因果效应　　估计：最新进展、挑战与机遇

Zhixuan Chu[1] , **Jianmin Huang**[1] , **Ruopeng Li**[1] , **Wei Chu**[1] , **Sheng Li**[2]1蚂蚁集团2弗吉尼亚大学 chuzhixuan.czx@alibaba-inc.com, {caiqiong, ruopeng.lrp, weichu.cw}@antgroup.com, shengli@virginia.edu

arXiv:2302.00848v1 [cs.LG] 2 Feb 2023

摘要

因果推断在医疗保健、营销、政治学和在线广告等诸多领域有着广泛的现实应用。处理效应估计是因果推断中的一个基本问题，数十年来一直是统计学领域的深入研究课题。然而，传统的处理效应估计方法可能无法妥善处理大规模、高维且具有异质性的数据。近年来，人工智能领域出现了一种新兴研究方向，并受到越来越多的关注。该方向结合了传统处理效应估计方法（如倾向得分、匹配和重新加权）的优势，以及先进机器学习方法（如表示学习、对抗学习和图神经网络）的优势。尽管先进的机器学习方法在处理效应估计方面表现出色，但也带来了许多新议题和新研究问题。鉴于因果推断领域的最新研究成果，我们全面探讨了处理效应估计任务的三个核心组成部分——处理、协变量和结果所面临的挑战与机遇。此外，我们还从多个角度展示了这一主题中前景广阔的研究方向。

1 引言

因果关系在科学的各个学科中自然而广泛地得到应用，用于发现变量之间的因果关系并估计感兴趣的因果效应。推断因果关系最有效的方法是开展随机对照试验，将参与者随机分配到处理组或对照组。在随机研究中，预期对照组与处理组之间唯一的差异是所研究的结果变量。然而，现实中随机对照试验总是耗时且成本高昂。此外，大多数随机对照试验还需要考虑伦理问题，这在很大程度上限制了其应用。因此，观察性数据提供了一条颇具吸引力的捷径，可替代随机对照试验。观察性数据是研究者在不进行干预的情况下，通过观察研究对象而获得的。这意味着研究者无法控制处理和研究对象，只能通过分析记录的数据来研究这些对象。在因果推断中，我们希望回答这样的问题：“如果这位患者接受了另一种药物，她的结果会有所不同吗？”由于两个原因，回答这类反事实问题颇具挑战。首先，我们只能观察到事实结果，却无法观察到反事实结果，也就是如果研究对象接受了不同处理，可能会出现的结果。其次，在观察性数据中，处理通常不是随机分配的，这可能导致接受处理的人群与总体存在显著差异，也就是众所周知的选择偏差问题。

近年来，机器学习领域的蓬勃发展推动了因果推断方法的发展。决策树、表示学习、深度神经网络、对抗学习等强大的机器学习方法，已被用于更准确地估计潜在结果。除了改进结果估计模型，机器学习方法还为处理不同类型的处理、利用各种类型的协变量，以及缓解不同形式的选择偏差提供了新的视角。得益于因果推断与机器学习方法之间的深度融合，处理效应估计任务取得了长足进展。然而，鉴于因果推断领域最新的研究成果，我们从处理效应估计任务的核心组成部分——处理、协变量和结果——中总结出三项主要挑战：

- **[处理]:** 如何应对不同类型的处理，例如（1）二元处理、（2）多值处理、（3）连续标量处理、（4）相互关联的序列处理，以及（5）结构化处理（例如图、图像、文本）？
- **[协变量]:** 我们如何通过表示解耦、特征选择等方法，处理不同类型的协变量，例如混杂因素（观测到的和隐藏的）、调整变量、工具变量和伪变量?

- **[结果]:** 在估计事实结果和反

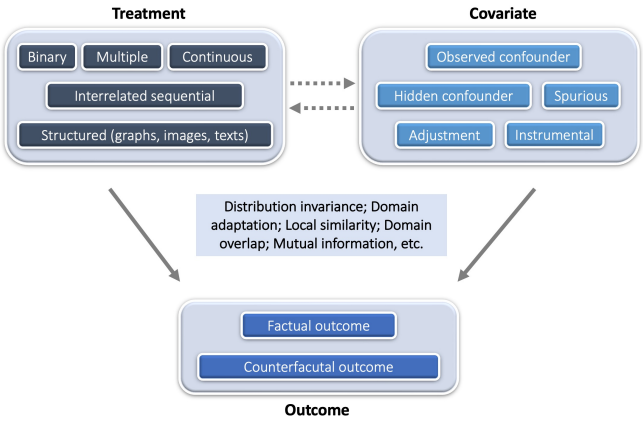


图1：处理效应估计任务的核心组成部分所面临的三大挑战，包括处理、协变量和结果。

事实结果时，我们如何克服不同处理组之间的选择偏差（例如，分布不变性、领域自适应、局部相似性、领域重叠、互信息等）？

如图1所示，与以处理效应估计方法分类体系为基础的既有综述不同，据我们所知，本文是首篇全面综述处理效应估计任务挑战的论文，其内容紧跟当前学术前沿。在本文中，我们首先在第2节整合并总结了有关因果推断的既有综述论文。随后，在第3节正式定义处理效应估计问题。接着，我们从处理、协变量和结果三个角度描述研究挑战，介绍这些主题的最新进展，并在第4节探讨研究机遇。最后，在第5节总结本文。

