

## 統計的因果探索 —— 観察データから因果関係を導く 方法とその応用 ——

Causal Discovery and Its Application to Infer Causal Relationships  
from Observational Data

前田高志ニコラス

### Abstract

多くの科学的研究の目的は単に変数間の相関関係を求めることではなく、因果関係を求めることにある。因果関係を知る最も効果的な方法はランダム化比較試験である。しかし、経済的、倫理的、技術的に実行が不可能な比較実験も多い。これに対して、統計的因果探索とは観察データから変数間の因果関係を推定する技術である。本稿では、近年様々な発展がなされている統計的因果探索の方法論と現状抱えている問題点を紹介する。また、統計的因果探索を応用した機械学習の応用研究についても解説する。

キーワード：統計的因果探索, 因果推論, 介入, LiNGAM

#### 1. はじめに

科学的研究の多くは単に相関関係を明らかにするだけでなく因果関係を明らかにすることを目指している。因果関係を知る最も効果的な方法はランダム化比較試験と呼ばれるものである。これは、ランダムに研究の対象をグループに分け、それぞれのグループに異なる介入（外的操作）を実施して、結果を比べるものである。しかし、このような実験は経済的・倫理的・技術的な問題で実行できないことが多い。これに対して、本稿で解説する統計的因果探索は、介入を伴った実験を行わずに、既に得られた観測データのみから因果関係を推測する技術である。

本稿は統計的因果探索に関する知識がない人に向けて、統計的因果探索の前提・方法・原理、そして応用を解説する。本稿では、主に Judea Pearl<sup>(1)</sup>によって提唱された枠組みと、その枠組みを基に構築されてきた手法を扱う。

#### 2. 因果構造と介入

変数間の確率・相関関係はデータに現れる関係を指すのに対し、因果関係はそのようなデータを生み出す構造を指す。例えば、「芝生が濡れているので、雨が降っていたのだろう」という表現や、「雨が降っていたので、芝生は濡れているだろう」という表現は、芝生と雨について経験的に分かっている確率・相関関係を指している。一方で、「芝生を濡らしても雨は降らない」という表現や、「人工的に雨を降らすことによって芝生は濡れる」という表現は、芝生と雨の間にある、構造としての因果関係を話題にしている。

Pearl は因果構造を、因果グラフと構造方程式によって表す。例えば、変数  $X$  と  $Y$  が存在し、 $X$  は  $Y$  の原因であるが、 $Y$  は  $X$  の原因でないとする。 $X$  を雨、 $Y$  を芝生と考えてもよい。このとき図1のとおり、因果グラ

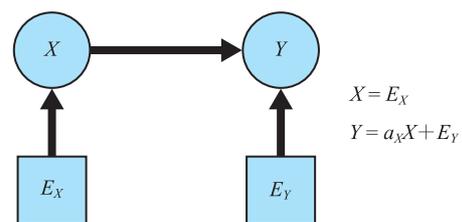


図1 因果グラフと構造方程式  $E_X$  と  $E_Y$  は確率的に振る舞う外生変数で、 $a_X$  は定数とする。

前田高志ニコラス 東京電機大学システムデザイン工学部情報システム工学科  
Takashi Nicholas MAEDA, Nonmember (The School of System Design and  
Technology of Tokyo Denki University, Tokyo, 113-0021 Japan).  
電子情報通信学会誌 Vol.106 No.7 pp.603-608 2023年7月  
©電子情報通信学会 2023

フは「 $X \rightarrow Y$ 」と表される。因果グラフとは、ノードで変数を、有向エッジで因果関係を示す図である。構造方程式は例えば以下のようなモデルで表現される。

$$X = E_X, \quad Y = a_X X + E_Y \quad (1)$$

ここで、 $E_X$ と $E_Y$ は確率的に振る舞う外生変数で、 $a_X$ は定数とする。構造方程式は、左辺が右辺のとおりに生成されることを示している。よって、式(1)の後者から $X = \frac{1}{a_X} Y - \frac{1}{a_X} E_Y$ と表すのは構造方程式としては無効である。

