数据进行因果发现仍是一项艰巨任务。这些因素可能导致虚假的因果关系。为应对实践中的这些挑战，研究人员会利用已知的因果关系来增强因果学习。本文旨在研究以额外约束的形式将专家知识纳入非参数 NOTEARS 的建模中，对因果关系产生的影响。我们对使用不同类型知识对模型施加偏置的方式进行了全面的比较分析。我们发现：(i) 能纠正 NOTEARS 模型错误的知识可以带来具有统计显著性的改进；(ii) 对活跃边施加约束对因果发现的积极影响大于对非活跃边施加约束；令人惊讶的是，(iii) 平均而言，诱导知识纠正错误活跃边和/或非活跃边的数量并不比预期值更多。我们还展示了模型的行为，以及领域知识在真实世界数据集上的有效性。

1 引言

机器学习模型在提高预测准确率方面不断打破纪录。然而，分布外（OOD）泛化仍然是一项挑战。一种解决方案是采用因果结构（Lake 等，2017）来约束模型并消除伪相关。有关所关注问题的底层因果知识，能够显著增强领域适应性和 OOD 泛化能力（Magliacane 等，2017）。此外，因果模型超越了基于相关性的模型所具备的预测能力。它们为我们提供了强大的反事实推理能力和干预机制，使我们能够针对各种假设情境进行推理（Pearl，2009年）。

观测性因果发现中最具代表性的两类方法是基于约束的方法和基于评分的方法（Spirtes 等人，2000；Pearl 和 Verma，1995；Colombo 等人，2012；Chickering，2002；Ramsey 等人，2017）。尽管在底层假设成立时，这些方法相当稳健，但由于有向无环图约束具有组合性质，它们的计算开销很大，且计算复杂度会随着系统变量数量的增加而上升。NOTEARS（Zheng 等人，2018年）通过对无环性进行代数刻画来解决这一问题，将组合问题转化为连续约束优化问题。人们提出了多种方法（Yu 等人，2019；Lachapelle 等人，2019；Ng 等人，2019；Zheng 等人，2020），作为这种线性连续优化的非线性或非参数扩展，从而能够灵活地建模不同的因果机制。

仅基于观察数据学习因果结构并非易事，因为这受到诸多因素的限制，例如有限采样、未观测到的混杂因素、选择偏差和测量误差（Cooper，1995；Elkan，2001；Zadrozny，2004）。这些因素可能导致虚假的因果关系。为在实践中缓解这些挑战，研究人员会在因果学习中加入先验因果关系，CausalNex[1]，causal-learn[2]，bnlearn（Scutari，2009）、gCastle（Zhang 等人，2021）和 Do Why（Sharma 和 Kiciman，2020）等软件包便采用了这种做法。Heindorf 等人（Heindorf 等人，2020）尝试构建首个可纳入现有知识库的大规模开放领域因果图。

[1]https://github.com/quantumblacklabs/causalnex[2] https://https://github.com/cmu-phil/causal-learn

这项工作进一步分析并展示了大规模因果图在因果推理中的益处。给定一个表示因果结构定性知识的部分祖先图（PAG），Jaber 等人（Jaber 等人，2018）在其研究中根据观察数据计算干预分布。将专家知识与结构学习相结合，能够进一步约束搜索空间，减少虚假机制的数量（Wei 等人，2020）；研究人员也经常将这些背景知识用作额外约束，以实现知识增强的事件因果识别（Liu 等人，2021）。O'Donnell 等人（O' Donnell 等人，2006）在贝叶斯网络（BN）学习中将专家知识用作先验概率；Gencoglu 和 Gruber（Gencoglu 和 Gruber，2020）则使用线性 NOTEARS 模型纳入知识，以检测 COVID-19 疫情的不同特征之间的因果关系。不同专家的因果判断可以汇总为集体判断（Bradley 等人，2014）；Alrajeh 等人（Alrajeh 等人，2020）则研究了如何结合这些判断来确定有效的干预措施。Andrews 等人（Andrews 等人，2020）提出了一个颇有意思的探索，定义了分层背景知识，并证明在这种背景知识下，FCI 算法（Spirtes 等人，2000）是可靠且完备的。

然而，如何有效地纳入诱导知识并评估其影响，仍有待探索；我们认为，了解这一点有助于缓解观察性因果发现面临的一些挑战。人类专业知识在评估因果结构学习中学得的模型时可以发挥重要作用（Bhattacharjya 等人，2021年；Li 等人，2021年）。在实践中，人工评估和验证过程往往以迭代或顺序的方式进行（Holzinger，2016年；Xin 等人，2018年；Yang 等人，2019年）。在结构学习中，对于规模足够大的因果网络，这种方式更为现实：人们可以在学习过程中依次进行学习、验证，并诱导新形成的知识集，形成反馈循环。本文的目标并非创建新的因果发现算法，而是研究领域专家提供的先验因果知识（以模型约束的形式呈现）与最先进的因果结构学习算法之间的这种迭代交互。Wei 等人（Wei 等人，2020年）率先通过加入额外的优化约束来扩展 NOTEARS，以满足 Karush-Kuhn-Tucker（KKT）最优性条件；Fang 等人（Fang 等人，2020年）则在其工作中利用了因果有向无环图背景下的低秩假设通过增强版 NOTEARS 进行学习，取得了显著改进。然而，他们都没有研究通过加入优化约束来扩展 NOTEARS 后，诱导知识对因果结构学习的影响。为求完整，我们在第 3 节中给出了非参数 NOTEARS （ Zheng 等人，2020 年）的形式化表述，并使其能够以已知直接因果关系和非因果关系的形式纳入因果知识。尽管如此，本文旨在研究专家因果知识对因果结构学习的影响。

主要贡献总结如下。(1) 我们展示了一种用于学习因果关系的迭代建模框架，该框架将因果知识作为约束施加于因果图，并进一步评估模型的行为和性能。(2) 我们通过实证评估表明：(a) 能够纠正模型错误的知识可带来统计学上显著的改进；(b) 对活跃边施加约束对因果发现的正面影响大于对非活跃边施加约束；(c) 平均而言，诱导知识纠正的错误活跃边和／或非活跃边数量并不比预期值更多。最后，我们展示了在真实世界数据集中，额外知识对因果发现的影响。