2 既有研究

已有多篇综述探讨了某一类因果效应估计方法，例如关于基于匹配的方法的综述 [Stuart， 2010]，关于基于树的方法和基于集成的方法的综述 [Athey 和 I mbens， 2015]，以及关于动态治疗方案的综述 [Chakraborty 和 Murphy 2014]。对于结构因果模型，建议参阅综述 [Pearl, 2009a] 或著作 [Pearl 2000]。此外，还有一篇关于如何从观察性数据中学习因果关系的综述 [Guo 等，2018] 其内容涵盖从观察性数据中推断因果图、结构因果模型、潜在结果框架，以及这些内容与机器学习之间的联系。 [Cui 等， 2020] 介绍了用于处理效应估计的传统表示学习算法和最新表示学习算法，并展示了这些方法在不同应用领域中颇具前景的应用。近期的一篇综述论文 [Yao等， 2021] 主要关注潜在结果框架的理论背景、统计领域和机器学习领域中的代表性方法，以及该框架与机器学习如何相互促进领域的发展。 [Zeng 和 Wang 2022] 回顾了因果推断领域的过往研究，重点关注潜在结果框架和因果图模型。 [Feder 等， 2022] 梳理了自然语言处理领域的因果关系研究，并提供统一的定义、基准数据集，以及对将因果推断应用于文本领域所面临挑战和机遇的清晰阐述。 [Ma 和 Li 2022] 探讨了利用图进行因果效应估计所面临的挑战，并总结了近年来利用图进行因果效应估计的代表性方法。此外，现有的因果推断方法主要关注特定来源的平稳观察性数据。这类学习策略假设训练阶段已经获得所有观察性数据，且数据仅来自一个来源。然而，在大数据时代，我们在利用观察性数据进行因果推断时面临新的挑战：如何扩展以处理不断增量获得的观察性数据；如何适应处理组和对照组之间的不平衡之外的其他领域自适应问题；以及如何访问海量数据。立场论文 [Chu 和 Li 2023] 正式定义了这一类持续治疗效应估计问题，阐述了其研究挑战，并提出了可能的解决方案。

不同于上述基于因果推断传统方法分类体系的综述，本文或许是首篇旨在全面综述处理效应估计任务核心组成部分（即处理、协变量和结果）所面临挑战的论文，并紧跟处理效应估计任务当前的学术前沿。

3 问题定义

假设观察性数据包含 n 个体，且每个个体都接受了其中一种处理。令 X 表示所有观测变量， Y 表示结果， T 表示观察性数据中的处理。

令 t_i 表示个体 i 的处理分配； i =1，.....， n。在基本的二元处理情形下， $t_i = 1$ 表示处理组， $t_i = 0$ 表示对照组。对个体 i 应用处理 t 时，其结果记为 y_t^i。对于观察性数据，只能观测到一个潜在结果。观测到的结果称为事实结果，其余未观测到的潜在结果称为反事实结果。

为了从观察性数据中估计处理效应，潜在结果框架 [Splawa-Neyman 等人，1990；Rubin， 1974] 是最受欢迎的方法之一，其目标是估计此类潜在结果，然后计算处理效应。个体 i 的个体处理效应（ITE）是接受处理和对照条件下潜在结果之差，定义如下：

$$\mathrm{ITE}_i = y_1^i - y_0^i. \tag{1}$$

平均处理效应（ATE）是平均潜在处理结果与对照结果之间的差值，其定义如下：

$$\mathrm{ATE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_1^i - y_0^i). \tag{2}$$

潜在结果框架的成功基于以下假设 [Imbens 和 Rubin, 2015],这些假设确保处理效应可以被识别。

假设 1。 稳定单元处理值假设（*SUTVA*）：任一个体的潜在结果不会随分配给其他个体的处理而变化；并且对于每个个体，每个处理水平不存在会导致不同潜在结果的不同形式或版本。

假设 2。 一致性：处理 t 的潜在结果等于实际接受的处理为 t时的观测结果。

假设 3。 正值性：对于 x的任意取值，处理分配不是确定性的，即对于所有 t 和 x，$P(T=t|X=x)>0$。

假设 4。 可忽略性：给定协变量后，处理分配与潜在结果相互独立，即 $(y_1, y_0) \perp\!\!\!\perp t|x$。

这些假设是处理效应估计的基础。然而，在实践中，对于不同类型的处理（多重处理、连续处理、相互关联的序列处理或结构化处理）、隐藏混杂因素的存在以及各种方法而言，这些假设并不总能成立。应根据实际情况对其进行适当放宽或修改。

4 研究挑战与机遇

本节将详细介绍处理、协变量和结果方面的新挑战，阐述针对这些挑战的最新机器学习研究方法，并讨论潜在的研究机遇。

4.1 处理

我们首先详细阐述面对不同类型处理时所遇到的困难，例如二元处理、多元处理、连续标量处理、相互关联的序贯处理以及结构化处理（如图、图像、文本）。根据各类处理的特点，我们将分两部分介绍：（1）二元处理、多元处理、连续处理和相互关联的序贯处理；（2）结构化处理。

4.1.1 二元、多元、连续及序贯处理

如图2所示，针对二元、多重、连续和序贯处理情形，我们提出一套统一术语，以便研究者整合并比较现有方法。假设观察性数据包含 n 个体，且每个个体都经历一条潜在路径，其中包括若干处理阶段。在每条潜在路径中，个体 i 可以在每个阶段 S依次选择两种或多种处理中的一种 T，最终在路径末端观测到相应的结果 Y。令 $\{t_s^i;\ t_s=1,\ \ldots\ldots,\ n_{t_s},\ i=1,\ \ldots\ldots,\ n,$ 以及 $s=1,\ \ldots\ldots,\ n_s\}$表示个体 i 在阶段 s的处理分配。总共有 n_s 个处理阶段，而阶段 s有 n_{t_s} 种处理分配。由于每个处理阶段都存在不同的处理分配，对于整个总体，

