

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H04244

研究課題名（和文）複雑な関係データに基づく意思決定のための機械学習研究

研究課題名（英文）Machine learning for decision making based on complex structured data

研究代表者

鹿島 久嗣（Kashima, Hisashi）

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：80545583

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,500,000円

研究成果の概要（和文）：まず、機械学習の適用可能性を広げることを目的として、グラフ構造データを対象とした深層学習法の高性能化を目指し、従来のモデルよりも表現力の高いモデルと、その効果的な学習法の開発を行った。また、データに基づく意思決定の適用範囲を大きく広げることを狙って、交絡変数が未知である状況における因果効果推定、因果効果推定の化学分野への応用、少量データに対する予測技術の開発等を行った。さらに、グラフ深層学習と因果推論を融合し、グラフ構造をもった介入の因果効果推定や、グラフ上の因果効果推定法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフ構造データは、ソーシャルネットワーク、分子構造、交通網など多様な分野で見られる。高い性能をもつグラフ深層学習モデルの開発、さらには深層因果推論手法との融合によって、これらの分野におけるより高度な意思決定を可能とし、新薬の発見、交通最適化、社会的ダイナミクスの理解など様々な実世界応用の可能性をもつ。

研究成果の概要（英文）：First, with the aim of expanding the applicability of machine learning, we improved the performance of deep learning methods for graph-structured data, and developed models that are more expressive than conventional models and effective learning methods for them. In addition, with the aim of expanding the applicability of data-driven decision making, we developed causal effect estimation methods in situations where confounding variables are unknown, applied causal effect estimation to the field of chemistry, and developed predictive modeling methods for small data. Furthermore, we combined graph deep learning and causal inference to develop causal effect estimation for interventions with graph structure and causal effect estimation methods on graphs.

研究分野：機械学習

キーワード：機械学習 人工知能 因果推論

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

第三次人工知能ブームを背景に機械学習をはじめとするデータ解析技術の研究開発競争は過熱の一途をたどっている。社会との接点が増えつつある機械学習が一層の発展を遂げるために重要なのが、現実世界に現れる複雑な関係構造を有するデータへの適用範囲の拡大と、これらに基づく意思決定への直接的貢献である。

2. 研究の目的

本研究では、機械学習の適用範囲を一層拡大するべく、複雑な関係構造をもったデータを扱うグラフ深層学習法の性質を解き明かすとともに、その高性能化と解釈可能性の向上ならびに適用対象の拡大を目指す。また、より直接的に意思決定に結びつくデータ解析手法として因果推論に着目し、複数種類の介入や未観測データの存在、結果の確率的なばらつきなど、現実世界の様々な状況に対応できる因果効果推定法の研究を行う。そして上記二つの研究を一気通貫で融合することで、複雑な関係データを対象とした因果推論手法を確立する。

3. 研究の方法

複雑な関係データの機械学習：

機械学習の適用範囲を一層拡大するべく、複雑な関係データを対象とした深層学習法を中心に、その (a) 高性能化と (b) 解釈可能性の向上、(c) 適用対象の拡大の3点を行う。

意思決定に貢献する機械学習：

意思決定により直接的に寄与する因果効果、とりわけ個別のデータに対する因果効果の推定手法を、現実世界のより複雑な意思決定問題に対応できるようにするための研究を行う。

複雑な関係データの機械学習と意思決定に貢献する機械学習の融合：

上記の2つの研究課題を融合し、関係データにおける因果効果推定に取り組む。

4. 研究成果

複雑な関係データの機械学習：

グラフ構造データを対象とした機械学習の高度化として、グラフ深層学習の表現力向上[5]や高速化[6]、複数のドメインに跨った関係データにおけるリンク予測手法[2]などの新しい方法論を開発した。また、グラフ以外の構造データとして、時系列データの新たなモデリング手法[1]、や、点群からのダイナミクス復元[17]などの新たな問題を提案した。

意思決定に貢献する機械学習：

複雑な意思決定問題を扱うための因果効果の推定手法として、複数の介入の組合せに対する因果効果の予測法[3,4]や、介入情報がないデータの活用手法[9]、隠れた交絡因子の推定手法[14]などの新しい因果効果推定法を開発した。また、意志決定手法の応用として、論文出版の効果予測[7]や、偏った実験データからの化合物性質予測[15]、麻酔医の意思決定予測[10]などに取り組んだ。また、その他の意思決定手法として、ヒヤリハットデータの活用[8]や、ベイズ最適化に基づく意思決定法[11]にも取り組んだ。