本文结构如下：第 2 节介绍因果图模型（CGM）、基于评分的结构恢复方法，以及一项研究：该研究将基于评分的方法表述为连续优化，并介绍其近期的非参数扩展。第 3 节介绍我们对非参数连续优化方法所作的扩展，以便在结构学习中纳入因果知识，并详细阐述所提出的知识诱导过程。第 4 节展示实证评估，并比较分析专家知识对模型性能的影响。最后，第 5 节总结研究发现，并简要讨论未来工作。

2 背景

本节回顾因果结构学习的基本概念，并简要介绍一种近期基于评分的连续因果发现方法，该方法使用结构方程模型（SEMs）。

2.1 因果图模型（因果图模型）

有向无环图（DAG）是指不含任何有向循环路径的有向图（Spirtes 等人，2000）。因果图模型 CGM(P_X，$\mathcal{G}$)可定义为由图$\mathcal{G}$ 和一组观测

分布 P_X 构成的二元组，该分布定义在一组随机变量 $X = (X1, \ldots, X_d)$上。相对于 G，分布 P_X是马尔可夫的，其中 $G = (V, E)$是一个有向无环图，用于编码随机变量 $X_i \in X$之间的因果结构（Peters 等人，2017）。节点 $i \in V$对应随机变量 $X_i \in X$，边 $(i, j) \in E$对应 G 所编码的因果关系。在因果图模型中，联合分布 P_x 可分解为 $p(x) = \prod_{i=1}^{d} p(x_i|xGpai)$，其中 XGpai表示有向无环图 G 中变量 X_i 的父节点（直接原因）集合；对于每个 $X_j \in XGpai$，都存在一条边 $(X_j \to X_i) \in E$（Peters 等人，2017）。

2.2 基于评分的结构恢复

在结构恢复方法中，给定数据矩阵 n 个独立同分布观测值 $\mathbf{X} = [\mathbf{x_1}|\ldots|\mathbf{x_d}] \in \mathbb{R}^{n\times d}$，我们的目标是学习由有向无环图 $\mathcal{G}$ 编码的潜在因果关系。观察性因果发现的大多数方法采用基于约束或基于评分的策略。基于评分的方法通常致力于在有向无环图的离散空间 $\mathbb{D}$ 中，根据某种评分准则 $S(\mathcal{G}, X)$，找出最符合观测数据集 $\mathbf{X}$ 的有向无环图模型 $\mathcal{G} \in \mathbb{D}$（Chickering，2002）。在这种情况下，结构恢复的优化问题可定义如下：

$$\begin{aligned} \min_{\mathcal{G}} \quad & S(\mathcal{G}, X) \\ \text{subject to} \quad & \mathcal{G} \in \mathbb{D} \end{aligned} \tag{1}$$

式（1）的难点在于，优化中的无环性约束本质上是组合性的，其规模会随图中节点数 d 呈指数级增长。这使得该优化问题成为 NP 困难问题（Chickering，1996；Chickering 等人，2004年）。

2.3 NOTEARS：结构学习的连续优化

NOTEARS（Zheng 等人，2018）是一种基于评分的结构学习方法，该方法通过利用迹指数对公式 1 中无环约束的代数刻画，将组合优化问题重新表述为连续优化问题。该方法将定义在 d 个节点上的图 G 编码为加权邻接矩阵 $W = [w_1|\ldots|w_d] \in \mathbb{R}^{d\times d}$，其中如果存在一条有效边 $X_i \to X_j$，则 $w_{ij} \neq 0$；如果不存在，则 $w_{ij} = 0$。加权邻接矩阵 W 蕴含一个线性结构方程模型，其形式为 $X_i = f_i(X) + N_i = w_i^T X + N_i$；其中，$N_i$ 是相应的噪声。作者在加权矩阵上定义了一个光滑评分函数 $h(W) = tr(e^{W\circ W}) - d$

其中，$\circ$ 是 Hadamard积，而e^M 是 M 的矩阵指数。对图$\mathcal{G}$ 的这种嵌入以及对无环性的刻画，使公式 1 中的优化转化为其等价形式：

$$\begin{aligned} \min_{W\in\mathbb{R}^{d\times d}} \quad & L(W) \\ \text{subject to} \quad & h(W) = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$L(W)$ 是关于 W 的最小二乘损失，而 $h(W)$ 则定义了图的有向无环图性质。

2.4 NOTEARS 的非参数扩展

后续研究（Zheng 等人，2020）提出的连续优化的非参数扩展，使用偏导数来判断f_j 与随机变量之间的依赖关系。作者在由平方可积函数构成的Sobole夫空间上定义$f_j \in H^1(\mathbb{R}^d) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$，其中函数的导数也须平方可积。作者证明，当且仅当 $||\partial_i f_j||_{L^2} = 0$ 时，f_j 与随机变量X_i 相互独立，其中 ∂_i 表示关于第i 个变量的偏导数。由此重新定义加权邻接矩阵：$W(f) = W(f_1,\ldots,f_d) \in \mathbb{R}^{d\times d}$，其中每个$W_{ij}$表示$f_j$ 与变量X_i的偏依赖关系。因此，我们可以将式 2 等价地写为：

$$\begin{aligned} \min_{f: f_j\in H^1(\mathbb{R}^d), \forall j\in[d]} \quad & L(f) \\ \text{subject to} \quad & h(W(f)) = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

