



階層的空間グラフデータの 因果効果推定

京都大学/理研AIP 竹内孝

2023年11月16日

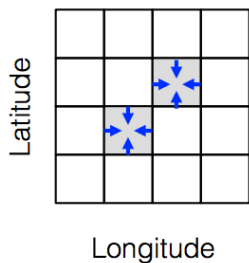
機械学習による人間の選択行動とシミュレーションの新展開WS

@理研AIP

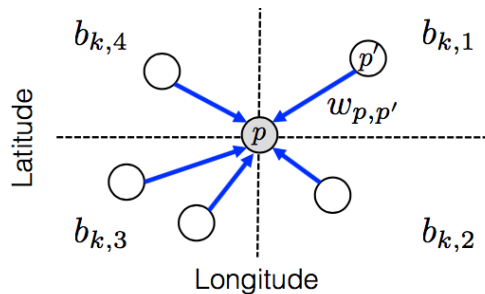
自己紹介

- 所属: 京都大学 大学院情報学研究科 知能情報学コース 講師
理化学研究所 AIP 圧縮情報処理ユニット 客員研究員
- 経歴: 早稲田大学 (修士) → NTT CS研、京都大学 (博士) → 京都大学
- 研究: テンソル分解、時空間データ解析、因果推論、合意形成 etc.

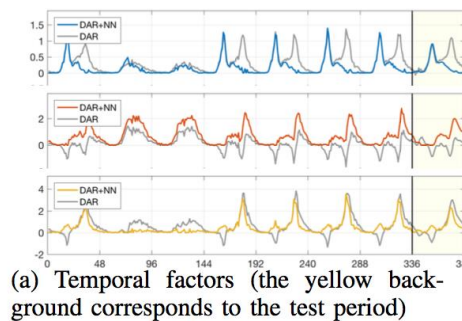
2次元自己回帰
[Dubois et al. TPAMI1985]



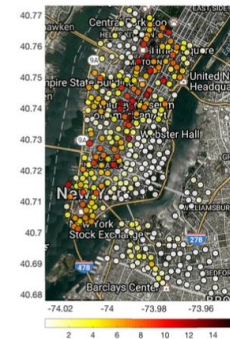
空間自己回帰
[KT-HK-NU. ICDM2017]



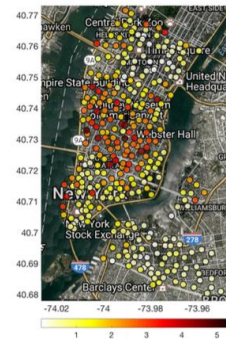
NY市におけるシェアサイクルの潜在需要予測実験



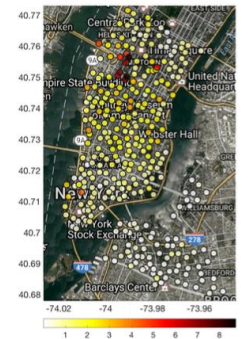
(a) Temporal factors (the yellow background corresponds to the test period)



(b) Spatial factor (blue)



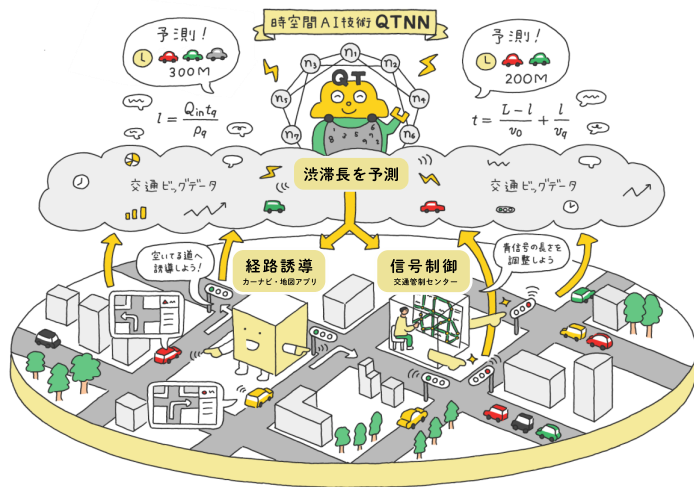
(c) Spatial factor (red)



(d) Spatial factor (yellow)

自己紹介

- 所属: 京都大学 大学院情報学研究科 知能情報学コース 講師
理化学研究所 AIP 圧縮情報処理ユニット 客員研究員
- 経歴: 早稲田大学 (修士) → NTT CS研、京都大学 (博士) → 京都大学
- 研究: テンソル分解、時空間データ解析、因果推論、合意形成 etc.



研究成果 戦略的創造研究推進事業さきがけ
研究領域「信頼されるAIの基盤技術」
研究課題「リアルな意思決定のための時空間因果推論モデルの研究」

交通渋滞を正確に予測するAIを開発 警視庁データで学習、1時間先の誤差40メートル以下

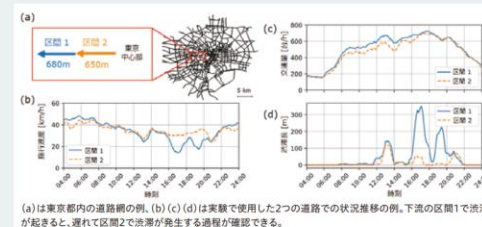
生活と密に関わる交通渋滞は、私たちにストレスを与えるだけでなく、日本国内だけで年間約10兆円もの損出をもたらし、環境にも影響を及ぼす深刻な問題となっています。この問題を解決すべく、AIを用いて交通渋滞がいつ、どこで発生するかを予測できるシステムに世界中から注目が集まっています。

京都大学大学院情報学研究科の竹内孝講師らの研究グループは、交通工学の理論に基づき、ビッグデータを介して混雑の変化と道路網の関係を学習し、渋滞の場所と長さを予測する新たなAIを開発し「QTNN」(Queueing-Theory-based Neural Network)と名付けました。道路の混雑状況と道路網のデータから、深層学習によって交差点ごとの平均速度と交通量を予測し、さらに交通工学で利用される交通流モデルを補正しつつ渋滞長を予測する2段階方式で、より正確な渋滞予測を実現しました。

QTNN開発には警視庁から提供を受けた

データを用い、東京都内1098カ所の道路における「1時間先の渋滞長を2カ月間予測する実験」で、平均誤差40メートル以下という高精度な予測を達成しました。これは、現時点で最先端とされる深層学習手法より予測誤差を12.6パーセントも削減しています。

警視庁が取り組む交通管制システムとして検討が進んでおり、実環境における本格的な運用に向けた評価試験も予定されています。さらに信号制御や道路工事、事故発生などの情報を活用することで、円滑な都市交通の実現が期待されます。



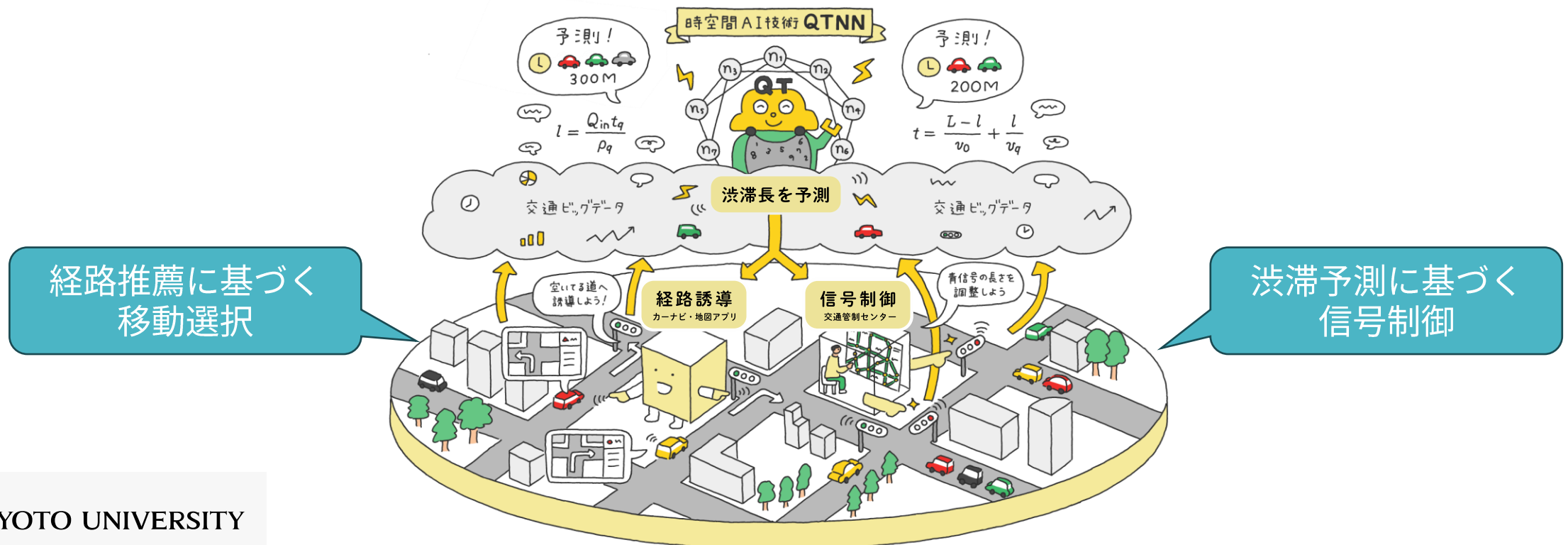
(a)は東京都内の道路網の例、(b)(c)(d)は実験で使用した2つの道路での状況推移の例。下流の区間1で渋滞が起きると、遅れて区間2で渋滞が発生する過程が確認できる。

報道16件
日経新聞、科学新聞、
電気新聞、日刊自動車
新聞、客観日本、
Science Japanなど

ご協力下さった
関係各位に
深謝致します

AIの予測を判断根拠とした意思決定が社会で現実化はたして、その予測は信頼するに足るか？

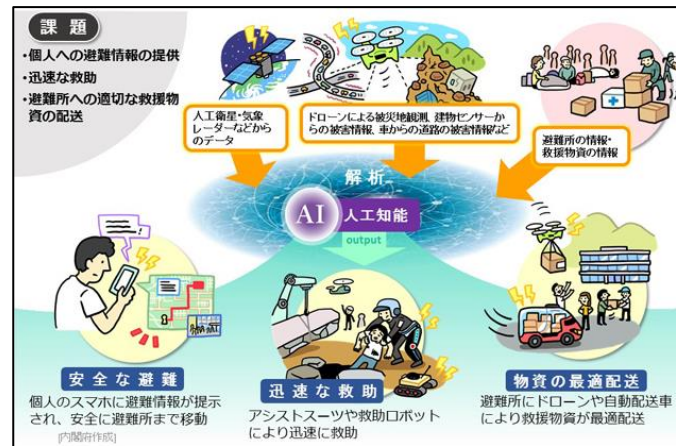
- 都市や自然環境での地理情報データの計測が一般化
- 過去から現在までのデータから将来予測するAI技術が社会で注目
- AI予測を根拠とした意思決定が個人・企業・自治体で幅広く検討