変数の値を外的に操作することを介入という。Pearlは既存の代数学では、介入を表現することができないとして、介入を表現するための「do演算子」を提唱している。通常の条件付期待値、 $E(X|Y=y)$ は確率・相関関係から $Y$ の値で条件付けたときの $X$ の期待値を表す。もしデータが式(1)のとおり生成されていれば、 $E(X|Y=y) = \frac{1}{a_X} E(Y) - \frac{1}{a_X} E(E_Y)$ となる。Pearlはこれに対し、 $E(X|\text{do}(Y=y))$ を、 $Y$ に $Y=y$ という介入をしたときの $X$ の期待値と定義する。既に述べたように、式(1)を整理して得られる $X = \frac{1}{a_X} Y - \frac{1}{a_X} E_Y$ という式を構造方程式とすることはできない。 $Y$ に対して、 $Y=y$ という介入をした場合、構造方程式は、

$$X = E_X, \quad Y = y \quad (2)$$

という式に改められる。こうすると、 $Y$ に対して介入を行ったときの $X$ の期待値は $E(X|\text{do}(Y=y)) = E(E_X)$ となり、 $y$ の影響を受けないことが分かる。更にこのことから、もし $y_1 \neq y_2$ であるとき、

$$E(X|\text{do}(Y=y_1)) - E(X|\text{do}(Y=y_2)) = 0 \quad (3)$$

が成り立つ。では、 $X$ に $X=x$ という介入をしたときはどうか。この場合、式(1)から

$$X = x, \quad Y = a_X X + E(E_Y) \quad (4)$$

となる。式(4)により、 $X$ に対して介入を行ったときの $Y$ の期待値は $E(Y|\text{do}(X=x)) = a_X x + E(E_Y)$ となり、 $x$ に依存することが分かる。更に、 $x_1 \neq x_2$ のとき、

$$E(Y|\text{do}(X=x_1)) - E(Y|\text{do}(X=x_2)) \neq 0 \quad (5)$$

が成り立つことが分かる。式(3)では、結果変数 $Y$ に異なる二つの介入を行ったときの原因変数 $X$ の期待値

の差が0となっている。他方、原因変数 $X$ に異なる介入を行ったときの結果変数 $Y$ の期待値の差が式(5)のとおり、0にならない。式(3)と式(5)はそれぞれ、「芝生を濡らしても雨は降らない」、「人工的に雨を降らすことによって芝生は濡れる」という因果関係を表す例に対応する。

因果構造推論はデータからその背景にある因果構造を推定するものである<sup>(1),(2)</sup>。これは演えき法でも帰納法でもない、アブダクションという推論である。アブダクションとは、関連する証拠を最もよく説明できる仮説を選択する推論法である。したがって、因果構造推論は因果構造を一意に特定するようなものではない。例えば、 $X$ に対して異なる介入をした結果、 $Y$ に変化が起きなかったとする。このとき、必ずしも $X$ が $Y$ の原因でないと結論付けることはできない。例えば、式(1)と異なるモデルとして、変数 $X, Y, Z$ のモデルがあるとする。図2は $X, Y, Z$ の因果グラフである。図2のとおり、変数 $X$ と $Y$ の間に $X \rightarrow Y$ と $X \rightarrow Z \rightarrow Y$ という二つのパスの因果関係がある。一方で、図2の右上の構造方程式から、図2の右下にあるとおり、 $Y = E_Z + E_Y$ が得られ、 $X$ の変数が $Y$ からなくなっている。これは、 $X \rightarrow Y$ の因果効果が $X \rightarrow Z \rightarrow Y$ の因果効果によって相殺されてしまっていることを意味する。このように、 $X$ が $Y$ の原因であるにもかかわらず、 $X$ への介入が $Y$ の変化を起こさないことがある。しかし、このような絶妙な因果効果のバランスを想定する仮説は頑健とは言えず、 $X$ は $Y$ の原因ではないという仮説の方が、 $X$ は $Y$ の原因であるという仮説よりも選択しやすい。ただし、最終的には、実際の因果構造がどうであるかを特定することはできない。このように、因果構造推論では、因果構造を一意に特定することを目指すのではなく、あり得る仮説の中から、一定の基準によって最も選択しやすい仮説を選ぶものである。

