

## 潜在変数による線形循環因果モデルの学習

**アンティ・ヒッティネン**

ANTTI.HYTTINEN@HELSINKI.FI

ヘルシンキ情報技術大学 コンピュータ

サイエンス学部

P.O.Box 68 (Gustaf Hållströmin katu

2b) FI-00014 ヘルシンキ大学

フィンランド

**フレデリック・エバーハルト**

FDE@CMU.EDU

哲学科 ベーカーホール

135

カーネギーメロン大学ピッツバー

グ (ペンシルベニア州) 15213-3890

)、米国

**パトリック・O・ホイヤー**

PATRIK.HOYER@HELSINKI.FI

ヘルシンキ情報技術大学 コンピュータ

サイエンス学部

P.O.Box 68 (Gustaf Hållströmin katu

2b) FI-00014 ヘルシンキ大学

フィンランド

**エディター** Christopher Meek (クリストファー・ミーク

## アブストラクト

興味のある変数間の因果関係を特定することは、科学の中心的な問題である。我々は、実験セットが与えられたときに、周期と潜在変数を含む可能性のある線形モデルを同定する手順を説明する。モデルファミリーの詳細な説明、同定可能性の必要条件と十分条件の完全な証明、完全な検索アルゴリズム、同定可能条件が満たされない場合に何ができるかの議論を提供する。このアルゴリズムはシミュレーションで包括的にテストされ、文献にある競合するアルゴリズムと比較される。さらに、DREAMチャレンジの生物学的に現実的なデータに適用し、セルラーネットワーク推論の問題にこの手順を適応させる。本論文は、Eberhardt et al. (2010)とHyttinen et al. (2010)によって最初に発表された

因果関係発見手順の完全な理論的根拠を提供する。

**キーワード：**因果関係、グラフモデル、ランダム化実験、構造方程式モデル、潜在変数、潜在的交絡因子、サイクル

## 1. はじめに

データから因果関係を推測することは、科学の多くの分野で基本的な重要性を持っている。複雑なシステムを完全に把握したとは、システムの異なる構成要素が互いにどのように影響し合っているかを詳細に理解していない限りは言えないし、そのような理解なしに、ある目標とする介入に対してシステムがどのように反応するかを予測することはできない。測定された2つの量の間に統計的な依存関係があると、因果関係が未確定になることはよく知られている。

© 2012 Antti Hyttinen, Frederick Eberhardt, Patrik O. Hoyer.



依存性は、ある変数から別の変数への因果関係（どちらか一方または両方向）に加えて、両者の共通の原因（交絡因子）に起因する可能性があります。

このような未確定性を考慮して、ランダム化実験は原因発見のゴールドスタンダードとなっている。ランダム化実験では、ある変数 $x_i$ の値が実験者によってランダムに割り当てられる。その結果、このような実験では、 $x_i$ と別の測定変数 $x_j$ の間のあらゆる相関は、 $x_j$ に対する $x_i$ の因果効果に一意に帰することができる。 $x_i$ に対する（ $x_j$ や共通の原因などからの）どんな因果効果が入ってきても、ランダム化によって「壊れて」しまうからである。Fisher (1935)によって導入されて以来、ランダム化実験は現在、実験デザインの重要な基礎となっている。

1980年代以降、因果システムをシステマティックに表現するために、有向グラフに基づく因果グラフモデルが開発されてきた（Glymour et al., 1987; Verma and Pearl, 1988）

。このアプローチでは、変数 $V$ の集合間の因果関係は、有向辺

$D \subseteq (V \times V)$  有向グラフ $G = (V, D)$ 内のノード間を結ぶもので、ノードからの有向辺は $x_i$ からノード $x_j$ までのグラフは、 $x_i$ が $x_j$ に及ぼす直接的な因果関係を表している（vari-setに相対する）。