对于所有 $X_j \in X$。Zheng 等人（2020）提出的两个通用实例是：NOTEARS-MLP 和 NOTEARS-Sob。具有 h 个隐藏层和 σ: $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 激活函数的多层感知机可定义为 M(X; L) $= \sigma(L^{(h)}\sigma(\ldots\sigma(L^{(1)}X))$，其中 $L^{(l)}$ 表示与第 l 个隐藏层相关的参数。Zheng 等人（2020）指出，若 $L^{(1)}$j 的第 |i 列 $||_2 = 0$，则 M_i(X; L) 将与变量 X_i独立；该条件取代了式 3 中偏导数的关联，并将邻接矩阵重新定义为 W (θ)，其中 W (θ)$_{ij}$ ⫬| $L^{(1)}$j 的第 i 列 $||_2$，其中 $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_d)$；$\theta_k$ 表示 M_k(X; L)（第 k 个多层感知机）的参数集。借助神经网络和增广拉格朗日法（Bertsekas，1997），NOTEARS-MLP 按如下方式求解式 3 中的约束问题：

$$\begin{aligned} &\min_{\theta} F(\theta) + \lambda||\theta||_1 \\ &F(\theta) = L(\theta) + \frac{\rho}{2}|h(W(\theta))|^2 + \alpha h(W(\theta)) \end{aligned} \tag{4}$$

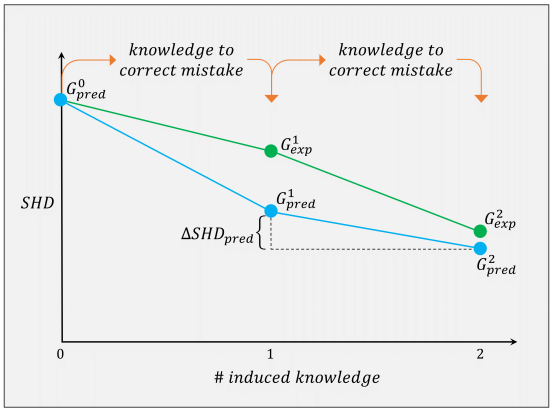


图1：知识诱导过程。我们通过沿用现有知识集，并根据模型错误进行新的随机修正，来诱导知识。

3 知识诱导

在我们的建模中，我们采用 Zheng 等人（2020）提出的 NOTEARS-MLP 多层感知机作为估计器。我们将该框架扩展为纳入因果知识，方法是将额外信息表述为式 3 优化过程中的附加约束。

知识类型。 我们区分以下两种知识类型：(i)已知非活跃 是关于真实非活跃边（不存在直接因果关系）的知识；(ii) 已知活跃 是关于真实活跃边（存在直接因果关系）的知识。

知识诱导过程。 我们采用交互式诱导过程，在此过程中，专家知识根据因果发现模型的结果提供信息。具体而言，我们诱导知识以纠正模型在因果结构中的错误，希望新的结构更接近真实因果图。此过程通过在每一步纠正模型错误来序贯进行。

在接下来的小节中，我们将介绍带约束的 NOTEARS 优化公式，并详细说明序贯诱导过程。

3.1 将专家知识作为约束

与真实活跃边相关联的诱导知识，$X_i \to Xj$ （已知活跃），会强制邻接矩阵中对应的单元格为非零，$[W(\theta)]_{ij} \neq 0$。在我们的优化扩展中，我们将此知识视为不等式约束，使得以下陈述成立：

$$h^p_{ineq}(W(\theta)) > 0 \tag{5}$$

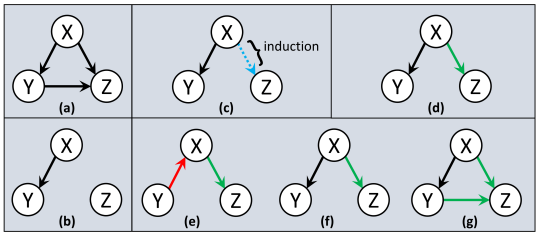


图 2：期望图构造：(a) 真实图，$\mathcal{G}_{true}$；(b) 模型在步骤 k时预测的图，$\mathcal{G}^k_{pred}$；(c) 步骤（$k+1$）时的诱导知识；(d) 步骤（$k+1$）时的期望图，$\mathcal{G}^{k+1}_{exp}$。步骤（$k+1$）时若干可能预测图中的三个不同示例，$\mathcal{G}^{k+1}_{pred}$，分别展示模型表现为 (e) 低于预期、(f) 符合预期，以及 (g) 高于预期。

其中，p 表示由已知活跃集合诱导产生的所有不等式约束，而h^{ineq} 是违反这些不等式约束所对应的惩罚分数。另一方面，与真实非活跃边相关联的知识，$X_i \nrightarrow Xj$ （已知非活跃），会强制$W(\theta)$ 中的相关单元格等于零，$[W(\theta)]_{ij} = 0$，前提是诱导知识表明X_i 与Xj之间不应存在边。在我们的优化中，我们将此知识视为等式约束，如下所示：

$$h^q_{eq}(W(\theta)) = 0 \tag{6}$$

其中，q 遍历所有由已知非活跃 集合诱导出的等式约束，h^{eq} 是与违反这些等式约束相关的惩罚分数。通过在公式 5、6 中加入这些额外约束，我们将公式 3 扩展为在优化中纳入因果知识，如下所示：

$$\begin{aligned} \min_{f: f_j \in H^1(\mathbb{R}^d), \forall j \in [d]} \quad & L(f) \\ \text{subject to} \quad & h(W(\theta)) = 0, \\ & h^q_{eq}(W(\theta)) = 0, \\ & h^p_{ineq}(W(\theta)) > 0 \end{aligned} \tag{7}$$

NOTEARS 会对估计的边权重进行阈值化步骤，通过剪枝所有权重低于特定阈值的边来减少假发现。因此，在实践中，公式 6 中的等式约束也会变为不等式，以允许存在较小的权重。最后，在实现中引入松弛变量，将不等式约束转换为等式约束（详见附录 A 中的构造）。

采用 Zheng 等人（Zheng 等人，2020）提出的类似策略，并使用增广拉格朗日法，对

式4的形式如下：

$$\begin{aligned}&\min_{\theta} F(\theta)+\lambda||\theta||_1\\ &F(\theta)=L(\theta)+\frac{\rho}{2}|h(W(\theta))|^2+\alpha h(W(\theta))\\ &+\sum_p(\frac{\rho_{ineq}}{2}|h^p_{ineq}(W(\theta))|^2+\alpha_p h^p_{ineq}(W(\theta)))\\ &+\sum_q(\frac{\rho_{eq}}{2}|h^q_{eq}(W(\theta))|^2+\alpha_q h^q_{eq}(W(\theta)))\end{aligned} \quad (8)$$