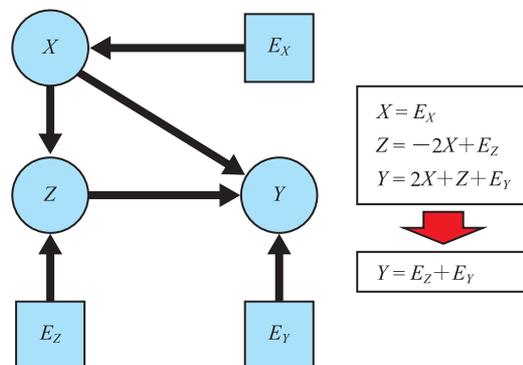


図2  $X$ が $Y$ の原因であるにもかかわらず、 $X$ の値の変化が $Y$ に影響しない例

### 3. 統計的因果探索

統計的因果探索とは、介入を伴わずに、既に得られた観測データのみから変数間の因果関係を推測するものである。統計的因果探索の手法には様々なものがあるが、それぞれの手法はデータ生成過程に対する一定の仮定を設けている。特に頻繁に設定される仮定は、因果グラフが非巡回となるような、構造的因果モデルである。因果グラフが非巡回であるとは、グラフの矢印の方向をたどったときに巡回が発生しないことを指し、そのようなグラフは DAG (Directed Acyclic Graph) と呼ばれる。また、構造的因果モデルでは、観測変数の集合  $\mathbf{V} = \{V_1, \dots, V_n\}$  の因果関係を

$$V_i = f_i(\text{pa}_i, \varepsilon_i) \quad (6)$$

という形で与える。  $\text{pa}_i$  は観測変数の集合  $\mathbf{V}$  のうち、  $V_i$  の直接原因となる変数の集合を指す。  $\varepsilon_i$  は錯乱項と呼ばれ、  $V_i$  の原因のうち、  $\mathbf{V}$  には含まれない変数を要約したものである。更に、未観測共通原因が存在しないことも多くの統計的因果探索の手法で仮定される。これは  $i \neq j$  となる  $V_i$  と  $V_j$  の共通原因のうち、未観測変数 ( $\mathbf{V}$  に含まれない変数) が存在しないことを仮定するものである。このとき、  $i \neq j$  となる  $\varepsilon_i$  と  $\varepsilon_j$  は互いに独立であると仮定する。以上の仮定は多くの統計的因果探索の手法において仮定されているが、それらの仮定を緩める手法も多く提案されている。

#### 3.1 因果関数に制約を置かない因果探索手法

因果関数に制約を置かない因果探索手法として、PC (Peter-Clark) アルゴリズムを紹介する<sup>(3)</sup>。図3にアルゴリズムの詳細を記載している。図3①にあるように、まずグラフのノードの全てのペアを無向エッジでつな

ぐ。以降、図3②から④までを繰り返す。図3②では、変数の集合  $\mathbf{S}$  で  $X$  と  $Y$  を条件付けたときに  $X$  と  $Y$  が独立になるものがあれば、  $X$  と  $Y$  の間の無向エッジを消す。図3③では、  $X-Y-Z$  というつながりがあり、  $X$  と  $Z$  につながりがなく、  $Y$  で条件付けた  $X$  と  $Z$  が非独立のとき、  $X \rightarrow Y \leftarrow Z$  にする。図3④では、グラフが非巡回になるよう無向辺の矢印を決定する。例えば  $X \rightarrow Y$ 、  $Y \rightarrow Z$  が分かっている、  $X-Z$  という無向辺があれば  $X \rightarrow Z$  とする。

なお、PC アルゴリズムと同様の方法で、未観測共通原因の存在を許す手法として、FCI (Fast Causal Inference) アルゴリズムがある<sup>(4)</sup>。