$V$ ）である。このようなモデルにおける因果関係は、各変数の値がグラフ内の直接原因の値によってどのように影響されるかを指定する確率的な関数関係（または代替的な条件付き確率分布）の観点から定義されている。このようなモデルでは、変数 $x_i$ をランダム化することは、その変数を指す矢印をすべて削除し、機能関係（または条件付き確率分布）を実験で指定された分布に置き換えることに等しい。その結果、切り捨てられたモデルは、問題の変数の値がもはや通常の原因によって影響されず、代わりに実験者によって明示的に決定されるという事実を捉える。グラフ構造と確率的関数関係を定義するパラメータを組み合わせることで、どのような実験条件下でも、全変数集合に対する結合確率分布が決定されます。

ここで気になるのは、このような因果関係モデルの構造やパラメータを、どのように、どのような条件で学習（データから推論）できるのかということである。この問いに対する答えは、基礎となるモデルについてどのような仮定を置くか、どのような調査手段を考えるかに大きく依存する。例えば、因果関係発見法の中には、因果構造が非周期的である（有向サイクルがない）ことを仮定する必要があるものもあれば、因果関係

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
の十分性、つまり測定された変数に影響を与える測定されていない共通の原因が存在しないことを仮定する必要があるものもある。多くのアルゴリズムは、グラフの構造が変数間の（条件付き）独立性のセットを一意に決定することを要求する忠実性の仮定の下でのみ、証明可能な一貫した推定値を提供します。また、ある手法では、関係の関数形がある決められた形（例えば、線形性）をとる必要がある。上記の仮定を様々に組み合わせることで、非実験的（「受動的観察」）データから、観察データの根底にある因果関係を一貫して推測することができる（Richardson, 1996; Spirtes et al., 2000; Pearl, 2000; Chickering, 2002a,b; Shimizu et al., 2006）。

多くの場合、研究者は上記のような仮定をしたくないかもしれないし、モデルの完全な構造が推論されることを保証したいかもしれない（多くの発見手法の一般的な結果である可能なモデルの同値クラスのみを推論するのとは対照的に）。そのため、無作為化実験の力を利用するのが自然なステップである。そこで、次のような疑問が生じる：モデルに関するどのような仮定の下で、またどのような実験セットに対して、基礎となる因果構造の一貫した学習を保証することができるのか。ここで、既存の文献のほとんどすべてが非周期的なケースに焦点を当てている（Cooper and Yoo, 1999; Tong and Koller, 2001; Murphy, 2001；

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

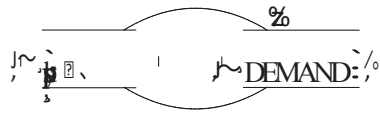


図1: 古典的な需給モデル。

Eberhardt et al., 2005; Meganck et al., 2005; Nyberg and Korb, 2006; Eberhardt and Scheines, 2007; Eaton and Murphy, 2007).

ほとんどの発見アルゴリズムに共通する非周期性の仮定は、因果関係モデルの素直な解釈を可能にし、ある状況下では適切である。しかし、多くの場合、この仮定は明らかに不適當である。例えば、古典的な需要-供給モデル（図1）では、需要が供給に影響を与え、その逆もまた然りである。直感的には、真の因果構造は、原因が常にその結果に先行するため、時間的に非周期的である：前の時間ステップの需要は、次の時間ステップの供給に影響を与える。しかし、因果関係のある時間ステップは数日から数週間のオーダーで発生するが、需要と供給の測定は通常、はるかに長い間隔の累積平均であり、より速い相互作用は不明瞭である。同様の状況は、多くの生物学的システムでも起こり、相互作用は測定値よりもはるかに速い時間スケールで発生する。このような場合、周期的なモデルが自然な表現を提供し、非周期性に依存しない因果関係発見手順を利用する必要がある（Richardson, 1996; Schmidt and Murphy, 2009; Itani et al., 2008）。