3.2 序贯知识诱导

在进行知识诱导时，优化以顺序方式运行，其中约束由模型在上一步中所犯的因果错误提供依据。我们从不施加任何来自真实有向无环图的额外知识的基线模型开始，得到预测的因果图，在图1中记为 $\mathcal{G}^0_{pred}$ 。随后，在每个迭代步骤（$k+1$），根据 NOTEARS-MLP 预测的因果图 $\mathcal{G}^k_{pred}$ 中的错误，我们随机选择一条额外的知识来纠正其中一个错误，并将其添加到前 k 步确定的约束集合中，然后重新运行 NOTEARS。我们注意到，也可以一次选择一批修正项；不过，本研究侧重于估计每条知识（以已知活跃/非活跃边的形式表示）的贡献。我们的观察结果见第4.1节、第4.2节、第4.3节和第4.4节。

预期因果图。 我们考虑步骤（$\mathcal{G}^{k+1}_{exp}k+1$）中的预期因果图，并假设所有知识均已成功诱导，且未影响任何其他边。图2d展示了一个示例，说明在迭代过程中如何为特定步骤构建预期图。需要注意的是，修正后得到的有向图（预期因果图）不一定是有向无环图。我们的目标是比较 NOTEARS 预测的因果图与预期因果图的性能。我们的直觉是，诱导的知识很可能会修正其他错误的边（见图2g），从而取得优于预期的性能。

4 实验

为了实证评估额外因果知识对因果学习的影响，并使我们的实验设置与参考文献（Zheng 等人，2020）的研究尽可能相似，我们使用了一个包含 10 个隐藏单元和 Sigmoid 激活函数的多层感知机。在所有实验设置中，我们均假设先验知识正确（与真实有向无环图一致）。尽管先前研究（Reisach 等，2021）已证明 NOTEARS 算法对数据缩放较为敏感，但我们仍分别使用未缩放和已缩放的数据进行了实验，以确保研究结果稳健。我们很高兴地报告，无论数据是否缩放，结论都保持不变，这表明结果稳定可靠。为与 NOTEARS 的原始实现（Zheng 等人，2020）保持一致，我们展示了使用未缩放数据得到的结果；但需要指出的是，即使对数据进行缩放，我们的结论依然成立。

表1：所考虑的性能指标及其对应的期望方向。

指标	期望方向
ΔFDR	越低越好
ΔTPR	越高越好
ΔFPR	越低越好
ΔSHD	越低越好

表2：诱导冗余知识的结果。

指标	均值 ±标准误	备注
ΔFDR	-0.00030 ± 0.00017	无损害
ΔTPR	-0.00035 ± 0.00027	无损害
ΔFPR	-0.00097 ± 0.00059	无损害
ΔSHD	-0.00154 ± 0.00167	无损害

模拟。 我们通过将有向无环图估计与真实值进行比较，考察所提出方法的表现以及诱导知识的影响。在合成数据模拟中，我们按照模拟标准考虑了16种不同组合：两种随机图模型——Erdos-Renyi（ER）和无标度（SF）、节点数$d=\{10,20\}$、样本量$n=\{200,1000\}$、边密度$s0=\{1d,4d\}$。对于每种组合，我们生成了10个不同的随机图或真实有向无环图（将其作为该组合的10次试验），并按照包含索引模型的非线性数据生成过程生成相应数据（类似于文献（Zheng 等人，2020）中的研究，其中底层真实有向无环图是可识别的）。结果汇总了全部160个随机真实有向无环图及其数据集。在模拟中，我们考虑了正则化参数 $\lambda=0.01$。我们根据不同指标的均值和标准误评估因果学习的表现。在统计显著性分析中，我们使用 t 检验，并将 $\alpha=0.05$ 作为显著性水平。

表 3：纠正模型错误的诱导知识结果。

指标	知识	均值 ±标准误	改进
ΔFDR	非活跃	-0.018 ± 0.002	显著
ΔFDR	活跃	-0.008 ± 0.001	显著
ΔTPR	非活跃	-0.007 ± 0.003	不显著
ΔTPR	活跃	0.024 ± 0.003	显著
ΔFPR	非活跃	-0.023 ± 0.004	显著
ΔFPR	活跃	-0.008 ± 0.003	显著
ΔSHD	非活跃	-0.032 ± 0.012	显著
ΔSHD	活跃	-0.071 ± 0.011	显著

指标。 在比较分析中，我们考虑以下性能指标：假发现率（FDR）、真正率（TPR）、假阳性率（FPR）和结构汉明距离（SHD）。不过，由于我们要评估不同规模的160个随机图上的表现，因此采用每节点结构汉明距离（SHD/d）作为SHD指标，使其能够随节点数缩放（FDR、TPR和FPR按定义会随之缩放）。为评估诱导知识的影响，我们计算了不同步骤（诱导知识集大小各不相同）下各项指标的差值，并将其记为 ΔFDR、ΔTPR、 ΔFPR和 ΔSHD，另见表1。例如，根据模型的预测，我们计算额外诱导一条知识对指标SHD的影响（ΔSHD_{pred}），如下所示：

$$\Delta\text{SHD}_{pred} = \text{SHD}(\mathcal{G}_{pred}^{k+1}) - \text{SHD}(\mathcal{G}_{pred}^{k}) \quad (9)$$

合理性检查 - 冗余知识无损害。 作为合理性检查的一部分，我们考察了与 NOTEARS-MLP 成功发现的因果关系相匹配的诱导知识所产生的影响。因此，在本节中，我们考虑基线模型正确分类为知识来源的边集。这里，我们不区分诱导知识的边类型（已知非活跃和活跃），因为我们的目标是考察将冗余知识作为额外约束是否会影响模型性能。结果如表2所示。实证评估表明，添加冗余知识不会降低 NOTEARS-MLP 的性能。我们进行的统计检验显示，基于正确分类的边集诱导知识后得到的结果，与未进行知识诱导的模型结果在统计上没有显著差异。不过，我们注意到，在正则化程度较高的模型中，性能会变差。这与观察结果一致——