#### 3.2 因果関数に制約を置く因果探索手法

因果関数に一定の制約を置く因果探索手法を二つ紹介する。一つ目は、因果関係が線形であり、外生変数が非ガウシアンであるという仮定を置く LiNGAM (Linear Non-Gaussian Acyclic Model) である<sup>(5)</sup>。二つ目は、因果関係が非線形という仮定を置く ANM (Additive Noise Model) である<sup>(6)</sup>。両者は因果グラフが非巡回であることと、未観測共通原因が存在しないことを仮定する。

##### 3.2.1 Linear Non-Gaussian Acyclic Model (LiNGAM)

LiNGAM は式(6)に更に制約を加えて、以下のように変更したモデルである。

$$V_i = \sum_{V_j \in \text{pa}_i} a_{i,j} V_j + \varepsilon_i \quad (7)$$

ここで、  $a_{i,j}$  は定数で、  $\varepsilon_i$  は互いに独立かつ非ガウシアンな確率分布に従う外生変数である。LiNGAM は3変数以上の因果構造だけでなく、2変数間の因果関係も推

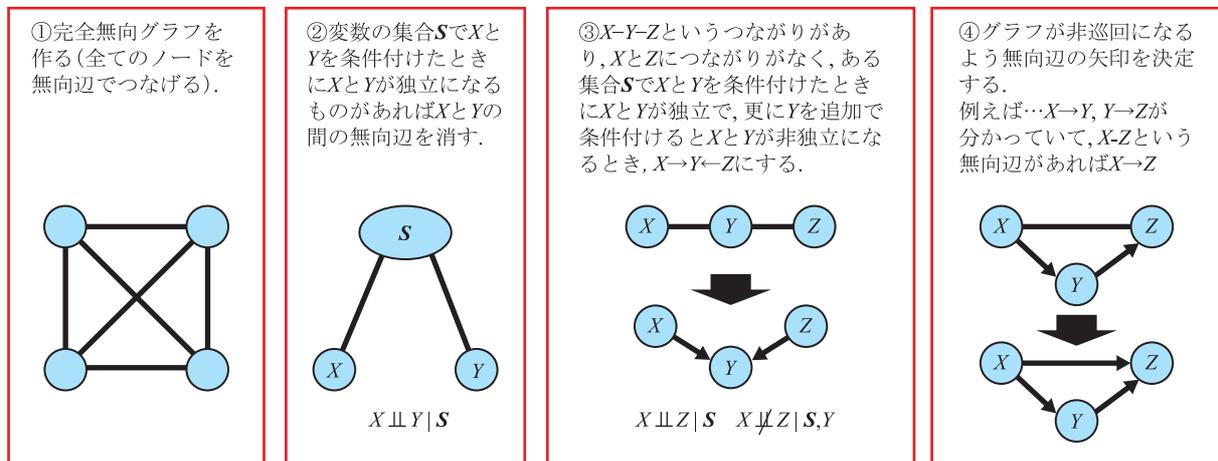


図3 PC アルゴリズム ①を最初の実施した後に、②から④を最後まで繰り返す。

定することができる。式(1), すなわち,  $X=E_x, Y=a_xX+E_y$  も,  $E_x$  と  $E_y$  を非ガウシアンな確率変数と仮定すると, LiNGAM のモデルを満たす。このような  $X$  と  $Y$  があつたときに, データからいかにしてその因果関係を求めるかを解説する。まず,  $Y$  を  $X$  に回帰させたときの残差は以下ようになる。

$$R_X^{(Y)} = Y - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(X)} X = a_x X + E_y - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(X)} X = E_y \quad (8)$$

一方で,  $X$  を  $Y$  に回帰したときの残差は

$$\begin{aligned} R_Y^{(X)} &= X - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)} Y \\ &= X - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)} (a_x X + E_y) \\ &= \left(1 - a_x \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)}\right) X - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)} E_y \\ &= \left(1 - a_x \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)}\right) E_x - \frac{\text{cov}(X, Y)}{\text{var}(Y)} E_y \end{aligned} \quad (9)$$

となる。外生変数が互いに独立であるという仮定から,  $X=E_x$  と  $R_X^{(Y)}=E_y$  は独立である。では,  $Y=a_xX+E_y$  と  $R_Y^{(X)}$  はどうであろうか。ここで, Darmois-Skitovitch の定理と呼ばれる定理を参照する。