AIの予測を判断根拠とした意思決定が社会で現実化はたして、その予測は信頼するに足るか？

- 都市や自然環境での地理情報データの計測が一般化
- 過去から現在までのデータから将来予測するAI技術が社会で注目
- AI予測を根拠とした意思決定が個人・企業・自治体で幅広く検討

AIの予測を参考に意思決定される可能性がある例



感染者数シミュレーションをAIと呼ぶのはやや行き過ぎた言及とも言える

不正確なAIの予測に基づく意思決定は社会の混乱を招く

- 信頼性の高いAIの実現に対する期待が高まっている
- AI予測を根拠とした意思決定の支援を目指した研究が重要と考える
- 最終的な意思決定はあくまで人間が行うと仮定

不正確なAIの予測が思わぬ事故を引き起こす
例: 自動運転車の経路選択



時空間データを解析するAIの信頼性を高める研究

1. What-if分析をサポートする時空間AI技術
例: ハンドルをどちらに切れば猫は無事？
→意思決定の時空間的な影響を予測するAIが必要



右？左？

2. 予測理由の一部が明らかな時空間AI技術
例: データから予測する過程が分かれば良い？
→シンプルな関係式から予測するAIが必要



グレーボックスなAI

時空間データを解析するAIの信頼性を高める研究

1. What-if分析をサポートする時空間AI技術

例: ハンドルをどちらに切れば猫は無事？

→意思決定の時空間的な影響を予測するAIが必要

竹内はこっちの話を前座でします。少し飛んだ話になります。



右？左？

2. 予測理由の一部が明らかな時空間AI技術

例: データから予測する過程が分かれば良い？

→シンプルな関係式から予測するAIが必要

このあと白上さんが熱く、ソリッドに語ってくれます。



グレーボックスなAI



Causal Effect Estimation on Hierarchical Spatial Graph Data

Koh Takeuchi^{1,3}, Ryo Nishida²,
Hisashi Kashima^{1,3}, Masaki Onishi²
¹Kyoto University, ²AIST, ³RIKEN

What-if分析をサポートする時空間AI技術の研究

- 意思決定により選択可能な変数を因果推論の介入として扱う
- 介入選択による結果の時空間的な変化を予測する深層学習を提案

時空間因果推論モデル



共変量 X の条件付き分布から介入 Z が選択され、結果 Y が観測されるデータ生成モデルを仮定
因果推論におけるポテンシャルアウトカムフレームワークを活用

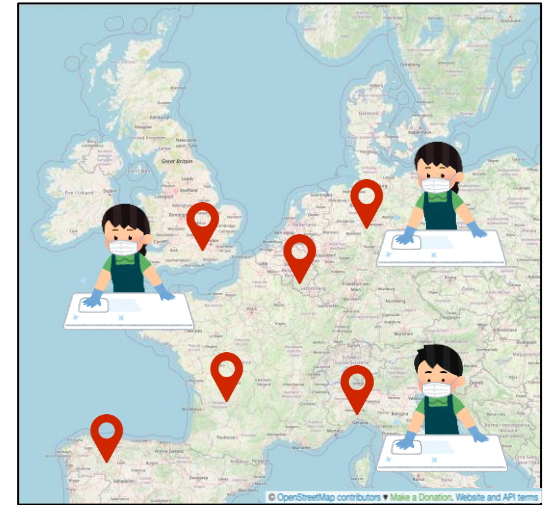
星野 崇宏. 調査観察データの統計科学—因果推論・選択バイアス・データ融合, 岩波書店, 2009.

瀬谷 創, 堤 盛人. 空間統計学: 自然科学から人文・社会科学まで, 朝倉書店, 2014.

J・ラセージ, R・K・ペイス, 各務 和彦, 和合 肇. 入門 空間計量経済学, 勁草書房, 2016.

意思決定において空間の情報を考慮すると アドバンテージが得られると考える例

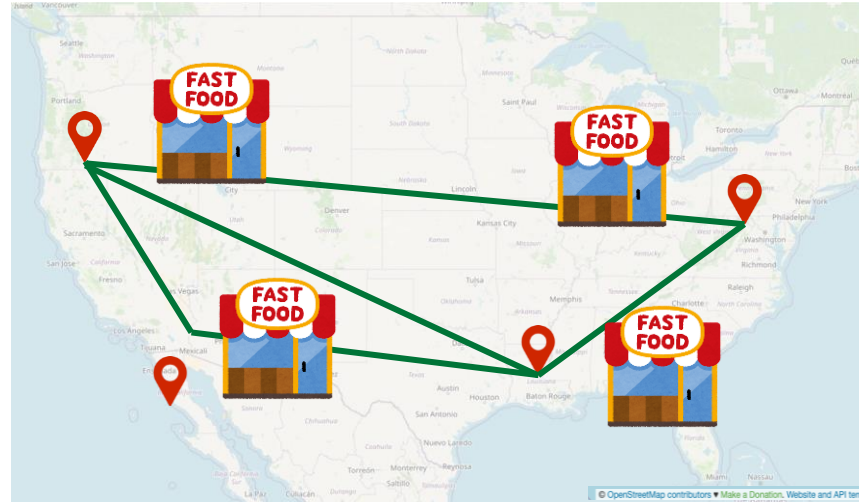
- どの店舗で**キャンペーン**を行うと**売り上げが上がる**？
- どの地域で**食害対策**を行うと**農作物への被害が小さくなる**？
- どの都市で**感染予防活動**を行うと**感染拡大が防げる**？



空間の情報はグラフによって柔軟に表現できる

- グラフは、頂点、辺、頂点特徴量で表現されるデータとする

グラフ = (頂点, 辺, 頂点特徴量)



格子状に配置されていないデータを柔軟に表現

店舗網 = (店舗, 距離, 売り上げ)
+ どこで **キャンペーン** を行った



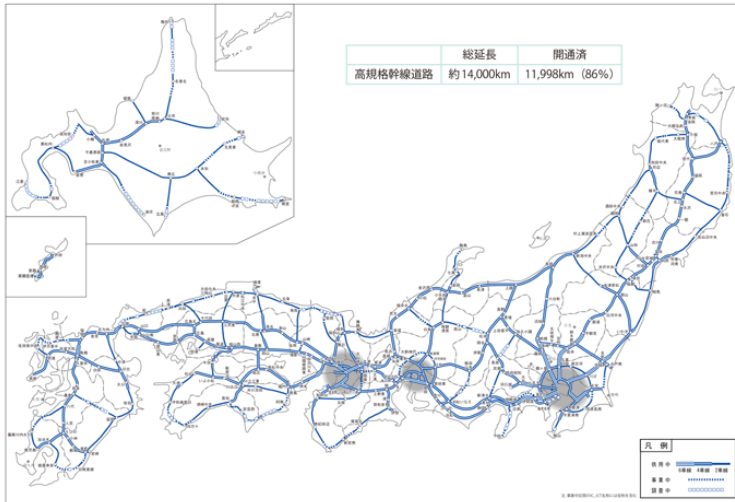
未来の売り上げ

予測可能?

空間の情報はグラフによって柔軟に表現できる

- グラフは、頂点、辺、頂点特徴量で表現されるデータとする

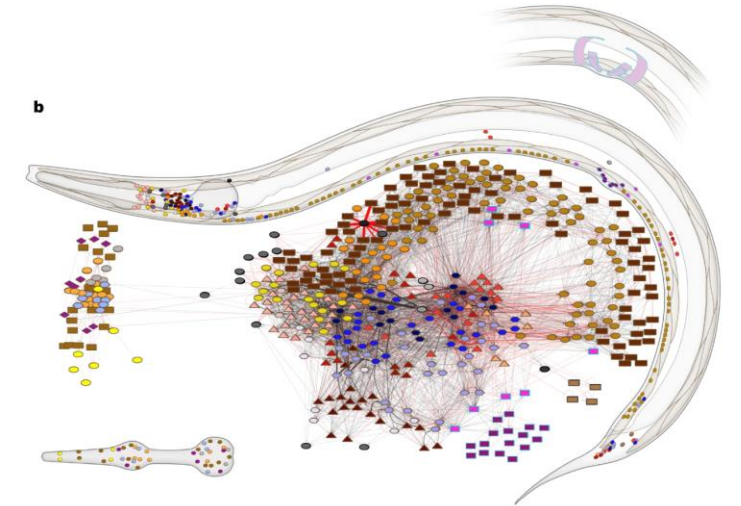
道路網 = (交差点, 道路, 混雑度)



鉄道網 = (駅, 線路, 利用客数)



線虫 = (神経細胞, シナプス, 発火数)



空間データを解析するモデルは長短それぞれ

- **仮説駆動型モデル**（シミュレータなど）
 - データが存在しない場合でも、分析が可能
 - 仮説がデータと一致しない場合には予測精度が劣化
- **データ駆動型モデル**（機械学習や深層学習など）
 - データが存在する場合に、分析が可能
 - 強い仮説を必要としないが、予測結果の解釈性が低い

データ同化、
物理制約深層学習など
合いの子的な技術が注目



仮説駆動型のモデル

- ドメインの知見に基づく方程式
- 現実のデータと乖離？



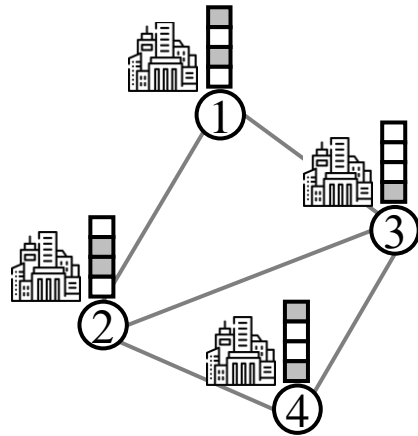
データ駆動型のモデル

- 深層学習とビッグデータを活用
- 高精度だが予測の理由が不明

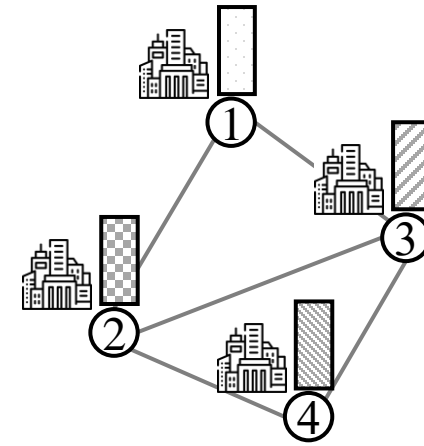
グラフニューラルネット (Graph Neural Networks: GNN) による空間データ解析