本寄稿では、平衡データから線形循環型因果モデルの構造とパラメータを学習する問題を考える。二次統計に基づく同定可能性の必要十分条件を導出し、一貫した学習アルゴリズムを提示する。我々の結果と学習方法は、因果関係の充足性（隠れた交絡がないこと）には依存せず、忠実性（データ中の独立性がグラフ構造によって完全に決定されること）も必要としない。我々の知る限り、これらの結果は、このような弱い仮定の下では初めてのものである。モデル空間が非常に一般的である（基本的に線形性しか必要としない）ことを考えると、同定を得るためにはランダム化実験が必要である。ある種の実験データでは、完全な因果構造を同定することは容易であるが、実験回数や実験ごとの無作為化変数の数を大幅に節約できることを示す。全体として、本論文は、Eberhardt et al. (2010)とHyttinen et al. (2010)で予備的かつ簡略的に発表した推論手法の完全な理論的バックボーンと徹底した実証研究を提供する。潜在変数を持つ線形循環モデ

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
ルを学習するための簡潔な理論を確立している。

第2節では、モデルとその仮定、モデルの解釈方法、実験的介入の表現方法を紹介することから始める。セクション3では、モデル同定に必要なかつ十分な条件（実行されるランダム化実験のセットについて）を導出する。これらの結果は、セクション4で提示される正しく完全な学習方法の基礎となる。また、本節では、同定可能条件が満たされない場合に生じる過少決定についても議論する。第5節では、徹底的なシミュレーションに基づく実証的な結果を示し、我々の手順の性能を既存の方法と比較する。最後に、本手順をセルラーネットワーク推論の問題に適応し、セクション6でDREAMチャレンジの生物学的に現実的なインシリコデータに適用する。第7節と第8節では、いくつかの拡張と結論が述べられている。

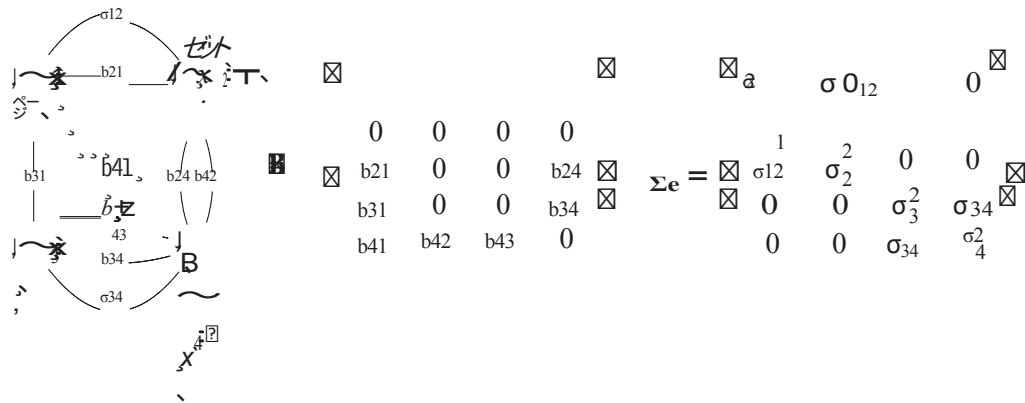


図2：潜在変数を持つ線形循環モデルの例。非ゼロ係数  $b_{21}$  は、グラフでは弧  $x_1 \rightarrow x_2$  で表される。同様に、外乱  $e_1$  と  $e_2$  間の非ゼロ共分散は、弧  $x_1 \leftrightarrow x_2$  で表される。グラフでは、外乱が個々の変数の項は、わかりやすくするために省略されている。なお、 $x_3 \rightarrow x_4$  や  $x_3 \leftrightarrow x_4$  のように対向する一対の有向辺は変数間の相互因果関係（フィードバック関係）を表し、 $x_3 \leftrightarrow x_4$  のように両頭矢印は、変数間の相互因果関係を表す、は交絡を表す。

## 2. モデル

まず、受動的観測（セクション2.1）と実験設定（セクション2.2）における環状モデルの基本的な解釈を示すことから始めます。モデルと実験の両方について正準形式を確立し、その後の理論の提示を簡略化する。次に、モデル均衡の存在を保証するための様々な安定性仮定について議論し、それらがモデルの解釈やモデルのマージナル化とどのように関連しているかを示す（セクション2.3）。