Ng 等人（Ng 等人，2020）指出，稀疏有向无环图会导致部分真实活跃边缺失。

4.1 纠正模型错误的知识

我们首先研究基于真实图中因果关系、随机选取的知识纠正模型错误所发挥的作用。因此，在这种情况下，我们将估计的因果图中的误分类边作为偏置模型的知识来源。结果见表 3。我们的实证结果表明，只要诱导出的知识纠正了估计因果图中的误分类边，就会带来统计显著的改进；但在 ΔTPR 与已知非活跃 边的情形下例外。不过，这种表现并非完全出乎意料，因为来自已知非活跃边的知识有助于消除假发现或假阳性，而这几乎不会影响真正例。

4.2 已知非活跃与已知活跃

在本小节中，我们关注不同类型的诱导知识对因果发现的影响，以纠正估计因果图中的错误。因此，实验设置与第4.1节类似，其中我们将误分类边集视为知识来源。我们分别考虑诱导已知非活跃和已知活跃 两类知识，并分析它们对性能影响的差异。结果如表 4 所示。根据我们的统计检验，与基于错误发现率和假阳性率的性能相比，诱导已知非活跃更有效，因为非活跃边的误分类对这些指标的影响更大。另一方面，结果表明，诱导已知活跃对真正率更有效，因为活跃边的误分类对该指标的影响更大。有趣的是，我们发现已知活跃 带来了

在结构汉明距离方面显著优于已知非活跃 。这可以归因于：基于两个随机变量之间真实非活跃边的诱导知识（已知非活跃），即从X_i 到X_j，仍然保留了两个额外的自由度，因为完全没有边，或存在一条从X_j 到X_i的活跃边，都是可能的。然而，基于真实活跃边的诱导知识不允许任何自由度。这类知识对因果图发现的限制更强，因此包含的信息也更多。

4.3 实证表现与预期

在本小节中，我们关注的是，诱导知识以纠正模型错误，是否能带来超出预期值的改进。实验设置与第4.1节和第4.2节类似，在这两节中，我们将误分类边集视为知识来源。我们分别使用了已知非活跃和已知活跃两种知识。预期因果图$\mathcal{G}^{exp}$以与图2中所述类似的方式构建。表5汇总了这些情况下的性能比较及其预期结果。统计检验表明，诱导得到的正确知识平均而言并未比预期多纠正更多错误的活跃边和/或非活跃边。因此，在全局优化方案中，使用诱导知识中的信息并未带来超出预期的额外影响。不过，这很可能是因为预期因果图$\mathcal{G}^{exp}$的结构定义不充分。值得注意的是，$\mathcal{G}^{exp}$ 不一定是有向无环图，因为与$\mathcal{G}^{pred}$相比，它没有任何用于强制实现无环性的约束机制（ NOTEARS 在连续优化中施加硬性无环约束）。不过还需指出，求解带无环约束的优化问题并不能保证得到有向无环图；Ng 等人（Ng et al., 2022）在其研究中展示了这种现象，并提出了能够保证收敛至有向无环图解的方法。

4.4 真实数据

我们评估了在 Ref.（Sachs 等人，2005）的研究数据集中纳入专家知识所产生的影响。该数据集广泛用于概率图模型领域，且其共识网络已被生物学界认可。数据集包含不同条件下人类细胞中磷酸化蛋白质和磷脂的表达水平。数据集包含$d = 11$ 种细胞类型，以及$n = 7466$ 个表达水平样本。对于底层因果图的真实值，我们采用了该研究（Sachs 等人，2005）提出的$s_0 = 20$ 条活跃边。我们选用Δ真正率、边一致性百分比差异（越高越好）以及反向边百分比差异（越低越好）作为评估指标，因为这些指标上的表现能更鲜明地体现显著性。与合成数据分析类似，我们进行了10次试验来汇总评估结果。经验结果（均值 ± 标准误）显示： Δ真正率为0.020± 0.004，边一致性百分比差异为0.393 ± 0.086，反向边百分比差异为-0.073 ± 0.030。我们发现，借助诱导知识，模型在正确识别更多活跃边并减少反向识别的边数方面取得了统计学上显著的改进。由于只能获取部分真实活跃边，我们的分析无法像合成数据案例那样，对已知非活跃边进行比较研究。我们认为，通过微调模型参数，性能或许还能进一步提升；但由于本研究主要分析不同类型、不同来源的诱导知识对结构学习的影响，因此在知识诱导过程的所有后续步骤中，我们保持了相同的参数设置。

5 结论

我们研究了专家因果知识对因果结构学习的影响，并提供了一组

表 4：诱导非活跃边与活跃边相关知识的影响比较。

指标	非活跃	活跃	更优
ΔFDR	-0.019 ± 0.002	-0.008 ± 0.001	非活跃
ΔTPR	-0.007 ± 0.003	0.024 ± 0.003	活跃
ΔFPR	-0.023 ± 0.004	-0.009 ± 0.004	非活跃
ΔSHD	-0.033 ± 0.013	-0.072 ± 0.011	活跃

表5：实证表现与预期值的比较。

指标	知识	实证值	预期值	备注
ΔFDR	非活跃	-0.019 ± 0.002	-0.016 ± 0.002	无差异
ΔFDR	活跃	-0.008 ± 0.001	-0.006 ± 0.001	无差异
ΔTPR	非活跃	-0.007 ± 0.003	-0.002 ± 0.003	无差异
ΔTPR	活跃	0.024 ± 0.003	0.022 ± 0.002	无差异
ΔFPR	非活跃	-0.023 ± 0.004	-0.021 ± 0.004	无差异
ΔFPR	活跃	-0.009 ± 0.003	-0.007 ± 0.003	无差异
ΔSHD	非活跃	-0.033 ± 0.013	-0.047 ± 0.010	无差异
ΔSHD	活跃	-0.072 ± 0.011	-0.056 ± 0.010	无差异