- 頂点、辺、頂点特徴量からなるグラフから予測を行うタスクを考える
 - 頂点の分類、辺の有無の予測、頂点特徴量の予測
- グラフニューラルネットワークは、グラフから特徴量を抽出する技術

店舗網 = (店舗, 距離, 過去の売り上げ)



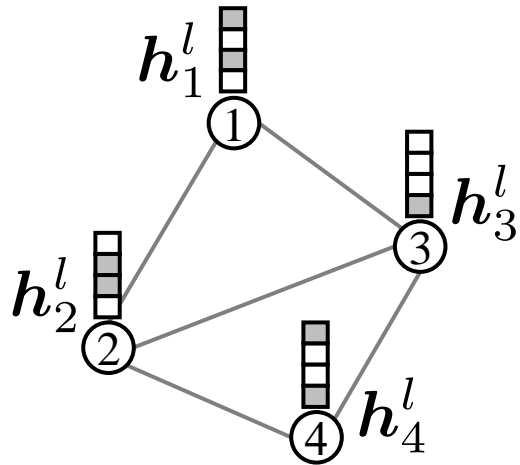
店舗網の特徴量



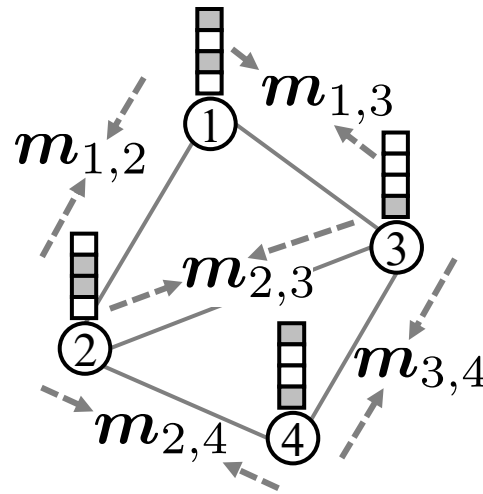
グラフニューラルネットワークは、グラフ上で離れた頂点間の情報が伝搬し、特徴量を抽出する

- GNNの演算は3ステップから成る
 - ①頂点特徴量の変換、②メッセージの抽出、③メッセージの集約
- 上記の演算を繰返し、グラフの構造を反映した特徴量を抽出

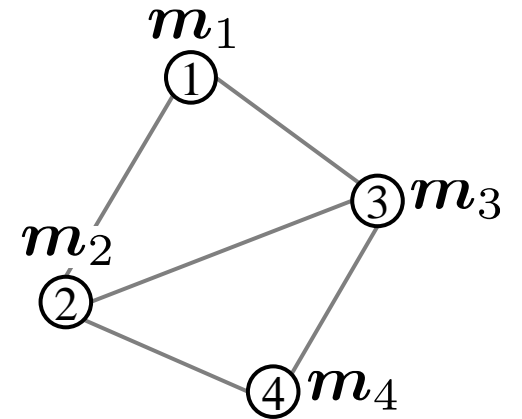
①頂点特徴量の変換



②メッセージの抽出

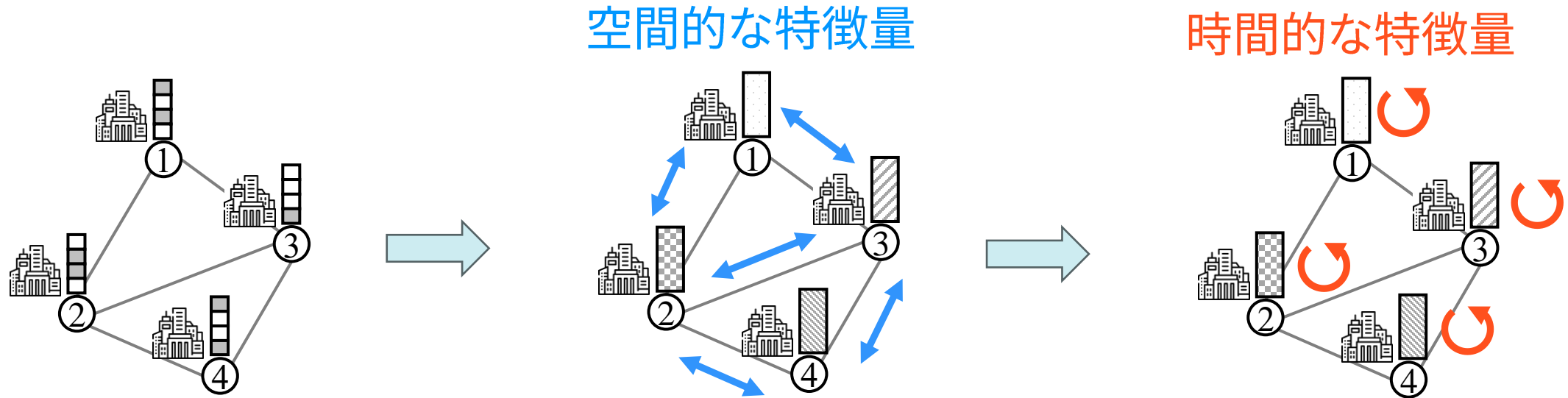


③メッセージの集約



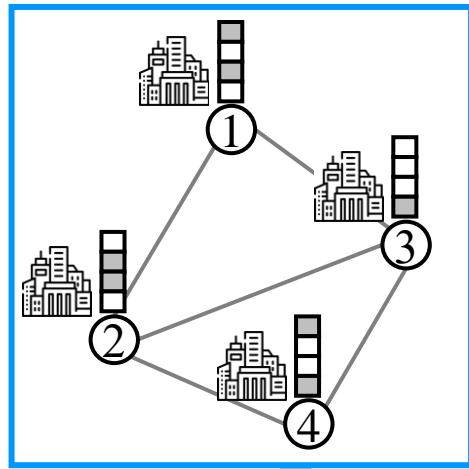
時空間グラフニューラルネット (Spatio-temporal Graph Neural Networks: STGNN)

- 頂点特徴量が時系列データである場合に特化したGNN
 - 空間的な特徴量をGNNで抽出
 - 時間的な特徴量をCNNやRNNやTransformerで抽出
- 上記の操作を繰り返し、時空間的な特徴量を抽出

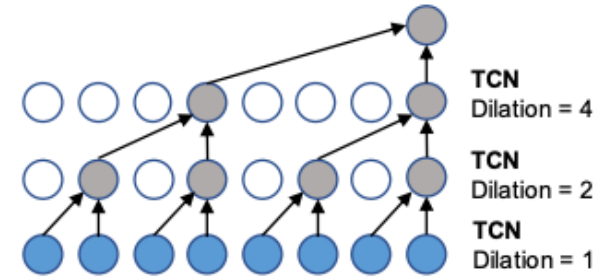
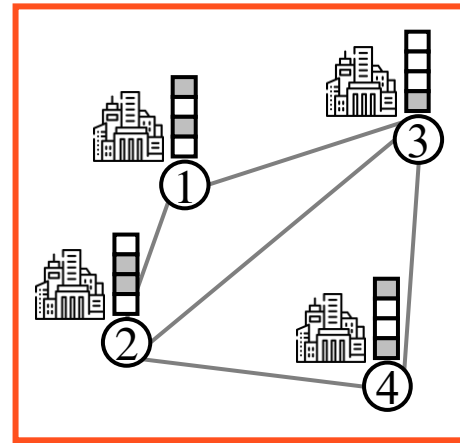


グラフウェーブネット(Graph WaveNet)はノード埋め込みの学習を取り入れたSTGNN

- 人間が構築したグラフは、データの特徴と合わない場合がある
- データからグラフの構造を学習してしまう → ノード埋め込み学習



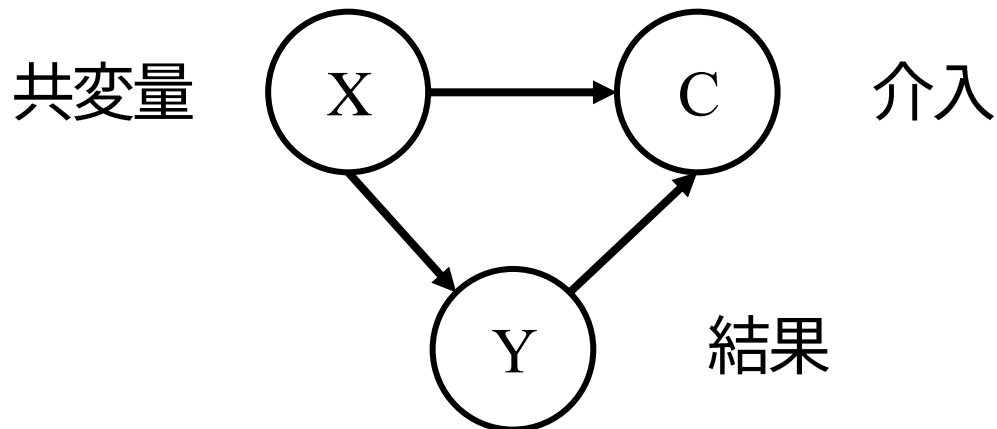
データに合う
グラフを学習



$$\mathbf{z} = \sum_{k=0}^K \mathbf{P}_f^k \mathbf{X} \mathbf{W}_{k1} + \mathbf{P}_b^k \mathbf{X} \mathbf{W}_{k2} + \tilde{\mathbf{A}}_{apt}^k \mathbf{X} \mathbf{W}_{k3}.$$

因果効果推定によるWhat-if分析

- ある状況Xにおいて介入Cを行った場合の結果Yを予測する
 - 介入は意思決定によって操作可能な変数
 - Cを変えると結果Yはどれだけ変わるか？ → 因果効果 or 介入効果
- 観察データ（介入が非RCTで選択）から因果効果推定するモデル
逆傾向スコア、傾向スコアマッチ、二重頑健回帰、二重機械学習、R-Learner