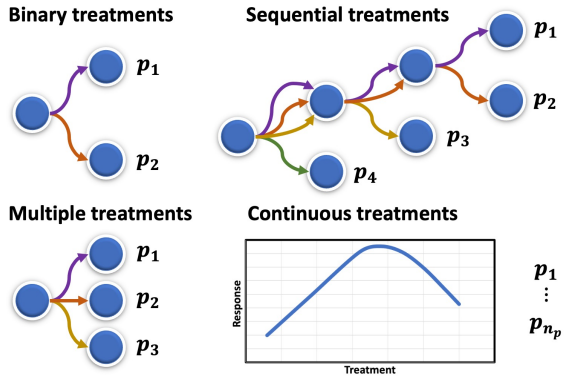


图2：二元、多元、连续及序贯处理示意图。

可以观测到若干条潜在路径 $\{p;\ p=1,\ \ldots\ldots,\ n_p\}$。然而，每个个体只能经历一条潜在路径，其中包含一系列阶段。因此，根据实际处理分配，路径末端只能观测到一个潜在结果。这个观测结果称为事实结果，其余未观测到的潜在结果称为反事实结果。个体 i 沿实际处理阶段产生的事实结果记为 y_F^i，反事实结果记为y_{CF}^i。令 $X\in\mathbb{R}^d$ 表示个体的 d 观测变量。观察性数据可表示为 $\{\{x^i,\ t_s^i,\ y_F^i\}_{s=1}^{n_s}\}_{i=1}^{n}$。为简洁起见，除非特别需要，否则省略个体上标 i 。

二元处理。 如果 $n_s=1$ 和 $n_{t_1}=2$，则只有一个处理阶段，包含两种处理选择。一个个体只需在两种处理之间进行一次选择。这种设置正是传统的二元处理效应估计任务。一个实际例子是评估针对某种疾病的两种不同药物的处理效应。通过利用观察性数据（包括处理组和对照组），我们只能获得每位患者的一个事实结果。因此，核心任务是预测如果患者接受了另一种药物，将会发生什么。这一传统任务已在文献中得到广泛研究，例如 TARNet [Johansson等、 2016], CFR [Shalit 等、 2017], BNR-NNM [Li 和 Fu、 2017], CEVAE [Louizos 等、 2017], SITE [Yao 等、2018], GANITE [Yoon 等、 2018], 以及 Dragonnet [Shi 等， 2019]。

多重处理。 如果 $n_s=1$和 $n_{t_1}>2$，则只有一个处理阶段，但包含多种处理。这是传统的多重治疗效应估计任务。通常，二元治疗模型可以轻松扩展为多重治疗模型 [Lopez 和 Gutman， 2017],例如使用广义提升模型进行倾向评分估计 [McCaffrey 等， 2013], 基于这样一种思路进行反事实推断：在小批量中为样本添加与其倾向得分匹配的最近邻 [Schwab 等， 2018], 多任务对抗学习 [Chu 等， 2022b],BART[Hu 等， 2020], 以及带有任务嵌入的深度生成模型 [Saini 等, 2019]。

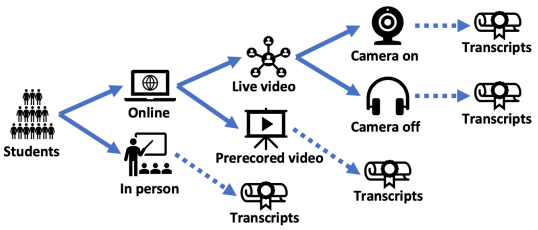


图 3：教学模式示例。实线表示每位学生在各阶段的潜在选择，虚线表示沿相应路径的最终潜在结果。

连续处理。如果 $n_s \geq 1$ 和 t_s 是连续的，这就是连续处理效应估计任务。连续处理广泛存在于医疗保健、公共政策和经济学等领域。随着观察性数据不断积累，如何在校正混杂因素的同时估计平均剂量反应函数，已成为一个关键问题。由于连续处理存在无限多个反事实，与二元处理或多重处理相比，调整选择偏差要复杂得多。因此，不同于多重处理的情形，针对离散处理调整选择偏差的标准方法，无法轻易扩展到连续情形来处理偏倚。

DRNet [Schwab 等， 2020] 由三级架构组成，包含适用于所有处理的共享层、针对每种处理的多任务层，以及针对剂量子区间的附加多任务层。具体而言，对于每种处理，剂量区间被划分为若干大小相等的子区间，并为每个子区间添加一个多任务头。DRNet 不会动态确定这些区间，因此失去了许多灵活性。SCIGAN [Bica 等，2020] 具有灵活性，能够同时估计多种不同连续干预下的反事实结果。其核心思想是使用改进的生成对抗网络模型生成反事实结果。VCNet [Nie 等， 2021]提出了一种新颖的变系数神经网络，在保持所估计的平均剂量反应函数连续性的同时，提高了模型表达能力。其次，为了改善有限样本下的性能，我们将目标化正则化推广为剂量反应曲线的双重稳健估计量。CausalEGM [Liu 等， 2022] 是一种可应用于二元和连续处理情境的编码生成模型。CausalEGM 模型由一个双向变换模块和两个前馈神经网络组成。该双向变换模块由两个生成对抗网络（GAN）构成，用于将协变量映射到低维空间并解耦其依赖关系。

序贯治疗。如果 $n_s > 1$ 和 $n_{t_s} \geq 2$，则存在多个处理阶段，每个阶段有两种或多种处理。每个个体都会经历一条路径，并需要做出 n_s 处理决策。路径结束时，我们只能观察到实际路径上的一个结果。

例如，在2019年末开始并延续至今的COVID-19疫情期间，大学的教学模式经历了重大变化。COVID-19疫情迫使全球大多数教育机构采用“在线 + 线下”的教学模式。在一些大学，学生可以选择在线远程学习，或佩戴口罩并保持社交距离进行线下学习。课程教师可以为学生提供实时视频课程，和/或将课程录像上传至在线学习平台供学生观看。此外，在实时视频学习中，学生可以选择打开或关闭摄像头。因此，每位学生都会沿着一条序贯行为路径行进：“线下或在线学习 $\rightarrow$ 预录视频学习或实时视频学习 $\rightarrow$ 摄像头开启或关闭”，如图3所示。不同的教学模式会影响学生的社交、情绪和心理健康以及学业成就。每位学生都会在各个阶段做出自己的选择，因此存在各种潜在路径。直观来说，潜在路径是个体可能采取的一系列处理选择。每个个体实际上只能经历一条路径，这条路径记录在观察性数据中。然而，在每个干预阶段，个体可以选择一种或多种干预，因此会产生多条潜在路径，包括一条事实路径和若干反事实路径。在因果效应估计任务中，我们需要估计所有潜在路径上的潜在结果。