关于使用不同类型知识对模型施加偏置的比较分析。我们的研究结果表明，能够纠正模型错误的知识会带来显著改进；即使是会产生冗余约束的冗余知识，也不会造成损害。这表明，只要有领域知识可用，实践者就应考虑将其纳入模型。更重要的是，我们发现，与非活跃边相关的知识相比，与活跃边相关的知识对因果发现的正面影响更大，这主要可归因于两种情况下减少的自由度数量不同。这一发现表明，在适用的情况下，实践者或许应优先纳入有关边是否存在的知识。此外，我们的实验分析表明，平均而言，诱导知识纠正的错误活跃边和／或非活跃边并不比预期值更多。我们对此颇感意外，因为我们原本预期，基于已知活跃／非活跃边的每一项约束，平均而言都能影响并纠正不止一条边。

我们的研究表明，在因果发现中让人类参与其中至关重要，我们希望在未来的研究中进一步探索这一点。此外，我们想指出，本研究采用了硬约束来纳入先验知识，因为我们假设先验知识是正确的。未来一个值得探索的方向是，在连续优化中加入相应功能，以允许对先验知识设置不同的置信度。

致谢

本研究由美国陆军研究办公室资助，并依据拨款编号 W911NF-22-1-0035 开展。本文所载观点和结论仅代表作者意见，不应被解读为美国陆军研究办公室或美国政府明示或暗示的官方政策。美国政府有权为政府用途复制和分发重印本，无论本文是否注明版权。

参考文献

Alrajeh, D., Chockler, H., and Halpern, J. Y.（2020）。结合专家的因果判断。人工智能，288:103355。Andrews, B., Spirtes, P., and Cooper, G. F.（2020）。论在分层背景知识下存在潜在混杂时因果发现的完备性。载于人工智能与统计国际会议，第4002–4011页。PMLR。Bertsekas, D. P.（1997）。非线性规划。运筹研究学会，48(3):334–334。Bhattacharjya, D., Gao, T., Mattei, N., and Subramanian, D.（2021）。事件数据集中事件对之间的因果关联。载于第二十九届国际人工智能联合会议论文集，第1202–1208页。Bradley, R., Dietrich, F., and List, C.（2014）。汇总因果判断。科学哲学，81(4):491–515。Chickering, D. M.（1996）。学习贝叶斯网络是NP完全问题。载于从数据中学习，第121–130页。Springer。Chickering, D. M.（2002）。通过贪心搜索进行最优结构识别。机器学习研究杂志，3(Nov):507–554。Chickering, M., Heckerman, D., and Meek, C.（2004）。贝叶斯网络的大样本学习是NP完全问题。机器学习研究杂志，5。Colombo, D., Maathuis, M. H., Kalisch, M., and Richardson, T. S.（2012）。利用潜在变量和选择变量学习高维有向无环图。统计年刊，第294–321页。Cooper, G.（1995）。在存在选择偏差的情况下从数据中进行因果发现。载于第五届人工智能与统计国际研讨会论文集，第140–150页。Elkan, C.（2001）。成本敏感学习的基础。载于国际人工智能联合会议，第17卷，第973–978页。Lawrence Erlbaum Associates Ltd.

Fang, Z., Zhu, S., Zhang, J., Liu, Y., Chen, Z., and He, Y.（2020）。低秩有向无环图与因果结构学习。*arXiv*预印本 *arXiv:2006.05691*。Gencoglu, O. and Gruber, M.（2020）。新冠肺炎期间Twitter活动的因果建模。*Computation*，8(4):85。Heindorf, S., Scholten, Y., Wachsmuth, H., Ngonga Ngomo, A.-C., and Potthast, M.（2020）。Causenet：迈向从网络中提取的因果关系图。载于第*29*届*ACM*国际信息与知识管理会议论文集，第3023–3030页。Holzinger, A.（2016）。面向健康信息学的交互式机器学习：何时需要人在环中？*BrainInformatics*，3(2):119–131。Jaber, A., Zhang, J., and Bareinboim, E.（2018）。马尔可夫等价下的因果识别。*arXiv*预印本 *arXiv:1812.06209*。Lachapelle, S., Brouillard, P., Deleu, T., and Lacoste-Julien, S.（2019）。基于梯度的神经有向无环图学习。*arXiv*预印本 *arXiv:1906.02226*。Lake, B. M., Ullman, T. D., Tenenbaum, J. B., and Gershman, S. J.（2017）。构建像人一样学习和思考的机器。*Behavioral and Brain Sciences*，40。Li, Z., Ding, X., Liu, T., Hu, J. E., and Van Durme, B.（2021）。因与果的引导生成。*arXiv*预印本 *arXiv:2107.09846*。Liu, J., Chen, Y., and Zhao, J.（2021）。借助提及掩蔽泛化的知识增强事件因果关系识别。载于第二十九届国际人工智能联合会议论文集，第3608–3614页。Magliacane, S., van Ommen, T., Claassen, T., Bongers, S., Versteeg, P., and Mooij, J. M.（2017）。通过因果推断进行领域适应，以预测不变条件分布。*arXiv*预印本 *arXiv:1707.06422*。Ng, I., Fang, Z., Zhu, S., Chen, Z., and Wang, J.（2019）。基于掩蔽梯度的因果结构学习。*arXiv*预印本 *arXiv:1910.08527*。Ng, I., Ghassami, A., and Zhang, K.（2020）。论稀疏性和有向无环图约束在线性有向无环图学习中的作用。*arXiv*预印本 *arXiv:2006.10201*。Ng, I., Lachapelle, S., Ke, N. R., Lacoste-Julien, S., and Zhang, K.（2022）。论结构学习中连续约束优化的收敛性。载于人工智能与统计国际会议，第8176–8198页。PMLR。O'Donnell, R. T., Nicholson, A. E., Han, B., Korb, K. B., Alam, M. J., and Hope, L. R.（2006）。利用先验信息进行因果发现。载于澳大拉西亚人工智能联合会议，第1162–1167页。Springer。Pearl, J.（2009）。因果关系。剑桥大学出版社。Pearl, J. and Verma, T. S.（1995）。推断因果关系理论。载于逻辑与数学基础研究，第134卷，第789–811页。爱思唯尔。Peters, J., Janzing, D., and Sch¨olkopf, B.（2017）。因果推断要素：基础与学习算法。麻省理工学院出版社。Ramsey, J., Glymour, M., Sanchez-Romero, R., 和 Glymour, C.（2017）。百万个及更多变量：用于学习高维图因果模型的快速贪心等价搜索算法，并将其应用于功能性磁共振图像。国际数据科学与分析杂志，3(2):121–129。Reisach, A., Seiler, C., 和 Weichwald, S.（2021）。谨防模拟有向无环图！因果发现基准可能很容易被操纵。神经信息处理系统进展，34:27772–27784。Sachs, K., Perez, O., Pe'er, D., Lauffenburger, D. A., 和 Nolan, G. P.（2005）。从多参数单细胞数据中推导出的因果蛋白质信号网络。《科学》，308(5721):523–529。Scutari, M.（2009）。使用 bnlearn R 软件包学习贝叶斯网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:0908.3817*。Sharma, A. 和 Kiciman, E. （2020）。DoWhy：用于因果推断的端到端库。*arXiv* 预印本 *arXiv:2011.04216*。Spirtes, P., Glymour, C. N., Scheines, R., 和 Heckerman, D.（2000）。因果、预测与搜索。麻省理工学院出版社。Wei, D., Gao, T., 和 Yu, Y.（2020）。无惧有向无环图：深入探究用于学习贝叶斯网络的连续优化。*arXiv* 预印本 *arXiv:2010.09133*。Xin, D., Ma, L., Liu, J., Macke, S., Song, S., 和 Parameswaran, A.（2018）。加速人在回路中的机器学习：挑战与机遇。载于第二届端到端机器学习数据管理研讨会论文集，第 1–4 页。Yang, Y., Kandogan, E., Li, Y., Sen, P., 和 Lasecki, W. S.（2019）。人在回路中的机器学习文本分析交互研究。载于*IUI*研讨会。Yu, Y., Chen, J., Gao, T., 和 Yu, M.（2019）。DAG-GNN：利用图神经网络进行有向无环图结构学习。载于国际机器学习会议，第 7154–7163 页。PMLR。Zadrozny, B.（2004）。在样本选择偏差下学习和评估分类器。载于第二十一届国际机器学习会议论文集，第 114 页。Zhang, K., Zhu, S., Kalander, M., Ng, I., Ye, J., Chen, Z., 和 Pan, L.（2021）。gCastle：用于因果发现的 Python 工具箱。*arXiv* 预印本 *arXiv:2111.15155*。Zheng, X., Aragam, B., Ravikumar, P., 和 Xing, E. P.（2018）。无泪有向无环图：用于结构学习的连续优化。*arXiv* 预印本 *arXiv:1803.01422*。Zheng, X., Dan, C., Aragam, B., Ravikumar, P., 和 Xing, E.（2020）。学习稀疏非参数有向无环图。载于人工智能与统计国际会议，第 3414–3425 页。PMLR。