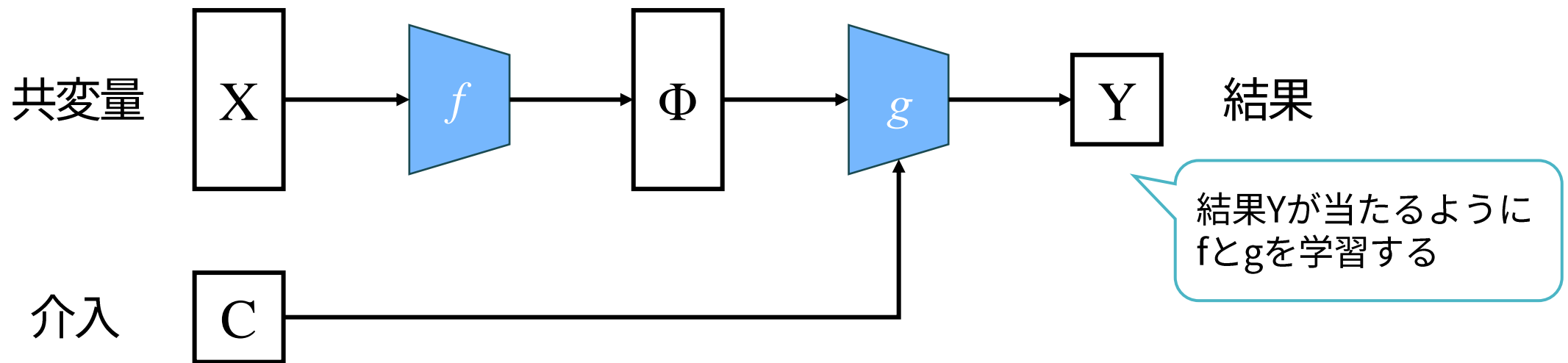


意思決定者の方策 $p(C|X)$ により介入が選択され、反事実が欠損していても、一定の条件を満たした推定量が得られる



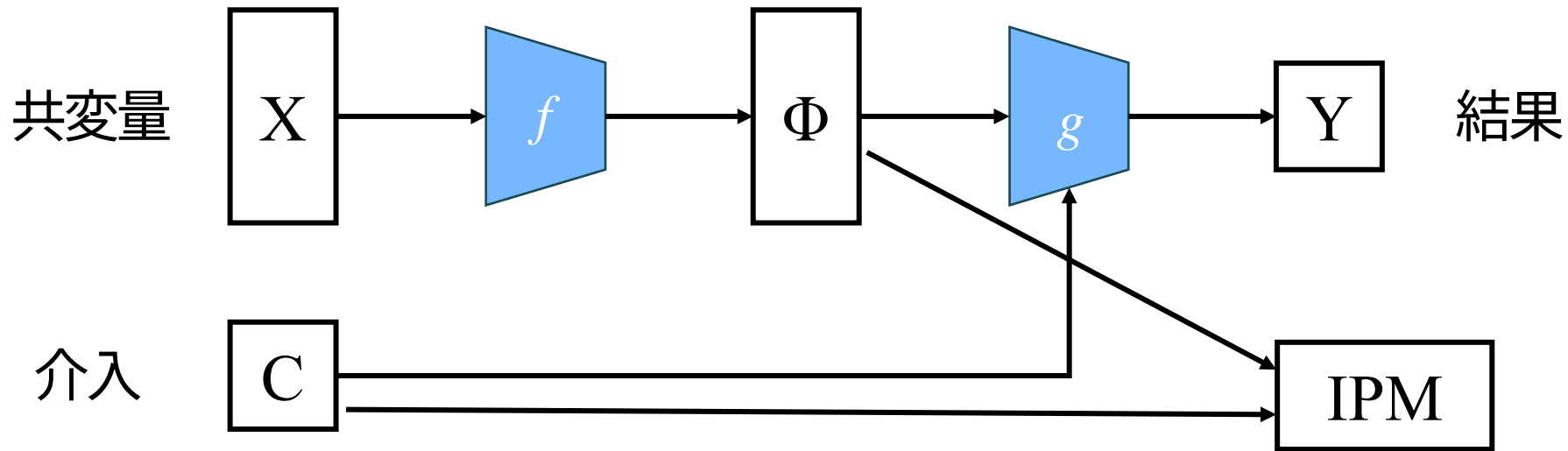
深層学習による因果効果推定

- 深層学習は非線形関数で良い特徴量を抽出する（表現学習）
- 共変量 X と介入 C から良い特徴量 Φ を学習して因果効果推定できる？
 - 反事実回帰モデル (Counterfactual Regression: CFR)



表現学習による因果効果推定

- ランダム化比較実験では、共変量 X と介入 C が独立
→ 共変量 X を見ても介入 C がわからない
- 特徴量 Φ を見ても介入 C がわからなくなれば良いのでは？
→ C で条件付けた Φ の分布が、 C に依らず同一となるよう表現学習



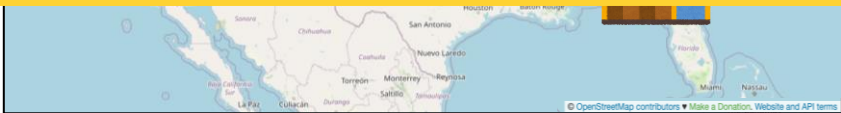
IPM正則化モデルの損失関数は、PEHEの期待値の上限と証明

意思決定において空間の情報を考慮すると アドバンテージが得られると考える例

- どの店舗で**キャンペーン**を行うと**売り上げ**が上がる？
- どの地域で**食害対策**を行うと**農作物への被害**が小さくなる？
- どの都市で**感染予防活動**を行うと**感染拡大**が防げる？



STGNNと因果効果推定を組み合わせるとうまい感じに反事実を埋めて予測してくれるのでは？
(実際、空間計量経済学では傾向スコアを使ったモデルが多数存在)



空間上の因果効果を推定する

Spatial Intervention Neural Network (SINet)

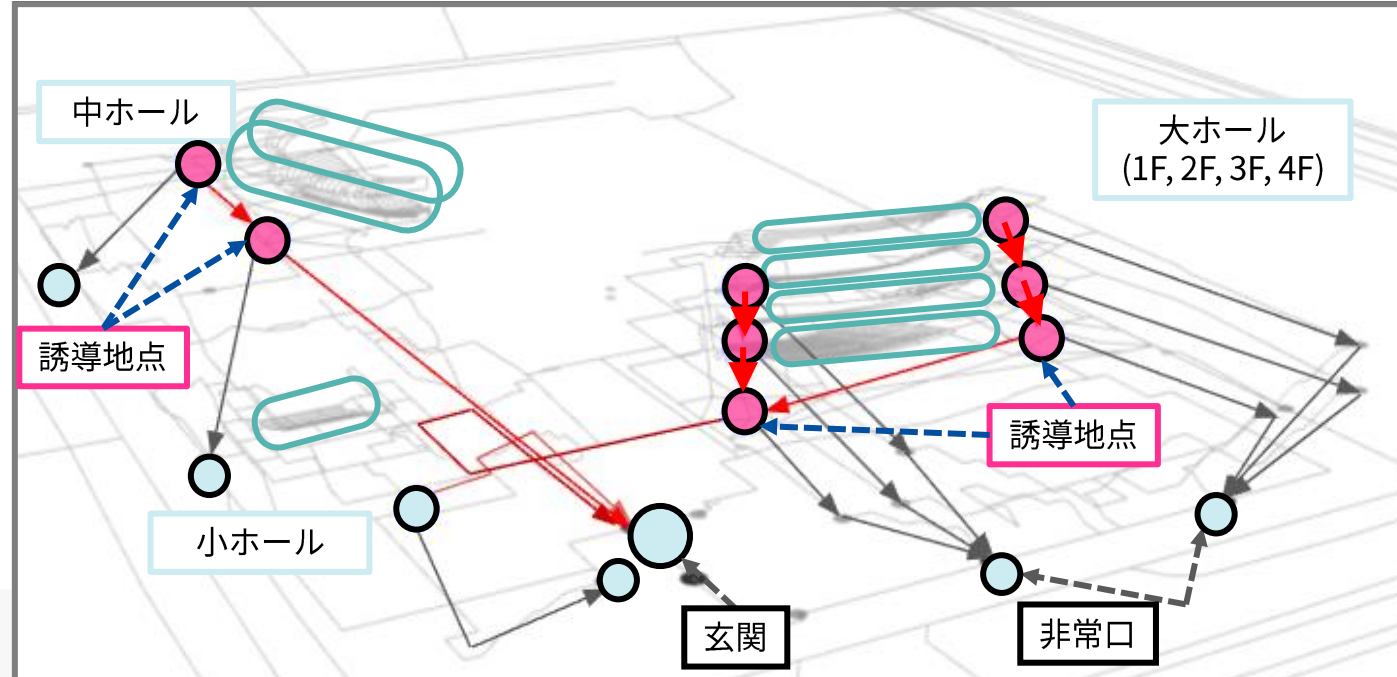
- 空間情報を扱うNNと因果推論を組み合わせ、空間上の介入の因果効果推定を推定するモデルを提案
- データ駆動型モデルであるため、大量のデータからの学習が可能
- 深層学習による柔軟なモデリングが可能



空間上の介入の具体例: 新国立劇場からの群衆避難誘導

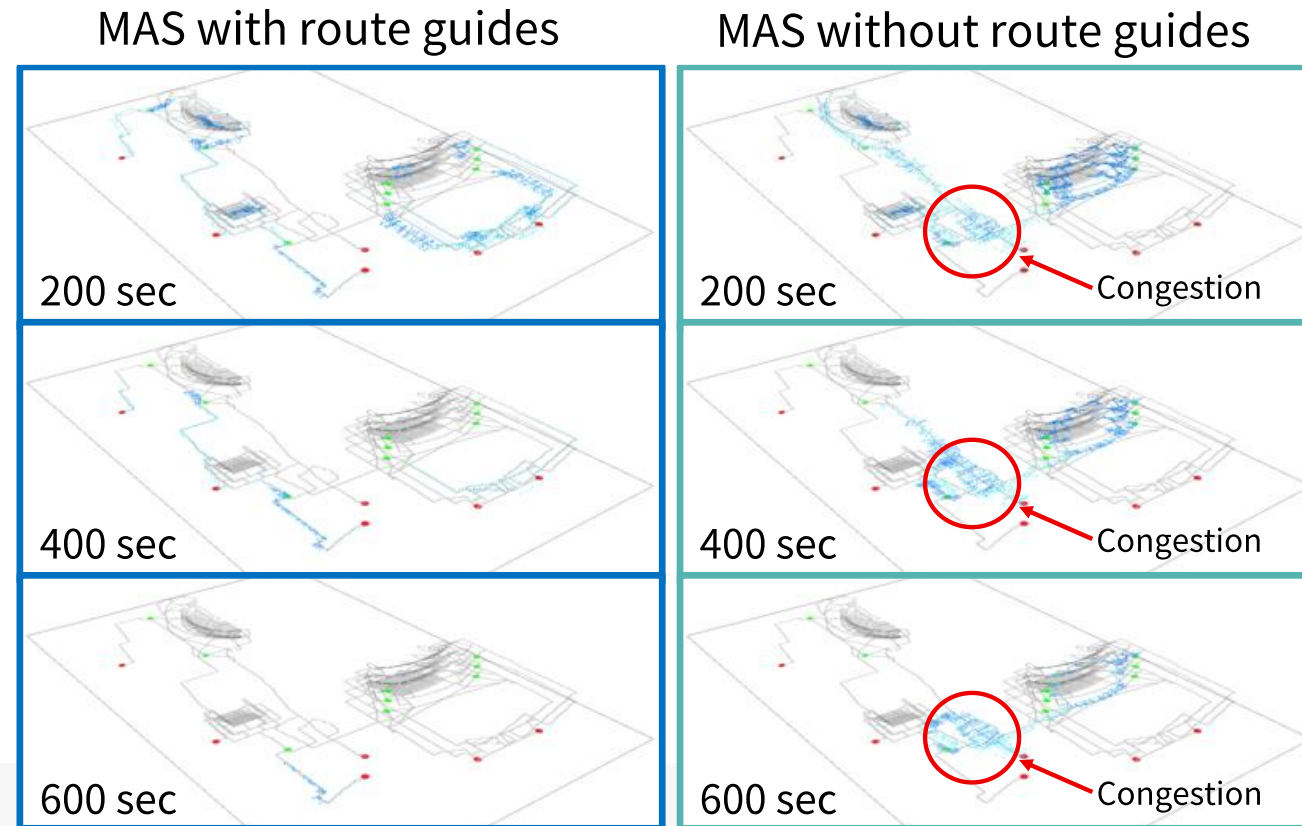
- 群衆位置と建物構造が与えられ、群衆を建物の外に誘導したい
- 誘導地点における非常口への経路誘導を介入として扱う
- どの誘導地点で経路誘導を行うと避難時間が短くなる？