複雑な関係データの機械学習と意思決定に貢献する機械学習の融合：

関係データにおける因果効果推定法として、介入がグラフ構造をもつ場合の効果推定[12,13]、入力空間がグラフ構造を持つ場合の介入効果推定[16,17]、さらに時空間的な介入を扱う手法[19]を開発した。

以上、本研究では、複雑な関係データに基づく意思決定を目指した機械学習の発展に大きく貢献した。

1. Jiuding Duan, Hisashi Kashima. Learning to Rank for Multi-step Ahead Time-Series Forecasting. IEEE Access, 2021.
2. Luu Huu Phuc, Koh Takeuchi, Seiji Okajima, Arseny Tolmachev, Tomoyoshi Takebayashi, Koji Maruhashi, Hisashi Kashima. Inter-domain Multi-relational Link Prediction. In Proceedings of the European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML PKDD), 2021.
3. Akira Tanimoto, Tomoya Sakai, Takashi Takenouchi, Hisashi Kashima. Causal Combinatorial Factorization Machines for Set-wise Recommendation. In Proceedings of the 25th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD), 2021.
4. Akira Tanimoto, Tomoya Sakai, Takashi Takenouchi, Hisashi Kashima. Regret Minimization for Causal Inference on Large Treatment Space. In Proceedings of The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), 2021.
5. Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima. Random Features Strengthen Graph Neural

- Networks. In Proceedings of SIAM International Conference on Data Mining (SDM), 2021.
6. Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima. Constant Time Graph Neural Networks. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data (TKDD), 2022.
 7. Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima. Poincare: Recommending Publication Venues via Treatment Effect Estimation. Journal of Informetrics, 2022.
 8. Akira Tanimoto, So Yamada, Takashi Takenouchi, Masashi Sugiyama, Hisashi Kashima. Improving Imbalanced Classification Using Near-miss Instances. Expert Systems with Applications (ESWA), 2022.
 9. 原田 将之介, 鹿島 久嗣. 反事実伝播: 介入効果推定のための半教師付き学習. 人工知能学会論文誌, Vol.37, No.3, 2022.
 10. Naoki Miyaguchi, Koh Takeuchi, Hisashi Kashima, Mizuki Morita, Hiroshi Morimatsu. Predicting Anesthetic Infusion Events Using Machine Learning. Scientific Reports, 2021.
 11. Shogo Hayashi, Junya Honda, Hisashi Kashima. Bayesian Optimization with Partially Specified Queries. Machine Learning, 2021.
 12. Shonosuke Harada, Hisashi Kashima. GraphITE: Estimating Individual Effects of Graph-structured Treatments. In Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM), 2021.
 13. 原田 将之介, 鹿島 久嗣. GraphITE: グラフ介入に対する介入効果推定. 人工知能学会論文誌, Vol.37, No.6, 2022.
 14. Shonosuke Harada, Hisashi Kashima. InfoCEVAE: Treatment Effect Estimation with Hidden Confounding Variables Matching. Machine Learning, 2022.
 15. Yang Liu, Hisashi Kashima. Chemical Property Prediction Under Experimental Biases. Scientific Reports, 2022.
 16. Lin Xiaofeng, Hisashi Kashima. Treatment Effect Estimation Under Unknown Interference. In Proceedings of the 28th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD), 2024.
 17. Yuki Wakai, Koh Takeuchi, Hisashi Kashima. Recovering Population Dynamics from a Single Point Cloud Snapshot. In Proceedings of the 28th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD), 2024.
 18. Xiaofeng Lin, Guoxi Zhang, Xiaotian Lu, Han Bao, Koh Takeuchi, Hisashi Kashima. Estimating Treatment Effects Under Heterogeneous Interference. In Proceedings of the European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML PKDD), 2023.
 19. Koh Takeuchi, Ryo Nishida, Hisashi Kashima, Masaki Onishi. Causal Effect Estimation on Hierarchical Spatial Graph Data. In Proceedings of the 29th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD), 2023.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 13件）