在这种情况下，选择偏差会在多个阶段不断累积，使反事实结果的估计更具挑战性。据我们所知，现有的处理效应估计方法无法有效解决这类问题。对于序贯治疗这一新问题，因果效应估计任务可以转化为基于异质图和有向无环图的图学习任务。首先，利用自监督学习构建一个存在偏倚的异质图，其中包含许多互不连通的子图。每个子图代表一个个体及其所有潜在路径。其次，学习得到的异质图是一个典型的有向无环图，其架构按照偏序所定义的流程处理信息。基于该有向无环图的实际含义，我们采用双向处理。可以按照自然顺序处理一条路径，以估计路径末端的结果；也可以按照相反顺序处理另一条路径，以重建原始特征。

4.1.2 结构化处理

在许多实际情形中，处理天然具有结构化特征，例如医疗处方（文本）、蛋白质结构（图）和计算机断层扫描（图像）。传统的处理效应估计方法通常会针对每种治疗选项分别使用预测头，因此处理指示变量的影响可能会在高维网络表示中丢失。将这一思路直接扩展到结构化处理，不仅计算成本高昂，也无法利用治疗特征或学习治疗表示[Kaddour等， 2021]。

GraphITE [Harada 和 Kashima， 2021]通过学习图结构处理的表示来估计条件平均处理效应。他们提出利用图神经网络，同时使用希尔伯特–施密特独立性准则正则化来减轻观测偏倚，从而提高目标与处理表示的独立性。

受到 Robinson 分解的启发，该分解使二元处理的条件平均处理效应能够灵活估计，[Kaddour 等人，2021] 提出了广义Robinson分解（GRD），并从中提取出一个针对因果效应的伪结果。该方法将 GRD 推广至可表示为连续嵌入的处理。GRD 揭示了一个可学习的伪结果目标：通过消除混杂关联，从观测信号中分离出因果成分。

此外，越来越多的方法学研究开始探讨如何将图像纳入观察性数据中，以估计处理效应 [Pawlowski 等，2020；Castro 等，2020]。研究者提出了一种基于图像的处理效应模型，该模型采用深度概率建模框架[Jerzak 等，2022]。他们开发了一种方法，通过识别处理效应分布相似的图像来估计图像的潜在聚类。该模型还强调了图像敏感性因子，它通过蒙特卡罗方法，利用聚类的近似后验分布，量化图像片段对平均效应聚类预测的贡献程度。

4.2 协变量

在处理效应估计任务中，选择偏差是最大的挑战。所谓选择偏差，是指观察到的群体分布无法代表我们感兴趣群体的现象。混杂变量会影响个体的处理选择，从而导致选择偏差。这种现象加剧了反事实结果估计的难度，因为我们需要根据观察到的对照组来估计处理组个体的对照结果，并根据观察到的处理组来估计对照组个体的处理结果。处理选择偏差的过程称为协变量调整 [Yao 等，2021]。

随着观察性数据中收集的协变量越来越多，我们会面对不同类型的协变量，例如混杂因素（已观测和隐藏的）、调整变量、工具变量和伪变量。然而，更多数据并不意味着更好的估计结果。因此，本节将从三个方面讨论这一主题：（1）特征选择；（2）特征表征解耦；（3）隐藏混杂因素。

4.2.1 特征选择

协变量调整的一种常见方法是使用倾向得分，即根据背景协变量，个体被分配到某一特定处理水平的概率 [Rosenbaum 和 Rubin，1983]。在协变量调整中，尽管纳入所有混杂因素至关重要，但这并不意味着纳入更多变量总是更好 [Chu 等，2020；格陵兰，2008；Schisterman 等，2009]。例如，对与处理分配相关、但除通过处理之外与结果无关的工具变量进行条件化，可能会增加因果效应估计的偏倚和方差 [Myers 等，2011]。对能够预测结果、但与处理分配无关的调整变量进行条件化，无需消除偏倚，却能降低估计因果效应的方差

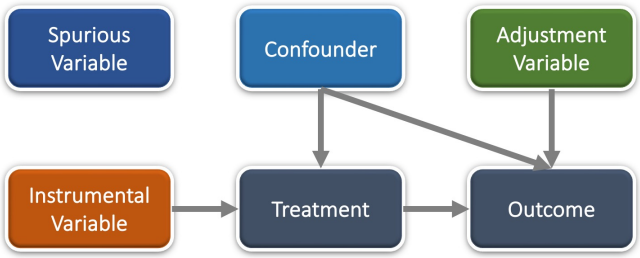


图4：处理、混杂因素、结果、工具变量、调整变量和伪变量之间的关系。

的因果效应估计 [Sauer 等，2013]。因此，纳入工具变量会在不改善偏倚的情况下增大标准误，而纳入调整变量则能提高精度 [Shortreed 和 Ertefaie，2017；Wilson 和 Reich，2014；Lin等，2015；Zigler 和 Do- minici，2014]。