附录

A. 阈值纳入与松弛变量在公式 5 中，我们看到不等式约束具有以下形式：

$$h_{ineq}^{p}(W(\theta)) > 0$$

其中，p 遍历与真实活跃边（已知活跃）相关的每一项诱导知识 $X_i \rightarrow Xj$，并施加 $[W(\theta)]_{ij} \neq 0$。NOTEARS 使用阈值处理步骤来减少假发现：任何绝对值低于阈值 w_{thresh} 的边权重都会被设为零。因此，对于从真实活跃边（$X_i \rightarrow Xj$）诱导出的任意知识，我们有以下约束：

$$[W(\theta)]_{ij}^{2} \geq W_{thresh}^{2}.$$

我们通过引入一组松弛变量yp，将优化中的不等式约束转换为等式：

$$-[W(\theta)]_{ij}^{2} + W_{thresh}^{2} + y_p = 0 \qquad \text{s.t.} \quad y_p \geq 0 \tag{10}$$

同样地，使用阈值 W_{thresh} ，我们的等式约束（与已知非活跃边相关）可表示为：

$$[W(\theta)]_{ij}^{2} - W_{thresh}^{2} + y_q = 0 \qquad \text{s.t.} \quad y_q \geq 0 \tag{11}$$

其中，q 遍历与真实非活跃边 $X_i \nrightarrow Xj$ 相关的每一项诱导知识，并施加$[W(\theta)]_{ij} = 0$。

B. AdditionalResults and Summary Statistics此处我们通过汇总统计展示基于实证评估得出的诱导知识的详细表现（Δ错误发现率、 Δ真正率、 Δ假阳性率和 Δ结构汉明距离，分别针对 Δ=1和 Δ=2）。与一项额外知识（Δ=1）类似，我们根据模型的预测，计算诱导两项额外知识（Δ=2）对指标结构汉明距离（Δ结构汉明距离$_{pred}^{2}$）的影响，如下所示：

$$\Delta\text{SHD}_{pred}^{2} = \text{SHD}(\mathcal{G}_{pred}^{k+2}) - \text{SHD}(\mathcal{G}_{pred}^{k}) \tag{12}$$

表 6 展示了诱导冗余知识或被 NOTEARS-MLP 正确分类的知识所得的结果。

表7展示了诱导知识以纠正模型错误的详细结果。表8展示了以误分类边集为知识来源时，“已知非活跃”（从非活跃边诱导的知识）与“已知活跃”（从活跃边诱导的知识）影响差异的详细结果。表9展示了以误分类边集为知识来源时，知识诱导带来的实证值改进与预期结果之间差异的详细结果。表10展示了在真实数据集上诱导知识的详细结果（数据来自（Sachs 等人，2005））。