【Darmois-Skitovitch の定理】

確率変数  $X$  と  $Y$  を,  $X=\sum_{i=1}^p a_{1i} E_i, Y=\sum_{i=1}^p a_{2i} E_i$  と定義する。  $a_{1i} a_{2i} \neq 0$  となるような非ガウス  $E_i$  があれば,  $X$  と  $Y$  は独立でない  $Y=a_x X+E_y$  も  $R_Y^{(X)}$  も共に, 互いに独立な非ガウシアンな確率変数  $E_x$  と  $E_y$  を含んでいる。このため,  $Y$  と  $R_Y^{(X)}$  は非独立であることが分かる。以上から, 2変数  $X$  と  $Y$  の因果関係を求めるとき, 互いに回帰させ, 残差と説明変数の依存関係を調べれば

よいことになる。結果変数を原因変数に回帰させたときの残差は原因変数と独立で, 原因変数を結果変数に回帰させたときの残差は結果変数と非独立になる。図4は,  $X=E_x, Y=0.5X+E_y$  としたときの  $X, Y, R_X^{(Y)}, R_Y^{(X)}$  の関係性を示している。  $E_x$  と  $E_y$  は一様分布に従う確率変数としている。図4でも,  $Y$  を  $X$  に回帰したときの残差  $R_X^{(Y)}$  が  $X$  と独立で,  $X$  を  $Y$  に回帰したときの残差  $R_Y^{(X)}$  が  $Y$  と非独立と分かる。LiNGAM では, この方法を用いて, 3変数以上の変数間の因果関係を推論することもできる。

LiNGAM の派生手法として, 未観測共通原因の存在を認める Repetitive Causal Discovery (RCD) がある。この手法では, 未観測共通原因を持つ変数ペアを両矢印で提示しつつ, その他の変数ペアに対しては, 正しく因果関係を求めるものである。

3.2.2 Additive Noise Model (ANM)

ANM は式(6)に更に制約を加えた以下のモデルで定義される。

$$V_i = f_i(\text{pa}_i) + \varepsilon_i \quad (10)$$

Additive Noise Model の noise とは,  $\varepsilon_i$  を指す。なお, 関数  $f_i$  は必ず非線形であり, 線形であつてはならないことが仮定されている。LiNGAM と異なり,  $\varepsilon_i$  はガウシアンであつてもよい。  $\varepsilon_i$  は互いに独立である。ここで, 以下のような2変数のみのモデル

$$X = E_x, \quad Y = f(X) + E_y \quad (11)$$

を考える。  $Y-g(X)$  が  $X$  と独立となるような関数  $g$  は存在するが,  $X-g(Y)$  が  $Y$  と独立となるような関数  $g$  は存在しないことを示すことにより, ANM の因果関係の識別性は証明される。まず, 前者については  $g=f$  で