[Kuang 等，2017] 提出了一种数据驱动的变量分解（D2VD）算法，该算法利用数据驱动的方法自动区分混杂因素和调整变量，并提出正则化集成回归模型，以同时实现混杂因素分离和平均处理效应估计。[Chu 等，2023] 利用表示学习和自适应组 LASSO，提出了一种基于深度自适应变量选择的倾向得分方法（DAVSPS）。DAFSPS 的核心思想是结合表示学习的数据驱动学习能力与自适应组 LASSO 的变量选择一致性，通过选择混杂因素和调整变量，同时移除工具变量和伪变量，从而改进倾向得分的估计。DAVSPS 框架包含两个主要步骤：使用组 LASSO 进行结果预测，以及使用自适应组 LASSO 进行倾向评分估计。第一步使用带有组 LASSO 的深度神经网络（DNN）预测结果，并获得每个协变量的初始权重估计。第二步使用 DNN 分类模型结合自适应组 LASSO 估计倾向得分，其中加权惩罚项基于第一步获得的初始权重估计。因此，DAVSPS 可以自动选择能够预测结果的协变量（即混杂因素和调整变量），同时在倾向得分估计中移除与结果无关的协变量（即工具变量和伪变量）。

4.2.2 特征表征解耦

对于简单的特征表征解耦，即区分混杂因素和非混杂因素，[Wu 等人，2020] 提出了一种协同学习框架，通过学习混杂因素和非混杂因素的分解表示来识别混杂因素，并采用样本重新加权技术平衡混杂因素。随后，一种更细致的解耦表征学习方法 [Has- sanpour 和 Greiner，2020] 将协变量分解为三个潜在因子，包括工具 Γ、混杂 Δ和调整 ϒ因素。他们假设随机变量 X 服从一个未知的联合概率分布

$Pr(X|\Gamma, \Delta, \Upsilon)$，处理 T服从 $Pr(T|\Gamma, \Delta)$，结果 Y服从 $Pr(Y|\Delta, \Upsilon)$，其中 Γ、 Δ和 Υ 代表生成观察性数据集的三个潜在因子。相应地，选择偏差由因子 Γ 和 Δ 引起，其中 Δ 代表 T 与 Y之间的混杂因素。 [Zhang 等人， 2021] 提出了一种变分推断方法，用于从观测变量中同时推断潜在因子，将这些因子解耦为分别对应工具因素、混杂因素和调整因素的三个互不相交的集合，并利用解耦后的因素进行处理效应估计。然而，如何精确学习潜在的解缠因素仍是一个有待解决的问题。具体而言，先前的方法可能无法获得相互独立的解缠因素，而这对于识别处理效应至关重要。 [Cheng 等人， 2022] 提出了通过互信息最小化实现反事实回归的解缠表示（MIM-DRCFR），该方法采用多任务学习框架，在学习潜在因子时共享信息，并引入互信息最小化学习准则，以确保这些因子相互独立。

4.2.3 隐藏混杂因素

由于在实践中不可能识别出所有混杂因素，强可忽略性假设通常难以成立。如果混杂因素是隐藏的或未测量的，在一般情况下，若无额外假设，就不可能估计处理对结果的影响 [Pearl, 2009b]。借助大数据，我们可以通过探究隐藏或未测量的混杂因素、其代理变量、处理和结果之间的关系，找到这些混杂因素的代理变量。例如，因果效应变分自编码器（CEVAE） [Louizos 等，2017] 基于变分自编码器（VAE），遵循使用代理变量进行推断的因果结构。它可以同时估计用于概括混杂因素的未知潜在空间以及因果效应。

此外，近期研究表明，数据中的辅助网络信息可用于减轻混杂偏差。网络信息是非规则数据的一种高效结构化表征，在现实世界中无处不在。得益于各种图神经网络强大的表征能力，网络化数据近年来日益受到关注 [Kipf 和 Welling，2016年；Veli˘ckovi´c 等，2017年；Velickovic 等，2019年；Jiang 等， 2019]。因此，网络信息也可用于帮助识别隐藏混杂因素的模式。Guo 等提出了一种网络去混杂器 [，通过结合图卷积网络 [Kipf 和 Welling， 2016] 与反事实回归 [Shalit 等， 2017]来识别隐藏混杂因素。与节点分类和链接预测等传统图学习任务中的网络化数据不同，因果推断问题中的网络化数据具有其特殊性，即网络结构不平衡。 [Chu等提出了一种用于处理效应估计的图信息最大化对抗学习（GIAL）模型，通过识别网络结构中的不平衡，充分利用网络结构来捕获更多信息。然而，上述研究假设观察性数据及其相互关系是静态的，但在现实中，二者都会随时间不断演变，即形成随时间演变的网络化观察数据。[Ma 等提出了一种新颖的因果推断框架——动态网络化观察数据去混杂器（DNDC），通过将当前观察性数据和历史信息映射到同一表示空间，学习隐藏混杂因素随时间变化的动态表征。

4.3 结果

利用观察性数据估计处理效应，首要挑战是处理不同治疗选项下协变量的不平衡，这种不平衡由选择偏差造成。近期的因果效应估计方法 [Johansson等，2016年；Shalit 等，2017年；Li 和 Fu， 2017] 通过采用Wasserstein距离和最大均值差异等分布距离来强制实现领域不变性，与领域适应建立了紧密联系。受度量学习启发，一些方法 [Yao 等， 2018]利用困难样本学习保留局部相似性信息的表征，并平衡数据分布。在 [Zhang 等， 2020], 作者认为，分布不变性往往是过于严格的要求，因此提出使用反事实方差来衡量领域重叠。受信息论启发，[Chu 等，2022a] 提出学习 Infomax 和领域无关表征。该方法利用全局特征表示与个体特征表示之间的互信息，以及特征表示与治疗分配预测之间的互信息，以最大限度地捕捉处理组和对照组共有的预测信息。

对于这些基于潜在结果框架（POF）的领域自适应方法，模型旨在学习域不变表示，即特征的变换，使得处理组和对照组在表示空间中大致无法区分 [Ben-David 等， 2007]。尽管领域自适应在POF中广受欢迎，但领域自适应的充分支持假设[Ben-David and Urner， 2012] 揭示了在面对领域支持集偏移时，学习不变表示存在内在局限性 [Liu 等，2021]。正值性假设是因果效应估计中的一项重要假设，并为领域自适应提供了强充分支持假设 [Zhao 等，2019年；Johansson 等， 2019]。然而，由于以下两个原因，正值性假设在实践中绝不能保证成立。第一，高维数据通常包含对预测结果而言冗余或无关的信息，但这些信息仍有助于区分处理组和对照组。第二，在不同处理组之间分布不同的变量通常对预测至关重要。