新国立劇場の見取り図



新国立劇場からの群衆避難誘導のシミュレーション例

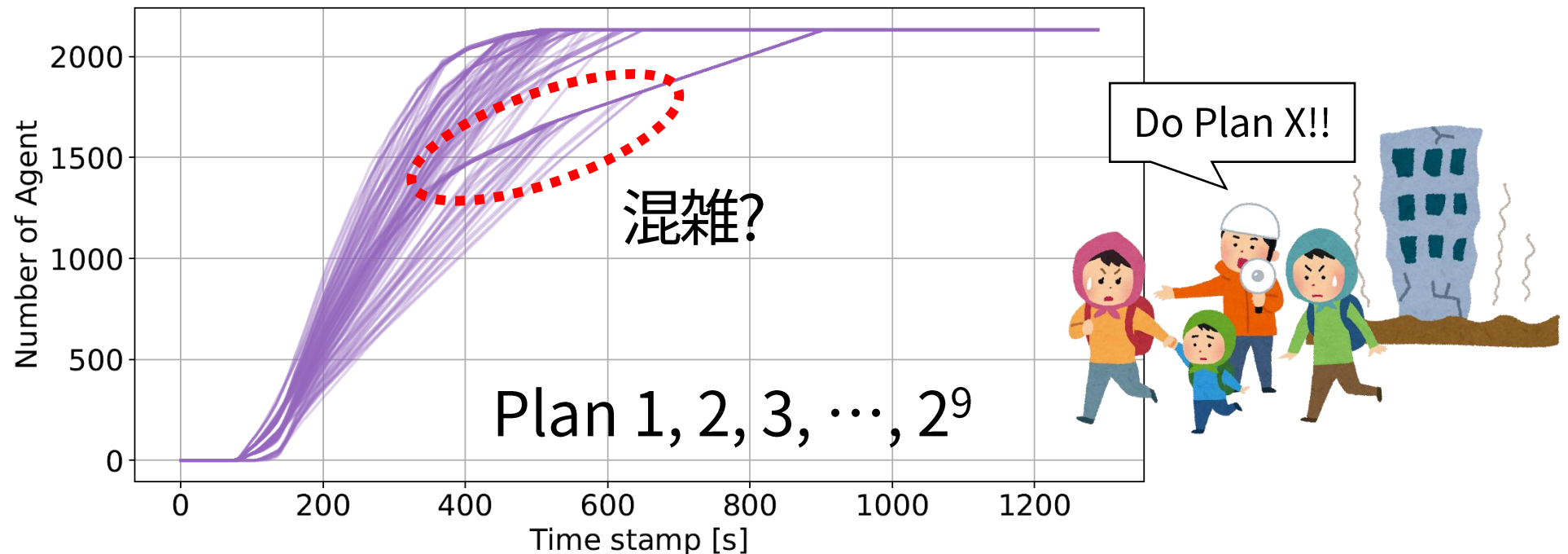
- 実際の避難でのデータ観測や誘導の試行は困難
- マルチエージェントシミュレータによりリアルなデータを生成



避難開始後の避難完了者数の分布を予測対象とする 限られた誘導人員をどこに配置すると良いか？

- 全誘導地点のうち、どこで誘導を行うかで分布は大きく変化する
- 誘導人員などの制約で誘導地点の一部のみで誘導可能と仮定しよう

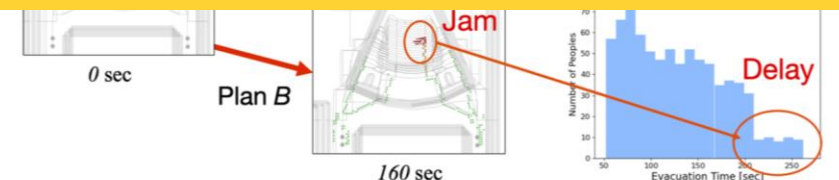
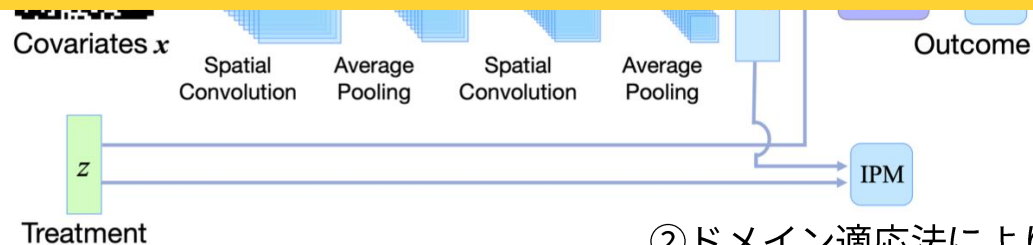
Example evacuation time distributions given route guidance



群衆移動誘導における介入効果推定

- 群衆の位置 X から避難誘導 Z による避難時間 Y を予測する問題
 - 空間特徴量をCNNで抽出し、介入効果推定する手法を提案
 - 新国立劇場の避難シミュレータから生成したデータを用いた実験から介入効果推定の精度向上を確認

劇場の座席は格子状に表現できるが、通路や建物の複雑な構造は表現できない
グラフニューラルネットワークを用いて、より大規模な群衆避難誘導の問題を考える

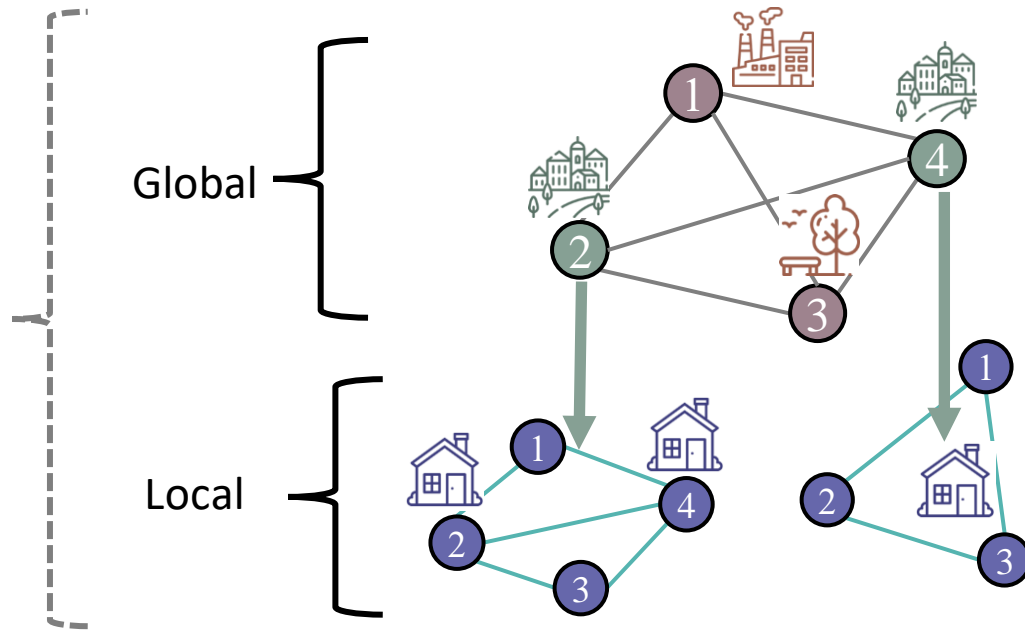


劇場からの避難誘導の有無とドアの開閉選択を介入とし 2^7 通りの組み合わせの介入を想定

共変量と介入の空間上の関係を表現するために階層的な空間グラフを構築する

- 単一のグラフでは遠距離のホール間の関係がうまく抽出できない
 - GNNのオーバースムージングの回避
- グローバルとローカルな空間グラフで表現する

階層的
空間グラフ



介入と共変量の空間グラフ
劇場と誘導地点の様子

共変量の空間グラフ
ホールやフロア毎の様子

辺は地点ごとの距離や移動時間などとする。

空間的因果効果予測のための確率的生成モデル

場所毎に潜在特徴量 Z とローカルグラフ A から共変量 X が観測

グローバルグラフ G と介入 C から結果 Y が観測

[入力]