### 2.1 潜在変数を含む線形循環モデル

Bollen (1989) のフレームワークに従い、相関誤差を持つ一般線形構造方程式モデル (SEM) をデータ生成の基礎モデルとして考える。このようなモデルでは、各観測変数  $x_j \in V$  ( $j = 1, \dots, n$ ) の値は、以下の線形結合によって決定される。その因果的な親の値  $x_i \in \text{pa}(x_j)$  と加法的な攪乱（「ノイズ」）項  $e_j$ ：

$$x_j := \sum_{x_i \in \text{pa}(x_j)} b_{x_j x_i} x_i + e_j.$$



潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
すべての観測変数をベクトル $\mathbf{x}$ 、対応する外乱をベクトルで表すと

e、これらの構造方程式は、一つの行列式で表すことができる。

$$\mathbf{x} := \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{e} \text{ とする、} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{B}$ は係数 $b$ の $(n \times n)$  行列である $_{ji}$ 。このような因果モデルのグラフ表現は、ゼロでない因果効果 $b_{ji}$  を、対応するグラフの辺 $x_i \rightarrow x_j$  で表現することで与えられる。グラフと行列 $\mathbf{B}$ の例を図2に示す。

因果関係を記述するグラフに有向サイクルがない場合、または（同等に）以下のような変数の因果順序が存在する場合、方程式のセットは再帰的または非周期的であると  
言われる。

の場合、対応する行列 $B$ は下三角形である。図2のモデルのように、グラフに有向サイクル（フィードバックループ）が含まれる場合、そのモデルは非回帰性または循環性であると言われる。本論文では、基礎となるモデルが非周期的であることを先験的に仮定しない。つまり、我々のモデルファミリーは、周期的な場合と非周期的な場合の両方を許容する。

完全観測型」SEMでは、擾乱項 $e_i$ は互いに独立であると仮定されるが、ここでは擾乱 $e_1, \dots, e_n$ の間の任意の相関をモデル化することにより、未観測交絡を認める。具体的には、擾乱ベクトル $\mathbf{e}$ の平均ベクトルと分散共分散行列（それぞれ $\mu_e$ と $\Sigma_e$ で示す。 $\Sigma_e$ の対角要素は、？

は擾乱の分散を表し、対角外側のエントリーは共分散を表す。このグラフでは、 $e_i$ と $e_j$ の間のゼロでない共分散は、両頭の弧 $x_i \leftrightarrow x_j$ で表される。この暗黙の表現では、3つの観測値を交絡する潜在変数があることに注意。

変数は3つの（一对の）共分散で表される。表記をなるべく簡単にするために

。付録Aでは、通常、観測データをこの仮定と一致する形に変換することが可能であることを示す。こうして、データ生成の基礎となるモデルを定義する準備が整った：

**定義1（潜在変数付き線形循環モデル）** 潜在変数付き線形循環モデル  $M = (B, \Sigma_e)$  は、式1の形式の観測変数  $x_1, \dots, x_n \square V$  上の構造方程式モデルであり、攪乱ベクトル  $\mathbf{e}$  は平均  $\mu_e = 0$ 、任意の sym-metric 正定値分散共分散行列  $\Sigma_e$  を持つ。

モデルパラメータとデータ間の関係を完全に生成的に説明するためには、**Bに対する**追加の制約が必要である。一般に、時間次元で折りたたまれた因果過程を表現するために循環モデルが使われ、因果過程が「落ち着いた」後にデータサンプルが採取されると仮定される。非回帰型SEMの伝統的な解釈では、擾乱はシステムが平衡に達して測定が行われるまでは変化しない背景条件を表すと仮定しています。したがって、変数 $\mathbf{x}(0)$ の初期値が与えられた場合、誤差分布から外乱 $\mathbf{e}$ のベクトルを1つ引き、システムを反復することでデータベクトルが生成されます。

$$\mathbf{x}(t) := B\mathbf{x}(t-1) + \mathbf{e} \quad (2)$$

を、収束するまで時間ステップごとに（時間に対する）定数 $\mathbf{e}$ を加える。こうして時間 $t$ において、ベクトル $\mathbf{x}$ は次のような値を持つ。

$$\mathbf{x}(t) := (\mathbf{B})^t \mathbf{x}(0) + \sum_{i=0}^{t-1} (\mathbf{B})^i \mathbf{e}.$$