此外，对于 POF 设置下的领域自适应问题，如何寻找用于衡量处理组和对照组之间距离的最优度量仍未得到解决。距离度量的选择高度依赖于数据分布的特征以及用于不平衡缓解的正则化项的超参数。尤其是，

即使具有相同的选择偏差，不同度量在平衡数据分布方面也未达成共识 [Zhang等， 2020]。

最后，我们认为，将表征正则化为域不变的做法过于严格，尤其是在不同域（例如处理组和对照组）存在部分重叠的情况下 [Zhang 等， 2020]。多项研究表明，仅基于事实数据进行经验风险最小化，其表现优于域不变表征学习算法。因此，无论采用哪种类型的域差异度量指标，强制实现域不变性都很容易去除预测信息，导致预测能力下降 [Alaa 和 Schaar， 2018]。这些观察促使我们放宽正值性假设，发展一种新的统一范式来进行处理效应估计，从而避免在域差异度量指标之间进行选择的困境，同时克服预测信息损失。这是处理效应估计任务中一个富有前景且迫切需要研究的方向。

5 结论

因果推断是一个正在发展的学术研究领域，并已应用于各种工业场景。近年来，机器学习的蓬勃发展为因果推断领域注入了新的活力，不仅推动了原有问题的卓越进展，也带来了新的研究潜力和方向。在本综述中，我们从处理、协变量和结果这三个核心组成部分出发，全面回顾了处理效应估计任务的新兴进展、挑战与机遇。

参考文献

[Alaa 和 Schaar， 2018] Ahmed Alaa 和 Mihaela Schaar。异质性治疗效应估计的局限：实用算法设计指南。载于国际机器学习会议，第 129–138 页，2018年。

[Athey 和 Imbens， 2015] Susan Athey 和 Guido W Im- bens。用于估计异质性因果效应的机器学习方法。统计学，1050(5):1–26，2015年。

[Ben-David 和 Urner， 2012] Shai Ben-David 和 Ruth Urner。论领域自适应的难点及无标签目标样本的效用。载于算法学习理论国际会议，第139–153页。Springer，2012年。[Ben-David 等， 2007] Shai Ben-David、John Blitzer、Koby Crammer 和 Fernando Pereira。领域自适应的表征分析。载于神经信息处理系统进展，第137–144页，2007年。[Bica 等， 2020] Ioana Bica、James Jordon 和 Mihaela Van Der Schaar。使用生成对抗网络估计连续值干预的效应。神经信息处理系统进展，33：16434–16445，2020年。[Castro 等， 2020] Daniel C Castro、Ian Walker 和 Ben Glocker。因果关系在医学影像中至关重要。《自然·通讯》，11(1)：3673，2020年。

[Chakraborty 和 Murphy， 2014] Bibhas Chakraborty 和 Susan A Murphy。动态治疗方案。统计学及其应用年度评论，1：447–464，2014年。[Cheng 等， 2022] Mingyuan Cheng、Xinru Liao、Quan Liu、Bin Ma、Jian Xu 和 Bo Zheng。通过互信息最小化学习用于反事实回归的解缠表征。载于第*45*届*ACM SIGIR*信息检索研究与发展国际会议论文集，第1802–1806页，2022年。[Chu 和 Li， 2023] Zhixuan Chu 和 Sheng Li。持续处理效应估计：挑战与机遇。*arXiv*预印本 *arXiv:2301.01026*，2023年。

[Chu 等， 2020] Zhixuan Chu、Stephen L Rathbun 和 Sheng Li。在用于处理效应估计的选择性平衡表征空间中进行匹配。载于第*29*届*ACM*信息与知识管理国际会议，第 205–214 页，2020。

[Chu 等， 2021] Zhixuan Chu、Stephen L Rathbun 和 Sheng Li。利用图信息最大化对抗学习，通过网络化观察数据估计处理效应。载于第*27*届*ACM SIGKDD*知识发现与数据挖掘会议，第 176–184 页，2021年。

[Chu 等，2022a] Zhixuan Chu、Stephen L Rathbun 和 Sheng Li。利用真实世界数据学习信息最大化与领域无关表示进行因果效应推断。载于*2022*年*SIAM*数据挖掘国际会议（*SDM*）论文集，第433–441页。SIAM，2022年。

[Chu 等，2022b] Zhixuan Chu、Stephen L Rathbun 和 Sheng Li。用于篮式试验中处理效应估计的多任务对抗学习。载于健康、推断与学习会议，第79–91页。PMLR，2022年。

[Chu 等， 2023] Zhixuan Chu、Mechelle Claridy、Jose Cordero、Sheng Li 和 Stephen L Rathbun。使用深度自适应变量选择估计倾向得分。载于*2023*年*SIAM*数据挖掘国际会议（*SDM*）论文集。SIAM，2023年。

[Cui 等, 2020] Peng Cui、Zheyan Shen、Sheng Li、Liuyi Yao、Yaliang Li、Zhixuan Chu 和 Jing Gao。因果推断与机器学习相遇。载于第 *26* 届 *ACM SIGKDD* 国际知识发现与数据挖掘会议论文集，第 3527–3528 页，2020。

[Feder 等, 2022] Amir Feder、Katherine A Keith、Emaad Manzoor、Reid Pryzant、Dhanya Sridhar、Zach Wood-Doughty、Jacob Eisenstein、Justin Grimmer、Roi Reichart、Margaret E Roberts 等。自然语言处理中的因果推断：估计、预测、解释及其他。计算语言学协会学报，10：1138–1158，2022年。