共変量 $X_n \in [0, 1]^{M_n}$

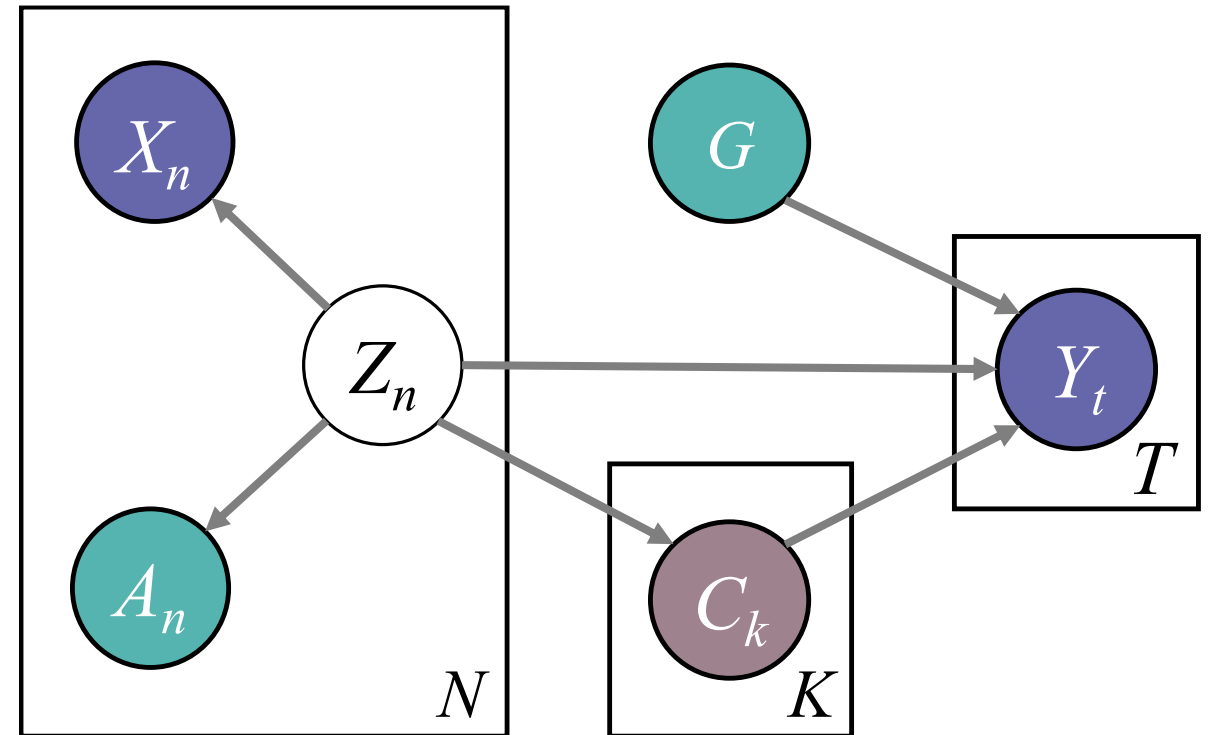
介入 $C_k \in [0, 1]^K$

ローカルグラフ A_n

グローバルグラフ G

[出力]

時刻毎の結果 Y_t ($t=1, \dots, T$)

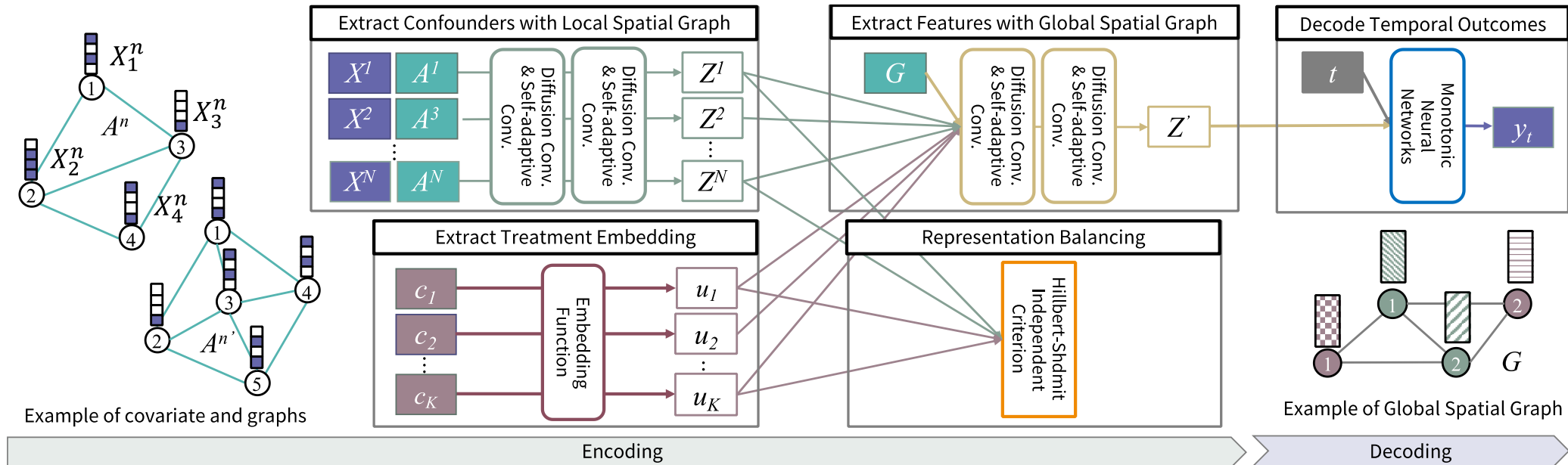


空間的因果効果予測のための確率的生成モデル

階層的な空間グラフ畳み込みモデル

- ローカルなGNNグラフから潜在特徴量 Z を抽出
- グローバルなGNNから介入を考慮した潜在特徴量 Z' を抽出
- 単調増加する時系列データ Y を出力

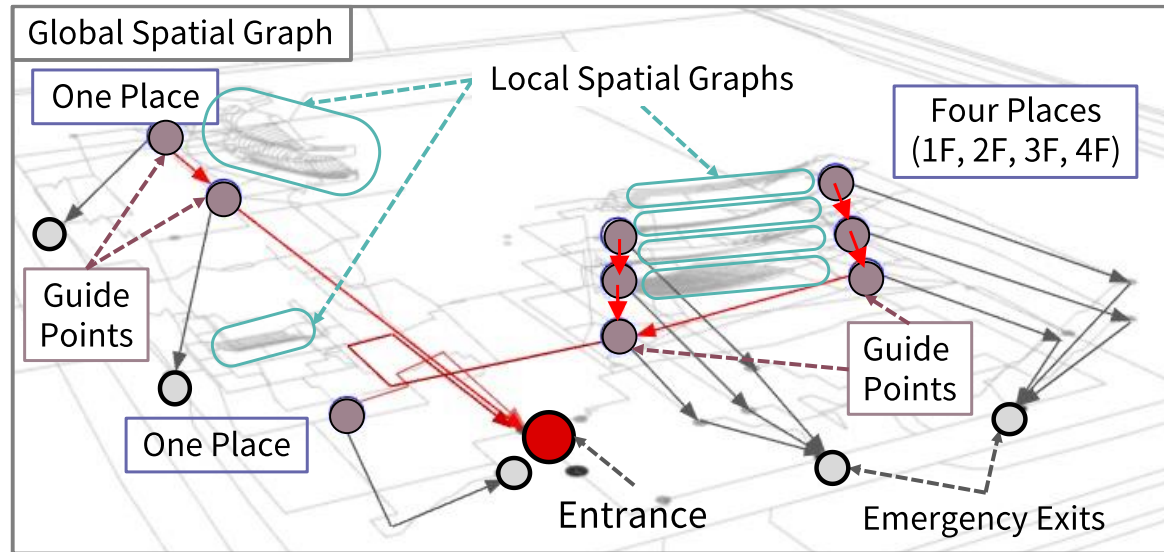
Spatial Intervention Neural Networks (SINet)



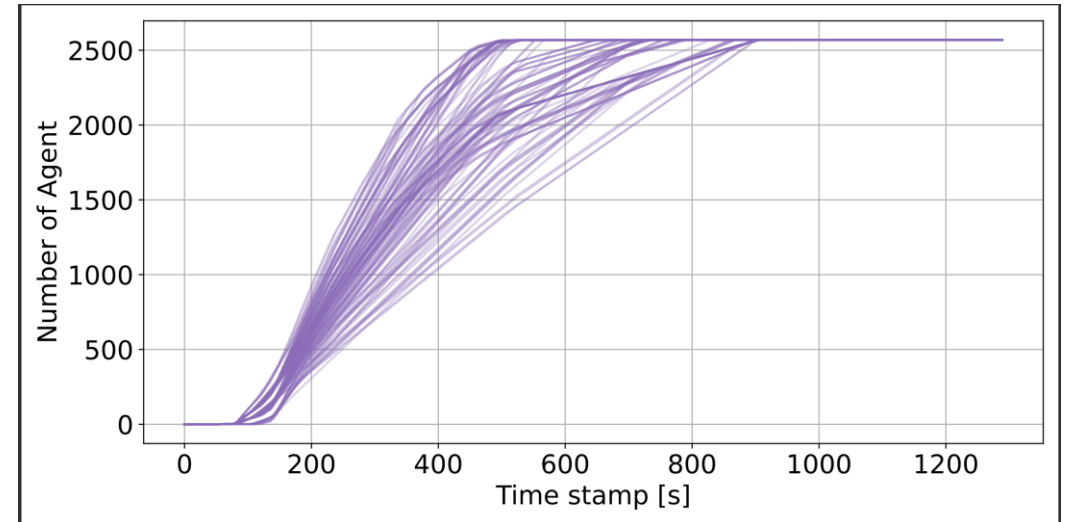
大規模な避難シミュレーションデータを用いた 介入効果推定実験

- 新国立劇場における6個のフロア、9個の介入エリアからの避難シミュレーションから、時刻毎の避難完了者数の時系列データを作成
- 提案手法により介入効果を推定する問題での性能改善を確認