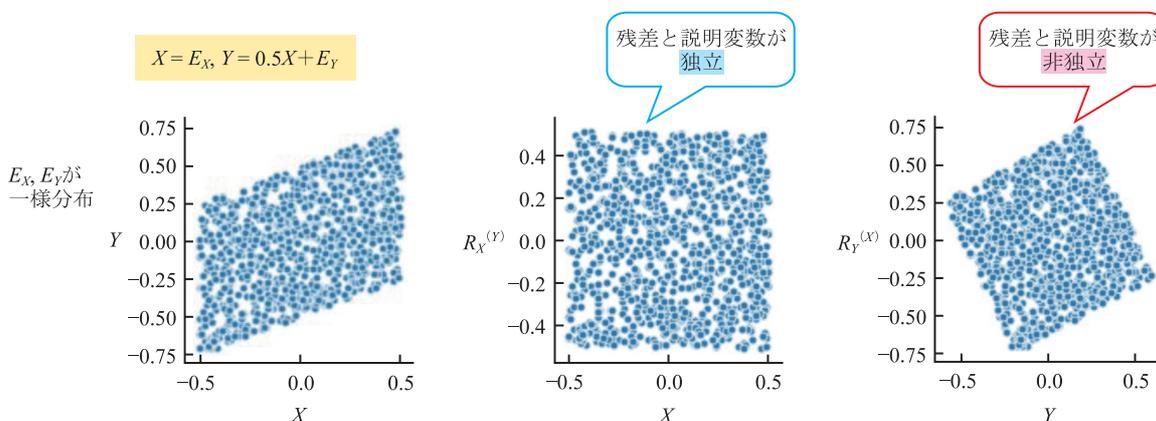


図4 LiNGAM での原因と結果の識別性 真ん中の図で, 結果変数  $Y$  を原因変数  $X$  に回帰させたときの残差は原因変数  $X$  と独立になり, 原因変数  $X$  を結果変数  $Y$  に回帰させたときの残差は結果変数  $Y$  と非独立になる。

あれば、 $Y = g(X) = E_Y$  となり、 $X = E_X$  と独立であることが示される。後者については誌幅の問題のため、当該論文<sup>(6)</sup>を参照されたい。LiNGAM と同様に、ANM でも 3 変数以上の因果構造を求めることができる。

### 3.3 因果探索手法のデータへの応用について

既に 2. 「因果構造と介入」で述べたとおり、統計的因果探索の手法を用いても、あくまでデータをより良く説明できる因果構造の仮説を提示するだけである。データの背後にある因果構造を明らかにするものではない。多くの統計的因果探索の手法の提案は、シミュレーションデータを用いた評価実験と、リアルワールドデータを用いた評価実験を伴う。前者はデータ生成過程の因果構造を完全に知っているという、本来あり得ない前提で行われる。因果構造が分かっているならば、演えき的にデータがどのようなものになるかが分かる。シミュレーションデータを用いた評価実験は、因果構造の仮定から演えき的に導かれた統計的因果探索手法が確かに理論どおり機能する正しさを示すためのものである。一方でリアルワールドデータに対する評価実験は、手法の有用性を確認するためのものであり、その方法の正しさを示すものではない。既存手法に比べて、納得のいく結果を出すので、有用かもしれない、ということを示すのみである。

統計的因果探索の方法論のユーザが、現実のデータに対して統計的因果探索の手法を応用する際にも、この注意が必要である。統計的因果探索の手法は因果構造を明らかにするのではなく、経験的に納得のいく結果を出す可能性が高いにすぎない。これらの手法を使う際には、データが手法の仮定を満たしているかを検証した上で実施し、得られた因果グラフについてどれほどもっともらしいかを自分で評価することが大事である。

## 4. 統計的因果探索の応用

統計的因果探索は他の機械学習の問題に応用されている。因果グラフを知ることでドメイン適応における精度の向上が図れることが知られている<sup>(7)</sup>。図 5 は、因果グラフを示している。観測変数  $X_1$  と  $X_3$  の値が分かる前提で、 $X_2$  を常に予測したいとする。ここで全ての変数が独立同分布であったとすると、 $X_2$  を予測するために  $X_1$  と  $X_3$  の両方を用いるのが最善である。しかし、ここで突如、未観測変数  $U_2$  の確率分布が別ものになったとする。このとき、 $X_3$  の確率分布も変わるが、 $X_1$  と  $X_2$  の確率分布は変化しない。このとき、 $X_3$  の確率分布の変化後のデータが一定量そろうまでは、 $X_3$  は用いずに、 $X_1$  のみを用いて、再度過去データから学習して予測するのがよい。

次は、反実仮想説明法への因果グラフの知識の応用である<sup>(8)</sup>。例えばローンの審査に通らなかったときに、どのような変数の値をどう改善すれば審査に通るのかを伝えてもらうことは、次のアクションをとるのに有益である。一方で、変更すべき変数同士が互いに因果的影響を及ぼしている場合がある。例えば、職業スキルは給与に影響を与える。職業スキルを上昇させれば給与も上がると考えられる。したがって、職業スキルと給与の上昇が望まれているのであれば、給与の上昇の前に職業スキルを上昇させるアクションをとることで給与の上昇も起き、効率的である。このように、因果グラフを用いて、取るべきアクションの順番を提案することができる。