[格陵兰, 2008] Sander Greenland. 特邀评论：在控制多个混杂因素时，变量选择与收缩的比较。*American journal of epidemiology*，167(5):523–529，2008年。

[Guo等， 2018] Ruocheng Guo、Lu Cheng、Jundong Li、P Richard Hahn 和 Huan Liu。《利用数据进行因果关系学习的综述：问题与方法》。*arXiv*预印本 *arXiv:1809.09337*，2018年。

[Guo等， 2019] Ruocheng Guo、Jundong Li 和 Huan Liu。基于网络化观察数据学习个体处理效应。*arXiv* 预印本 *arXiv:1906.03485*，2019年。

[Harada 和 Kashima， 2021] Shonosuke Harada 和 Hisashi Kashima。Graphite：估计图结构化处理的个体效应。载于第*30*届 *ACM* 国际信息与知识管理会议论文集，第659–668页，2021年。

[Hassanpour 和 Greiner， 2020] Negar Hassanpour 和 Russell Greiner。为反事实回归学习解缠表示。载于国际学习表征会议，2020。[Hu 等， 2020] Liangyuan Hu、Chenyang Gu、Michael Lopez、Jiayi Ji 和 Juan Wisnivesky。对观察性研究中具有二元结局的多重处理进行因果效应估计。医学研究中的统计方法，29(11):3218–3234，2020。[Imbens 和 Rubin， 2015] Guido W Imbens 和 Donald B Rubin。统计学、社会科学与生物医学科学中的因果推断。剑桥大学出版社，2015年。[Jerzak等， 2022] Connor T Jerzak、Fredrik Johansson 和 Adel Daoud。基于图像的处理效应异质性。*arXiv* 预印本 *arXiv:2206.06417*，2022年。[Jiang等， 2019] Xiaodong Jiang、Pengsheng Ji 和 Sheng Li。Censnet：图神经网络中带边节点切换的卷积。载于国际人工智能联合会议，第2656–2662页，2019年。[Johansson等， 2016] Fredrik Johansson、Uri Shalit 和 David Sontag。为反事实推断学习表征。载于国际机器学习会议，第3020–3029页，2016年。[Johansson等， 2019] Fredrik D Johansson、David Sontag 和 Rajesh Ranganath。域不变表示中的支持与可逆性。载于第*22*届国际人工智能与统计会议，第527–536页。PMLR，2019年。[Kaddour等， 2021] Jean Kaddour、Yuchen Zhu、Qi Liu、Matt J Kusner 和 Ricardo Silva。结构化处理的因果效应推断。神经信息处理系统进展，34:24841–24854，2021年。[Kipf 和 Welling， 2016] Thomas N Kipf 和 Max Welling。利用图卷积网络进行半监督分类。*arXiv* 预印本 *arXiv:1609.02907*，2016年。[Kuang等， 2017] Kun Kuang、Peng Cui、Bo Li、Meng Jiang、Shiqiang Yang 和 Fei Wang。利用数据驱动变量分解估计处理效应。载于第三十一届 *AAAI* 人工智能会议论文集，2017年。

[Li 和 Fu， 2017] Sheng Li 和 Yun Fu。基于平衡的非线性表征进行匹配以估计处理效应。载于 NIPS，2017年。[Lin 等人， 2015] Wei Lin、Rui Feng 和 Hongzhe Li。高维工具变量回归的正则化方法及其在遗传基因组学中的应用。《美国统计学会杂志》，110(509):270–288，2015年。[Liu 等人， 2021] Hong Liu、Jianmin Wang 和 Mingsheng Long。用于领域自适应的循环自训练。arXiv 预印本 arXiv:2103.03571，2021年。[Liu 等人， 2022] Qiao Liu、Zhongren Chen 和 Wing Hung Wong。CausalEGM：一种通过编码生成式建模实现的通用因果推断框架。arXiv 预印本 arXiv:2212.05925，2022年。[Lopez 和 Gutman， 2017] Michael J Lopez 和 Roee Gutman。多重处理下的因果效应估计：综述与新思路。Statistical Science，第432–454页，2017年。[Louizos 等人， 2017] Christos Louizos、Uri Shalit、Joris Mooij、David Sontag、Richard Zemel 和 Max Welling。利用深度潜变量模型进行因果效应推断。arXiv 预印本 arXiv:1705.08821，2017年。[Ma 和 Li， 2022] Jing Ma 和 Jundong Li。利用图学习因果关系。AI Magazine，43(4):365–375，2022年。[Ma 等人， 2021] Jing Ma、Ruocheng Guo、Chen Chen、Aidong Zhang 和 Jundong Li。在动态环境中利用网络化观察性数据消除混杂。载于第14届 ACM国际网络搜索与数据挖掘会议论文集，第166–174页，2021年。[McCaffrey 等人， 2013] Daniel F McCaffrey、Beth Ann Griffin、Daniel Almirall、Mary Ellen Slaughter、Rajeev Ramchand 和 Lane F Burgette。使用广义提升模型估计多重处理倾向得分的教程。Statistics in Medicine，32(19):3388–3414，2013年。[Myers 等人， 2011] Jessica A Myers、Jeremy A Rassen、Joshua J Gagne、Krista F Huybrechts、Sebastian Schneeweiss、Kenneth J Rothman、Marshall M Joffe 和 Robert J Glynn。调整工具变量对效应估计值偏倚和精度的影响。《流行病学》，174(11):1213–1222，2011年。[Nie 等人， 2021] Lizhen Nie、Mao Ye、Qiang Liu 和 Dan Nicolae。VCNet 与函数靶向正则化：学习连续处理的因果效应。arXiv 预印本 arXiv:2103.07861，2021年。[Pawlowski 等人， 2020] Nick Pawlowski、Daniel Coelho de Castro 和 Ben Glocker。用于可处理反事实推断的深度结构因果模型。《神经信息处理系统进展》，33:857–869，2020。[Pearl， 2000] Judea Pearl。《因果关系：模型、推理与推断》，第29卷。Springer，2000年。[Pearl，2009a] Judea Pearl。统计学中的因果推断：概述。Statistics Surveys，3:96–146，2009年。