新国立劇場のマップ

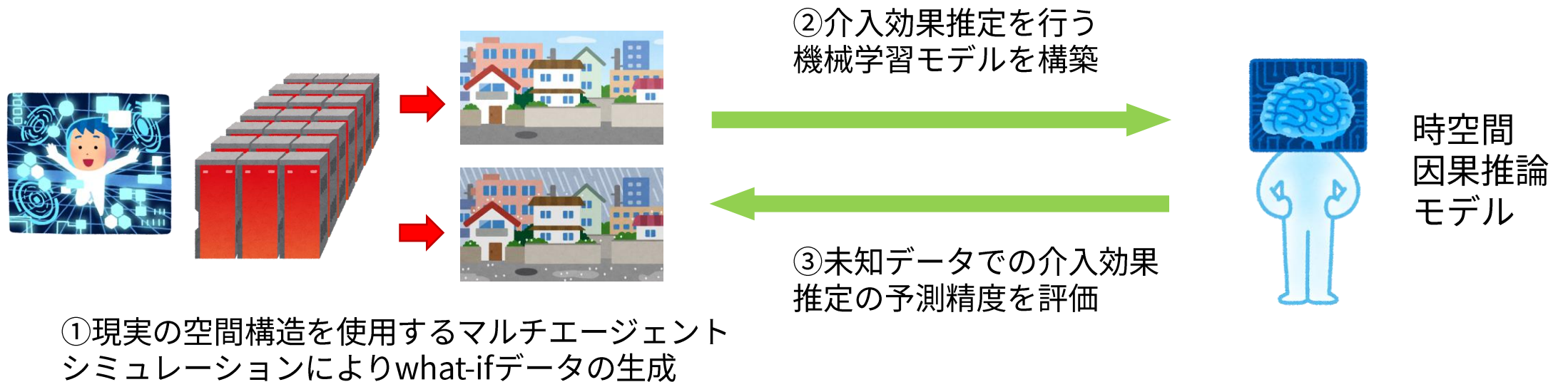


時刻毎の避難完了者数の時系列データ



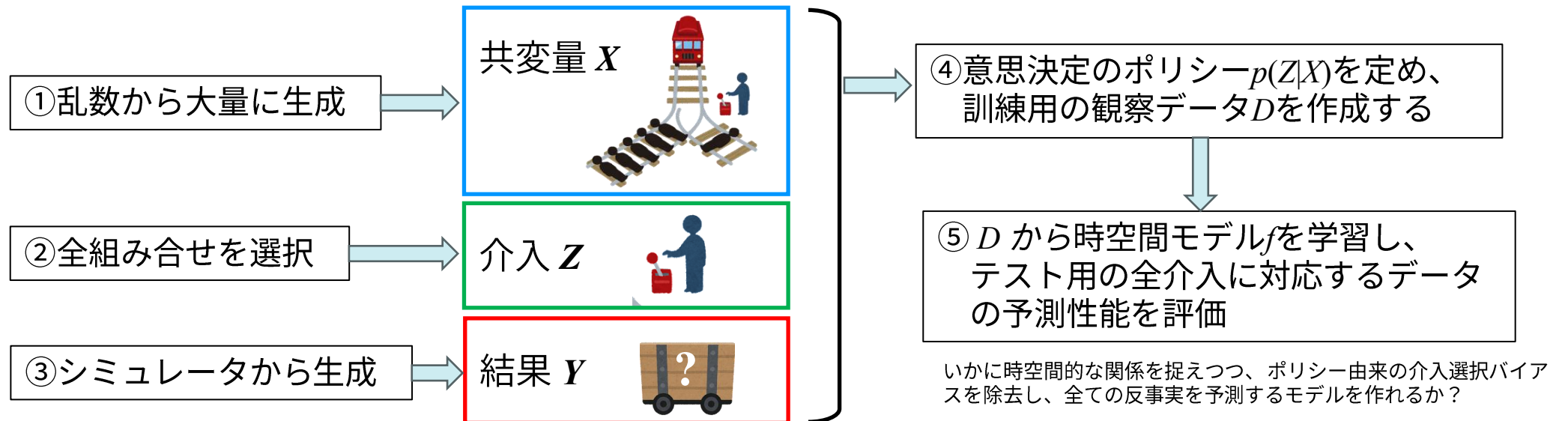
介入効果推定の性能評価を行うための時空間データの作り方

- 介入効果推定の性能評価には、全ての介入選択に対応するデータ、あるいはランダムに介入が選択されたデータが必要
- 倫理・経済的な問題から条件を満たす時空間データは観測不可能
- シミュレータにより全介入に対応する結果を作成する手段を取った



介入効果推定の性能評価を行うための時空間データの作り方

- 介入効果推定の性能評価には、全ての介入選択に対応するデータ、あるいはランダムに介入が選択されたデータが必要
- 倫理・経済的な問題から条件を満たす時空間データは観測不可能
- シミュレータにより全介入に対応する結果を作成する手段を取った

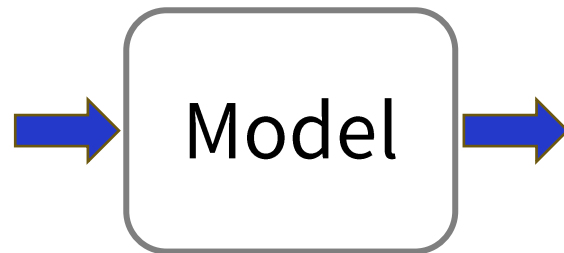


Experiment Settings

- 新国立劇場の最大収容人数 3210 人までの避難を想定
- フロア毎の収容率を30%, 60%, 90% から選択し、エージェントを座席にランダムに配置し、全介入パターンでシミュレート
- 方策から観察データを作成し訓練、未知のデータの全介入パターンに対する予測を評価

Train Data

$$\{X_i, c_i, y_i\}_{i=1}^{I_{\text{train}}}$$



Test within Data

$$\{X_i, c, y_i\}_{i=1}^{I_{\text{train}}}, \forall c \in C_L$$

Test without Data

$$\{X_i, c, y_i\}_{i=1}^{I_{\text{test}}}, \forall c \in C_L$$

階層的な空間グラフデータからの介入効果推定

- 提案モデルにより介入効果の予測精度を大幅に改善

反事実への予測誤差

介入効果の推定誤差

Method	RMSE		MMAE		PEHE		ATE		
	In	Out	In	Out	In	Out	In	Out	
教師あり 学習	RF	115.88 (42.2)	223.52 (14.5)	295.11 (51.9)	354.74 (38.2)	102.56 (7.96)	103.81 (7.43)	28.74 (4.31)	29.44 (5.79)
	XGB	86.12 (12.0)	132.14 (3.67)	212.25 (21.34)	241.30 (12.08)	92.09 (12.91)	92.28 (12.73)	19.18 (1.10)	18.90 (0.80)
	XGB w/ Mono.	111.47 (3.62)	161.18 (3.26)	260.16 (5.69)	286.72 (3.29)	103.09 (2.98)	103.07 (3.39)	36.30 (1.30)	36.05 (1.87)
NN、 CFR	MLP	135.20 (4.22)	136.06 (3.28)	294.71 (2.84)	295.96 (2.48)	120.54 (3.34)	120.99 (3.25)	51.50 (2.86)	51.63 (2.90)
	MNN	136.20 (2.90)	137.13 (2.88)	295.30 (5.50)	298.65 (8.04)	121.16 (2.99)	121.23 (3.07)	51.81 (2.64)	51.77 (2.69)
	MLPs+HSIC	135.27 (3.20)	135.15 (2.41)	296.43 (5.19)	297.18 (5.46)	120.79 (2.76)	120.96 (2.54)	51.46 (2.38)	51.50 (2.29)
STGNN	DCRNN	66.10 (0.63)	66.30 (0.69)	164.02 (0.50)	164.83 (0.49)	71.88 (0.95)	72.08 (1.02)	10.82 (1.09)	10.83 (1.08)
	ARGCN	53.80 (5.81)	54.98 (6.09)	123.73 (10.9)	125.92 (11.6)	55.21 (5.61)	55.83 (5.77)	6.00 (4.66)	6.08 (4.65)
	MTGNN	40.28 (14.11)	40.41 (13.42)	105.46 (29.81)	105.96 (28.32)	44.99 (11.56)	45.22 (11.17)	6.04 (1.91)	5.98 (1.87)
	GWNet	30.54 (1.58)	30.72 (1.86)	84.34 (3.66)	84.85 (4.15)	34.77 (1.93)	34.90 (1.98)	3.05 (2.30)	3.07 (2.26)
SINet	20.79 (0.53)	20.74 (0.51)	62.70 (1.50)	62.75 (1.49)	26.04 (0.69)	25.91 (0.68)	2.73 (1.01)	2.71 (0.99)	

最新のSTGNN (DCRNN, ARGCN, GWNet)と比較して 大幅な予測誤差の改善が確認された

空間上の共変量と介入を階層グラフを用いてモデル化する

Errors for all possible route guides with different time stamps and # of

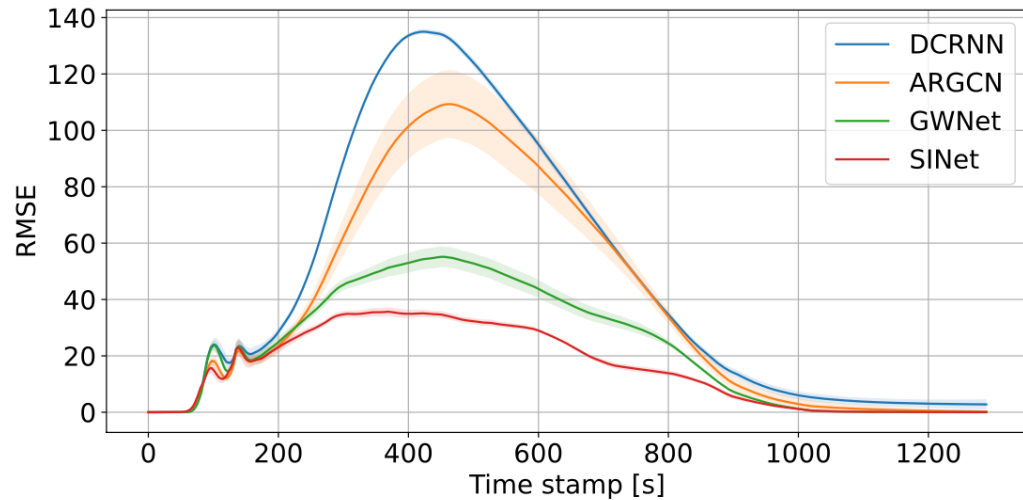


Figure 7: Performance comparisons on the mean of RMSE per timestamp. The existing method had a large prediction error from 200 to 800 seconds, when congestion is most likely to occur, but SINet was able to significantly reduce the error.

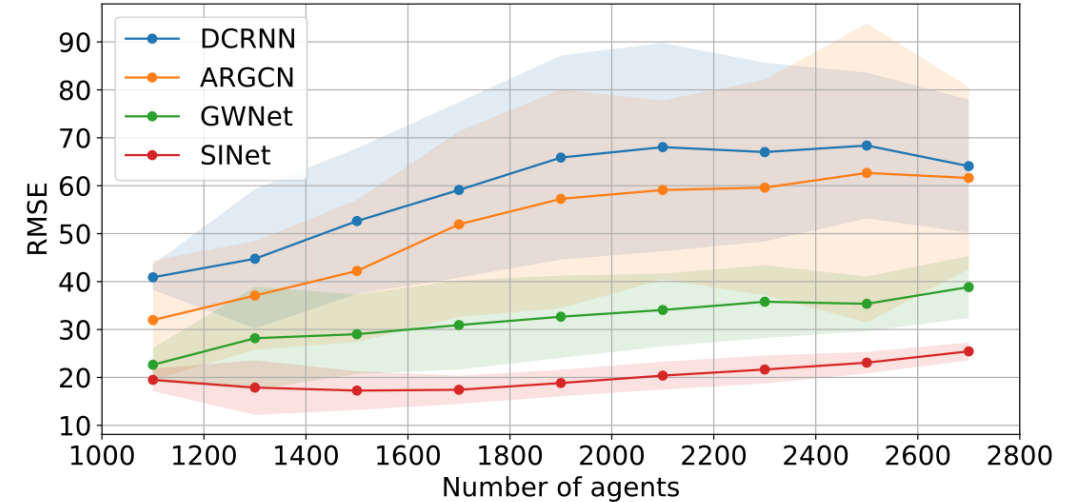


Figure 8: Performance comparisons on the average RMSE for the number of agents. The errors of the existing methods increased as the number of agents gain.