1. 著者名 原田 将之介, 鹿島 久嗣	4. 巻 37
2. 論文標題 GraphITE: グラフ介入に対する介入効果推定	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 人工知能学会論文誌	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1527/tjsai.37-2_D-M73	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shonosuke Harada, Hisashi Kashima	4. 巻 2
2. 論文標題 InfoCEVAE: Treatment Effect Estimation with Hidden Confounding Variables Matching	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Machine Learning	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10994-022-06246-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yang Liu, Hisashi Kashima	4. 巻 8206
2. 論文標題 Chemical Property Prediction Under Experimental Biases	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-12116-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Akira Tanimoto, So Yamada, Takashi Takenouchi, Masashi Sugiyama, Hisashi Kashima	4. 巻 201
2. 論文標題 Improving Imbalanced Classification Using Near-miss Instances	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Expert Systems with Applications (ESWA)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.eswa.2022.117130	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima	4. 巻 16
2. 論文標題 Constant Time Graph Neural Networks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data (TKDD)	6. 最初と最後の頁 1-31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3502733	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima	4. 巻 16
2. 論文標題 Poincare: Recommending Publication Venues via Treatment Effect Estimation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Informetrics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.joi.2022.101283	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akira Tanimoto, So Yamada, Takashi Takenouchi, Masashi Sugiyama, Hisashi Kashima	4. 巻 201
2. 論文標題 Improving Imbalanced Classification Using Near-miss Instances	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Expert Systems with Applications (ESWA)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.eswa.2022.117130	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 原田 将之介, 鹿島 久嗣	4. 巻 37
2. 論文標題 反事実伝播: 介入効果推定のための半教師付き学習	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 人工知能学会論文誌	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naoki Miyaguchi, Koh Takeuchi, Hisashi Kashima, Mizuki Morita, Hiroshi Morimatsu	4. 巻 11
2. 論文標題 Predicting Anesthetic Infusion Events Using Machine Learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-03112-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shogo Hayashi, Junya Honda, Hisashi Kashima	4. 巻 111
2. 論文標題 Bayesian optimization with partially specified queries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Machine Learning	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10994-021-06079-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shonosuke Harada, Hisashi Kashima	4. 巻 30
2. 論文標題 GraphITE: Estimating Individual Effects of Graph-structured Treatments	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information and Knowledge Management (CIKM)	6. 最初と最後の頁 659-668
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3459637.3482349	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Jiuding Duan, Hisashi Kashima	4. 巻 9
2. 論文標題 Learning to Rank for Multi-step Ahead Time-Series Forecasting	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IEEE Access	6. 最初と最後の頁 49372-49386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/ACCESS.2021.3068895	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Luu Huu Phuc, Koh Takeuchi, Seiji Okajima, Arseny Tolmachev, Tomoyoshi Takebayashi, Koji Maruhashi, Hisashi Kashima	4. 巻 LNAI12979
2. 論文標題 Inter-domain Multi-relational Link Prediction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML PKDD),	6. 最初と最後の頁 285-301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-86520-7_18	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Lu Xiaotian, Arseny Tolmachev, Tatsuya Yamamoto, Koh Takeuchi, Seiji Okajima, Tomoyoshi Takebayashi, Koji Maruhashi, Hisashi Kashima	4. 巻 LNAI12979
2. 論文標題 Crowdsourcing Evaluation of Saliency-Based XAI Methods	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (ECML PKDD),	6. 最初と最後の頁 431-446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-86517-7_27	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akira Tanimoto, Tomoya Sakai, Takashi Takenouchi, Hisashi Kashima	4. 巻 LNAI12713
2. 論文標題 Causal Combinatorial Factorization Machines for Set-wise Recommendation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the 25th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD)	6. 最初と最後の頁 498-509
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-75765-6_40	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akira Tanimoto, Tomoya Sakai, Takashi Takenouchi, Hisashi Kashima	4. 巻 PMLR130
2. 論文標題 Regret Minimization for Causal Inference on Large Treatment Space	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of The 24th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS)	6. 最初と最後の頁 946-954
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryoma Sato, Makoto Yamada, Hisashi Kashima	4. 巻 -
2. 論文標題 Random Features Strengthen Graph Neural Networks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of SIAM International Conference on Data Mining (SDM)	6. 最初と最後の頁 333-341
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------