

Odkrywanie struktur przyczynowych z użyciem wstępnie dostosowanych sieci neuronowych.

Złożone systemy często składają się z prostszych, słabo ze sobą oddziałujących komponentów. Modelowanie tych wzorców interakcji zwiększa efektywność, interpretowalność oraz zdolność do generalizacji, co skutkuje modelami bardziej odpornymi na zmiany rozkładów danych oraz lokalne modyfikacje. Odkrywanie przyczynowości (causal discovery) koncentruje się na wykrywaniu tych podstawowych interakcji na podstawie danych obserwacyjnych lub interwencyjnych, odgrywając kluczową rolę w takich dziedzinach jak medycyna, biologia, ekonomia czy nauki o klimacie. Poprzez rozróżnianie prawdziwych zależności przyczynowo-skutkowych od zwykłych korelacji, odkrywanie przyczynowości zapewnia solidną podstawę do głębszego zrozumienia naukowego i skuteczniejszego podejmowania decyzji.

Najnowsze postępy w architekturach sieci neuronowych doprowadziły do powstania nowej generacji technik odkrywania przyczynowości, oferujących niespotykaną skalowalność, elastyczność i efektywność obliczeniową. Mimo tych usprawnień, dokładność tych metod pozostaje ograniczona przez statystyczne ograniczenia estymatorów prawdopodobieństwa, które stosują. Ponadto margines błędu szybko maleje wraz ze wzrostem rozmiaru i gęstości grafu, co prowadzi do nierealistycznych wymagań dotyczących ilości danych, ograniczających praktyczną użyteczność.

Obiecującym rozwiązaniem tego ograniczenia obecnych metod odkrywania przyczynowości jest podejście amortyzowane, które ma na celu ponowne wykorzystanie informacji z wielu zbiorów danych, aby osiągnąć dokładniejsze i bardziej efektywne prognozy. W społeczności badawczej wyodrębniono dwa główne kierunki w ramach tego paradygmatu. Jeden z nich obejmuje metody oparte na wiedzy, które wykorzystują duże modele językowe (LLM) do ekstrakcji wiedzy domenowej i wspomagania konstrukcji grafów przyczynowych, natomiast drugi koncentruje się na trenowaniu modeli predykcyjnych do bezpośredniego wywnioskowania struktury przyczynowej z danych. Jednakże podejścia te w dużym stopniu polegają albo na zdolnościach rozumowania LLM i ich rozumieniu zmiennych przyczynowych, albo na dużych ilościach oznaczonych, syntetycznych danych, które często znacznie różnią się od rzeczywistych zbiorów danych, co ogranicza ich zdolność do uogólniania i praktyczną użyteczność.

Równolegle, sieci wstępnie dostosowane (prior-fitted networks) wyłoniły się jako obiecujący paradygmat, integrując wiedzę specyficzną dla danej dziedziny poprzez specjalistyczne wstępne trenowanie, aby poprawić wydajność podczas testów. Modele te wykazały wyższą dokładność, zwłaszcza w skomplikowanych lub ubogich w dane scenariuszach, w porównaniu do klasycznych modeli trenowanych od podstaw.

Bazując na tych spostrzeżeniach, niniejszy projekt proponuje nowatorskie ramy amortyzowanego odkrywania przyczynowości, które adresują dwa główne ograniczenia: dokładność estymatora oraz generalizację w obrębie domeny. Nasze podejście amortyzuje etap estymacji prawdopodobieństwa zależnego od danych poprzez integrację wiedzy dziedzinowej, realizowaną przez wstępne trenowanie na dużych, rzeczywistych zbiorach danych, zgodnie z zasadami wstępnego dostosowywania (prior fitting). Ulepszone estymatory prawdopodobieństwa zostaną następnie wykorzystane w ramach dobrze ugruntowanych metod optymalizacji struktury przyczynowej, dając bardziej interpretowalną i statystycznie uzasadnioną alternatywę wobec obecnych metod amortyzowanych.

Badania będą prowadzone w czterech fazach:

1. **Przygotowanie zbiorów danych** – opracujemy realistyczne zbiory treningowe i ewaluacyjne, kładąc silny nacisk na dane rzeczywiste,
2. **Eksploracja dopasowywania priorytetów** – ocenimy różne techniki dopasowywania w kontekście odkrywania przyczynowości i estymacji prawdopodobieństwa,
3. **Integracja modeli i benchmarking** – zintegrujemy ulepszone estymatory z pipeline'em odkrywania przyczynowości i przeprowadzimy benchmarking ich wydajności względem istniejących podejść amortyzowanych i nieamortyzowanych,
4. **Badanie skalowalności** – ocenimy skalowalność proponowanych metod na dużych zbiorach danych oraz zbadamy strategie zwiększania wydajności.

Niniejsza praca ma potencjał znacząco posunąć do przodu dziedzinę odkrywania przyczynowości, dostarczając modele nie tylko szybkie i dokładne, ale również interpretowalne i teoretycznie dobrze ugruntowane. Ponadto nasze działania związane z przygotowaniem zbiorów danych będą miały wartość infrastrukturalną, wspierając szerszą społeczność badawczą.