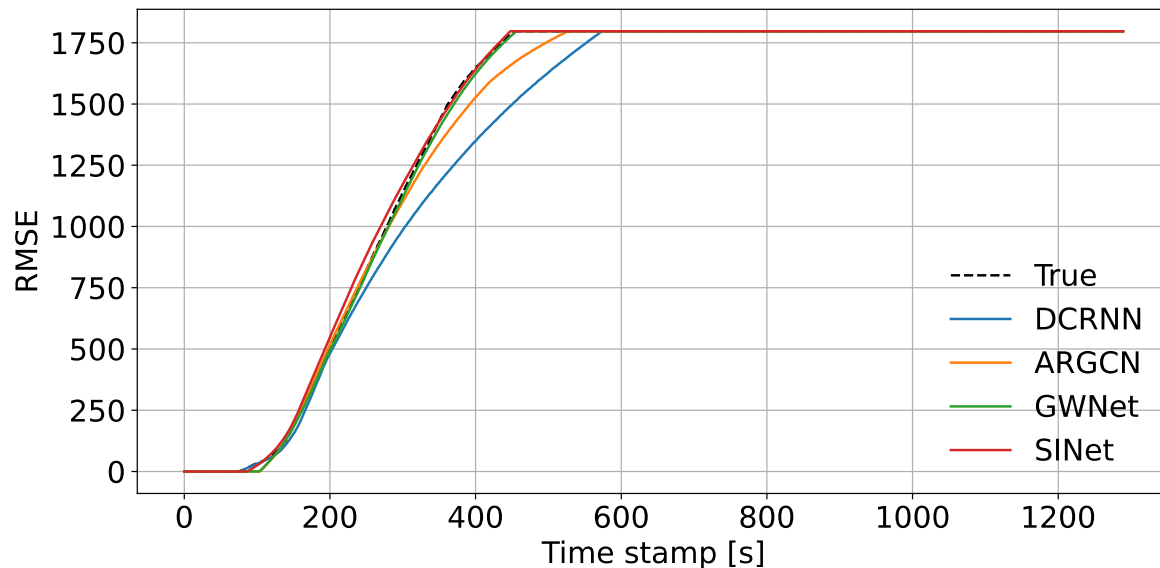
ET

テストデータの予測と真値の比較

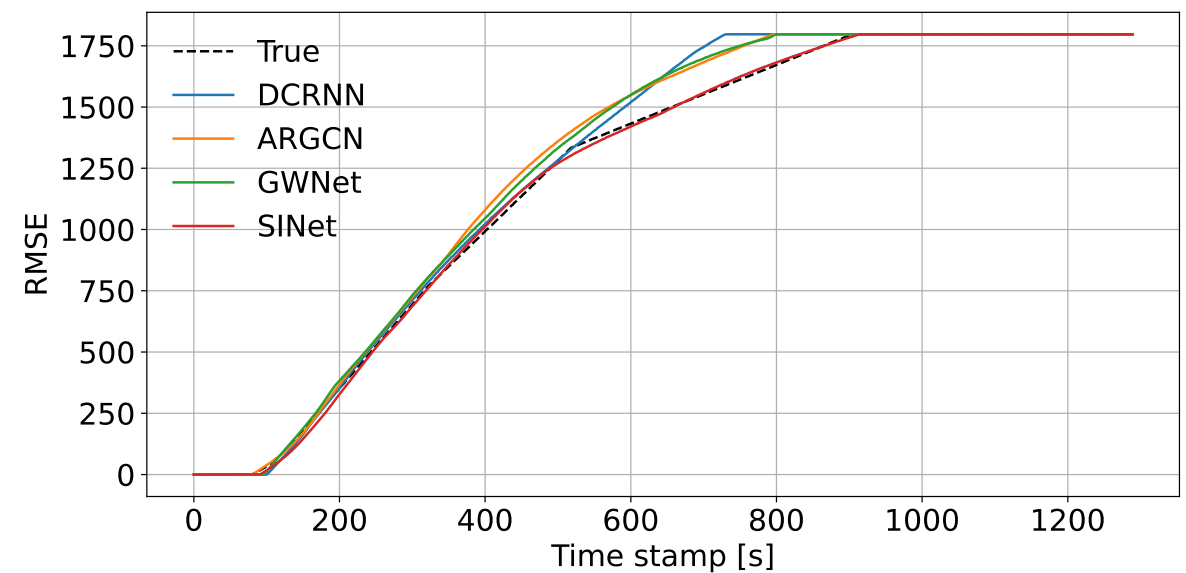
We show the outcomes (dash lines) and predictions (solid lines) for the same covariates but different guide plans

SINet showed more better predictions than other baselines

Guide Plan A



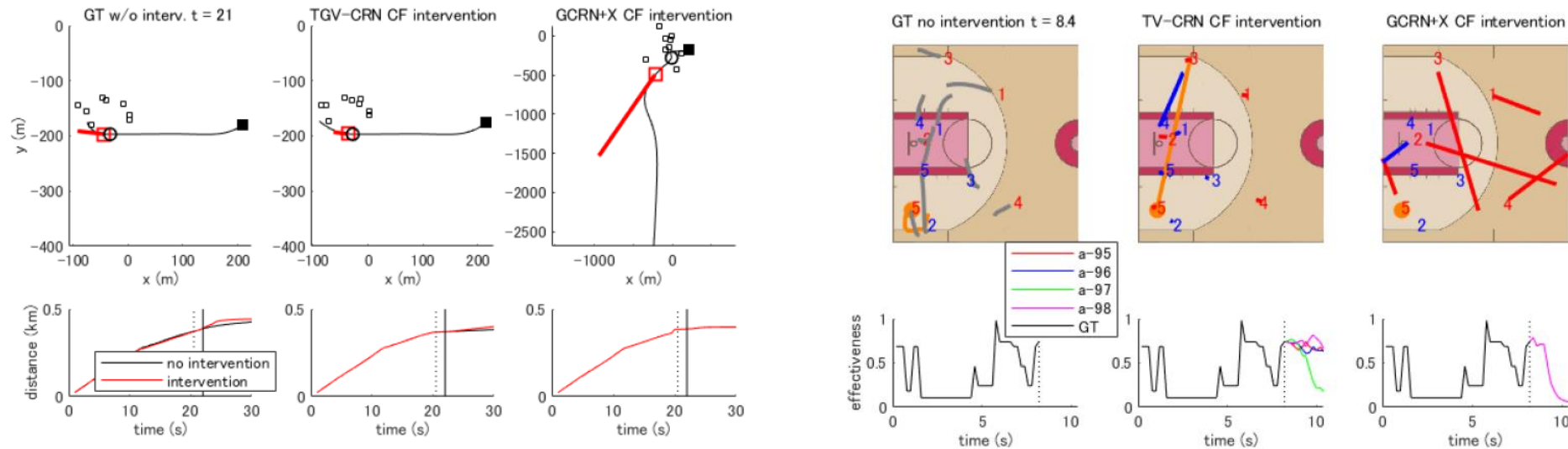
Guide Plan B



その他の研究

移動体へ逐次的に介入する場合での介入効果推定

- 任意の時刻と座標で移動体に介入可能な問題
- 周囲に存在する他の移動体や障害物との相互関係をモデリング
- シミュレータから自動運転車の操舵、スポーツにおける指示などのデータを作成し介入効果推定の評価を行い性能改善を確認

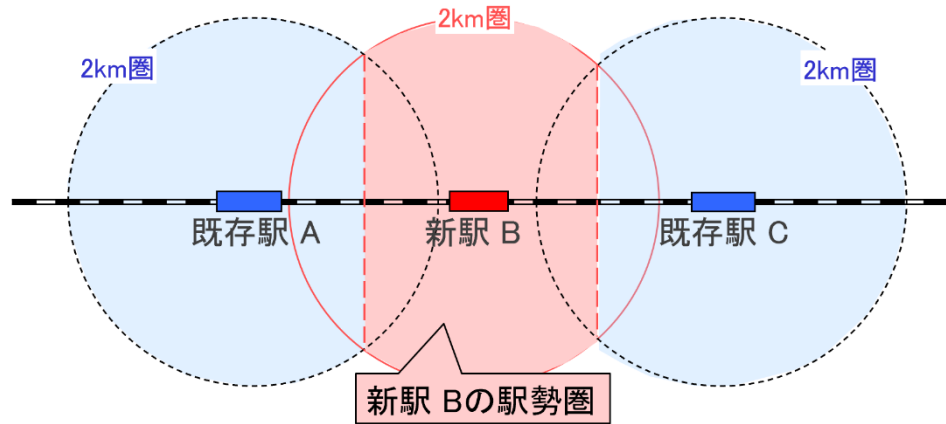


商圈分析における新駅設置の影響予測

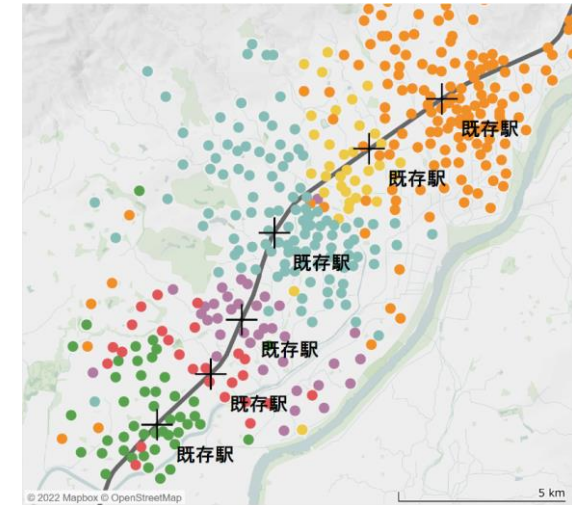
-鉄道駅の利用選択は場所によらず共通か？-

- ある地点の人口のうち何人がどの鉄道駅を利用するか予測する問題
- 地点と鉄道駅の相対的な情報のみから予測する手法を提案
- JR西日本の全線域での実験を行い、提案手法による性能改善を確認

郵便番号ごとの定期登録数最大駅の分布



理想と現実
のギャップ



野添孝敬, 吉住弥華：線区全体を対象とした駅
勢圏法による新駅の需要予測