以上のように、因果構造や統計的因果探索を他の機械学習の領域へ応用する試みが始まっている。

## 5. おわりに

統計的因果探索の手法やその応用は多数あるが、本稿

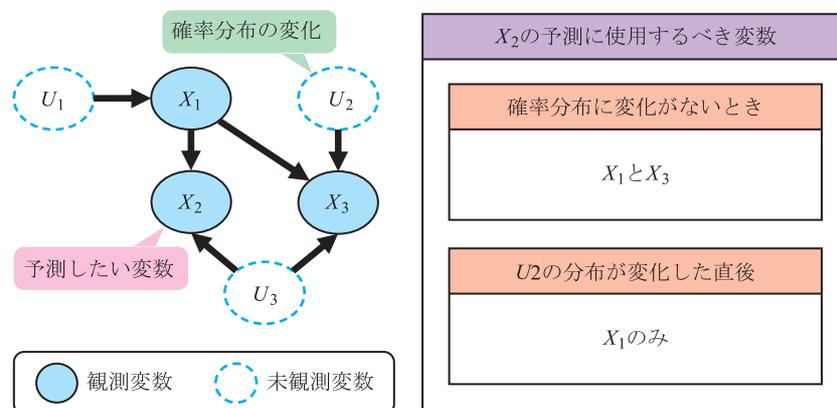


図 5 因果構造とドメイン適応  $U_2$  の確率分布に変化が起きたとき、 $X_2$  の予測に  $X_3$  を使用できない。

では筆者が特に重要と思うものに絞って解説した。本稿で記した因果関係と確率・相関関係の違いと関係についての詳細は、文献(2)、(9)を参照されたい。また、LiNGAMについては文献(10)を参照されたい。

## 文 献

- (1) J. Pearl, Causality: models, reasoning and inference. Cambridge University Press, 2000.
- (2) 大塚 淳, “因果と実在, Judea Pearl, Causality, 第二版書評,” 科学基礎論研究, vol. 39, no. 2, pp. 109-115, 2012.
- (3) P. Spirtes and C. Glymour, “An algorithm for fast recovery of sparse causal graphs,” Soc. Sci. Comput. Rev., vol. 9, no. 1, pp. 62-72, 1991.
- (4) P. Spirtes, C. Meek, and T. Richardson, “A causal discovery in the presence of latent variables and selection bias,” in Computation, Causality, and Discovery, G.F. Cooper and C.N. Glymour, eds., pp. 211-252, AAAI Press, 1999.
- (5) S. Shimizu, P.O. Hoyer, A. Hyvärinen, and A. Kerminen, “A linear non-Gaussian acyclic model for causal discovery,” J. Mach. Learn. Res., vol. 7, no. 72, pp. 2003-2030, 2006.
- (6) P.O. Hoyer, D. Janzing, J.M. Mooij, J. Peters, and B. Schölkopf,

- “Nonlinear causal discovery with additive noise models,” Advances in Neural Information Processing Systems, vol. 21, 2009.
- (7) S. Magliacane, T. van Ommen, T. Claassen, S. Bongers, P. Versteeg, and J.M. Mooij, “Domain adaptation by using causal inference to predict invariant conditional distributions,” Advances in Neural Information Processing Systems, vol. 31, 2018.
- (8) K. Kanamori, T. Takagi, K. Kobayashi, Y. Ike, K. Uemura, and H. Arimura, “Ordered counterfactual explanation by mixed-integer linear optimization,” the 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence, pp. 11564-11574, 2021.
- (9) 大塚 淳, “第 5 章 因果推論,” 統計学を哲学する, pp. 180-215, 名古屋大学出版会, 愛知, 2020.
- (10) 清水昌平, 統計的因果探索, 講談社, 東京, 2017.

(2023 年 3 月 1 日受付 2023 年 3 月 9 日最終受付)



まえだ たかし  
前田 高志ニコラス

平 31 東大大学院博士課程了。同年理化学研究所入所。令 4 から東京電機大・准教授。統計的因果探索の方法論と応用、及び時空間データ分析の研究に従事。