[Pearl，2009b] Judea Pearl。因果关系。剑桥大学出版社，2009年。

[Rosenbaum 和 Rubin， 1983] Paul R Rosenbaum 和 Don- ald B Rubin。倾向得分在观察性研究中估计因果效应所发挥的核心作用。*Biometrika*，70(1):41–55，1983年。

[Rubin， 1974] Donald B Rubin。在随机研究和非随机研究中估计处理的因果效应。《教育心理学杂志》，66(5):688，1974年。[Saini等， 2019] Shiv Kumar Saini、Sunny Dhamnani、Akil Arif Ibrahim 和 Prithviraj Chavan。使用带有任务嵌入的深度生成模型估计多种处理的效应。发表于万维网大会，第 1601–1611 页，2019年。[Sauer等， 2013] Brian C Sauer、M Alan Brookhart、Ja- son Roy 和 Tyler VanderWeele。非实验性比较效果研究中协变量选择综述。《药物流行病学与药物安全》，22(11):1139–1145，2013年。[Schisterman等， 2009] Enrique F Schisterman、Stephen R Cole 和 Robert W Platt。流行病学研究中的过度调整偏倚与不必要的调整。《流行病学》（剑桥，马萨诸塞州），20(4):488，2009年。

[Schwab 等人， 2018] Patrick Schwab、Lorenz Linhardt 和 Walter Karlen。《Perfect Match：一种利用神经网络学习反事实推断表征的简单方法》。*arXiv* 预印本 *arXiv:1810.00656*，2018年。

[Schwab 等人， 2020] Patrick Schwab、Lorenz Linhardt、Ste- fan Bauer、Joachim M Buhmann 和 Walter Karlen。学习反事实表征以估计个体剂量反应曲线。载于*AAAI*人工智能会议论文集，第 34 卷，第 5612–5619 页，2020。[Shalit等人， 2017] Uri S halit、Fredrik D Johansson 和 David Sontag。个体处理效应估计：泛化界与算法。载于国际机器学习会议，第 3076–3085 页。PMLR，2017。[Shi 等人， 2019] Claudia Shi、David Blei 和 Victor Veitch。调整神经网络以估计处理效应。神经信息处理系统进展，32，2019。[Shortreed 和 Ertefaie， 2017] Susan M Shortreed 和 Ashkan Ertefaie。结局自适应 Lasso：因果推断的变量选择。《生物统计学》，73(4)：1111–1122，2017。[Splawa-Neyman等人， 1990] Jerzy Splawa-Neyman、Dorota M Dabrowska 和 TP Speed。概率论在农业试验中的应用：原理探讨论文，第 9 节。*StatisticalScience*，第 465–472 页，1990。[Stuart， 2010] Elizabeth A Stuart。因果推断的匹配方法：综述与展望。统计学

：数理统计学会评论期刊，25(1)：1，2010。[Veli˘ckovi´c 等人， 2017] Petar Veli˘ckovi´c、Guillem Cucurull、Arantxa Casanova、Adriana Romero、Pietro Lio 和 Yoshua Bengio。图注意力网络。arXiv 预印本 arXiv:1710.10903，2017年。[Velickovic 等人， 2019] Petar Velickovic、William Fedus、William L Hamilton、Pietro Li`o、Yoshua Bengio 和 R Devon Hjelm。深度图信息最大化。载于国际学习表征会议（海报），2019。[Wilson 和 Reich， 2014] Ander Wilson 和 Brian J Reich。通过惩罚可信区域选择混杂因素。《生物统计学》，70(4)：852–861，2014。[Wu 等人， 2020] Anpeng Wu、Kun Kuang、Junkun Yuan、Bo Li、Runze Wu、Qiang Zhu、Yueting Zhuang 和 Fei Wu。学习用于反事实推断的分解表示。arXiv 预印本 arXiv:2006.07040，2020。[Yao 等人， 2018] Liuyi Yao、Sheng Li、Yaliang Li、Mengdi Huai、Jing Gao 和 Aidong Zhang。基于观察性数据的处理效应估计表征学习。《神经信息处理系统进展》，31，2018年。[Yao 等人， 2021] Liuyi Yao、Zhixuan Chu、Sheng Li、Yaliang Li、Jing Gao 和 Aidong Zhang。因果推断综述。ACM 数据知识发现汇刊（TKDD），15(5)：1–46，2021年。[Yoon 等人， 2018] Jinsung Yoon、James Jordon 和 Mi- haela Van Der Schaar。GANITE：使用生成对抗网络估计个体化处理效应。载于国际学习表征会议，2018年。[Zeng 和 Wang， 2022] Jingying Zeng 和 Run Wang。因果推断框架综述。arXiv 预印本 arXiv:2209.00869，2022年。[Zhang 等人， 2020] Yao Zhang、Alexis Bellot 和 Mihaela van der Schaar。学习用于估计个体化处理效应的重叠表示。arXiv 预印本 arXiv:2001.04754，2020。[Zhang 等人， 2021] Weijia Zhang、Lin Liu 和 Jiuyong Li。利用解耦潜在因子估计处理效应。载于AAAI人工智能会议论文集，第 35 卷，第 10923–10930 页，2021年。[Zhao 等人， 2019] Han Zhao、Remi Tachet Des Combes、Kun Zhang 和 Geoffrey Gordon。关于学习用于领域自适应的不变表征。载于国际机器学习会议，第 7523–7532 页。PMLR，2019年。[Zigler 和 Dominici， 2014] Corwin Matthew Zigler 和 Francesca Dominici。倾向得分估计中的不确定性：用于变量选择和模型平均因果效应的贝叶斯方法。《美国统计学会杂志》，109(505)：95–107，2014。