表 6：诱导冗余知识的完整结果（合理性检查）。

指标	Δ	均值 ± 标准误。	p值	t统计量	备注
ΔFDR	1	-0.00030 ± 0.00017	0.076	-1.770	无损害
ΔFDR	2	-0.00060 ± 0.00021	0.004	-2.850	无损害
ΔTPR	1	-0.00035 ± 0.00027	0.205	-1.260	无损害
ΔTPR	2	-0.00036 ± 0.00029	0.227	-1.210	无损害
ΔFPR	1	-0.00097 ± 0.00059	0.100	-1.630	无损害
ΔFPR	2	-0.00183 ± 0.00069	0.008	-2.660	无损害
ΔSHD	1	-0.00154 ± 0.00167	0.356	-0.920	无损害
ΔSHD	2	-0.00357 ± 0.00188	0.050	-1.900	无损害

表7：诱导知识以纠正模型错误的完整结果（第4.1节）。

指标	Δ	知识	均值 ± 标准误	p值	t统计量	改进
ΔFDR	1	非活跃	-0.018, 0.002	3.41E-14	-7.800	显著
ΔFDR	1	活跃	-0.008, 0.001	2.51E-08	-5.657	显著
ΔFDR	2	非活跃	-0.023, 0.003	2.74E-15	-8.221	显著
ΔFDR	2	活跃	-0.011, 0.002	9.06E-08	-5.448	显著
ΔTPR	1	非活跃	-0.007, 0.003	3.10E-02	-2.164	不显著
ΔTPR	1	活跃	0.024, 0.003	8.58E-19	9.191	显著
ΔTPR	2	非活跃	-0.001, 0.003	8.25E-01	-0.222	不显著
ΔTPR	2	活跃	0.035, 0.004	1.16E-19	9.580	显著
ΔFPR	1	非活跃	-0.023, 0.004	3.81E-08	-5.583	显著
ΔFPR	1	活跃	-0.008, 0.003	1.21E-02	-2.517	显著
ΔFPR	2	非活跃	-0.021, 0.003	1.04E-08	-5.845	显著
ΔFPR	2	活跃	-0.015, 0.005	6.73E-03	-2.724	显著
ΔSHD	1	非活跃	-0.032, 0.012	9.74E-03	-2.594	显著
ΔSHD	1	活跃	-0.071, 0.011	1.61E-10	-6.522	显著
ΔSHD	2	非活跃	-0.082, 0.012	1.93E-10	-6.533	显著
ΔSHD	2	活跃	-0.126, 0.016	3.41E-14	-7.875	显著

表8：关于非活跃边与活跃边的诱导知识影响对比的完整结果。（第4.2节）。

指标	Δ	非活跃	活跃	p值	t统计量	更优
ΔFDR	1	-0.019 ± 0.002	-0.008 ± 0.001	1.30E-04	-3.85	非活跃
ΔFDR	2	-0.023 ± 0.002	-0.011 ± 0.001	5.58E-04	-3.47	非活跃
ΔTPR	1	-0.007 ± 0.003	0.024 ± 0.003	8.13E-14	-7.57	活跃
ΔTPR	2	-0.001 ± 0.003	0.035 ± 0.004	2.84E-13	-7.43	活跃
ΔFPR	1	-0.023 ± 0.004	-0.009 ± 0.004	7.28E-03	-2.69	非活跃
ΔFPR	2	-0.021 ± 0.004	-0.015 ± 0.005	3.23E-01	-0.99	无差异
ΔSHD	1	-0.033 ± 0.013	-0.072 ± 0.011	1.90E-02	2.35	活跃
ΔSHD	2	-0.082 ± 0.013	-0.126 ± 0.016	3.28E-02	2.14	活跃

表9：实证表现与预期的完整比较结果（第4.3节）。

指标	Δ	知识	实证值	预期值	p值	t统计量	备注
ΔFDR	1	非活跃	-0.019 ± 0.002	-0.016 ± 0.002	0.51	-0.65	无差异
ΔFDR	1	活跃	-0.008 ± 0.001	-0.006 ± 0.001	0.21	-1.25	无差异
ΔFDR	2	非活跃	-0.023 ± 0.002	-0.025 ± 0.002	0.60	0.53	无差异
ΔFDR	2	活跃	-0.011 ± 0.002	-0.010 ± 0.002	0.75	-0.32	无差异
ΔTPR	1	非活跃	-0.007 ± 0.003	-0.002 ± 0.003	0.22	-1.23	无差异
ΔTPR	1	活跃	0.024 ± 0.003	0.022 ± 0.002	0.48	0.70	无差异
ΔTPR	2	非活跃	-0.001 ± 0.003	-0.006 ± 0.003	0.24	1.17	无差异
ΔTPR	2	活跃	0.035 ± 0.004	0.028 ± 0.004	0.18	1.34	无差异
ΔFPR	1	非活跃	-0.023 ± 0.004	-0.021 ± 0.004	0.62	-0.50	无差异
ΔFPR	1	活跃	-0.009 ± 0.003	-0.007 ± 0.003	0.79	-0.27	无差异
ΔFPR	2	非活跃	-0.021 ± 0.004	-0.030 ± 0.005	0.18	1.34	无差异
ΔFPR	2	活跃	-0.015 ± 0.005	-0.018 ± 0.005	0.61	0.51	无差异
ΔSHD	1	非活跃	-0.033 ± 0.013	-0.047 ± 0.010	0.36	0.91	无差异
ΔSHD	1	活跃	-0.072 ± 0.011	-0.056 ± 0.010	0.30	-1.04	无差异
ΔSHD	2	非活跃	-0.082 ± 0.013	-0.086 ± 0.013	0.82	0.23	无差异
ΔSHD	2	活跃	-0.126 ± 0.016	-0.100 ± 0.017	0.28	-1.09	无差异

表10：真实数据中诱导知识的完整结果（第4.4节）。

指标	Δ	均值 ± 标准误	p值	t统计量	备注
ΔTPR	1	0.020 ± 0.004	8.10E-06	4.60	改进
ΔTPR	2	0.036 ± 0.005	1.77E-12	7.62	改进
Δ % 一致边	1	0.393 ± 0.086	8.10E-06	4.60	改进
Δ % 一致边	2	0.714 ± 0.094	1.77E-12	7.62	改进
Δ % 反向边	1	-0.073 ± 0.030	1.54E-02	-2.45	改进
Δ % 反向边	2	-0.107 ± 0.033	1.29E-03	-3.27	改进