$\mathbf{x}(t)$ が均衡に収束するためには、幾何級数  $(\mathbf{B}^i)_{i=0 \dots t}$ 、幾何級数  $\sum_{i=0}^{t-1} \mathbf{B}^i$  が  $t \rightarrow \infty$  として収束する必要がある。任意の  $\mathbf{x}(0)$  と任意の  $\mathbf{e}$  に対して、そのための必要十分条件は、 $\mathbf{B}$  の固有値  $\lambda_k$  が  $\forall k$  を満たすことである:  $|\lambda_k| < 1$  (Fisher, 1970) を満たすことである。その場合、 $(\mathbf{B})^t \rightarrow 0$ 、 $t \rightarrow \infty$  として  $\sum_{i=0}^{t-1} \mathbf{B}^i \rightarrow (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}$  となるので、 $\mathbf{x}(t)$  は以下に収束する。

$$\mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \mathbf{e}.$$

ここで、 $(\mathbf{I} - \mathbf{B})$  は上記の固有値の制限から反転可能であることが保証される。均衡時の観測値  $\mathbf{x}$  は出発点  $\mathbf{x}(0)$  に依存しないことに注目し、完全に

$\mathbf{x}$ の複数のサンプルは、 $\mathbf{e}$ の異なるサンプルについてこの平衡化プロセスを繰り返すことによって得られる。したがって、 $M = (\mathbf{B}, \Sigma_e)$  について、観測された変数に対する分散共分散行列は

$$\mathbf{C}_x = \mathbf{E}\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T\} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \mathbf{E}\{\mathbf{e}\mathbf{e}^T\}(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-T} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Sigma_e (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-T}. \quad (3)$$

このような平衡は、平衡化過程の各時間ステップで擾乱項が新たにサンプリングされるモデルから生じる確率的平衡と対照的である。第7節では、このようなモデルの考察に簡単に戻る。モデルがたまたま非周期的（すなわち、フィードバックループがない）であれば、決定論的平衡の観点からの解釈は、標準的な再帰的SEM解釈と一致し、調整の必要がないことに注意する。

多くのシステムにおいて、時刻 $t$ におけるある変数 $x_i$ の値が、時刻 $t+1$ における同じ変数の値にゼロ以外の影響を与えることが予想される（例えば、線形微分方程式を差分方程式で近似したときに、このようなシステムが得られる）。このような場合、係数 $b_{ii}$  ( $\mathbf{B}$ の対角要素)は定義上非ゼロであり、モデルは「自己ループ」(モデルに対応するグラフのノードからそれ自身への有向辺)を示すと言われています。2.3節で述べるように、このような自己ループは本来、均衡データからは識別できないので、識別できないパラメータを抽象化した標準的なモデルを定義する必要性がある。この目的のために、以下の定義を導入する。

**定義2（正準モデル）** 潜在変数  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  を持つ線形循環モデルは、次のように言われる。自己ループを含まない（つまり $\mathbf{B}$ の対角が0）場合、カノニカルモデルとなる。

我々は、潜在変数を持つ任意の（すなわち、自己ループを含む）線形循環モデルとして、すべての実験で平衡時に同じ観測値をもたらす正規のモデルを得ることができる方法を2.3節で示す。

## 2.2 実験風景

冒頭で述べたように、因果関係モデルを推論する目的の一つは、システムが介入されたときにどのように反応するかを予測する能力である。潜在変数を持つ線形循環モデルの重要な特徴の1つは、このサブセクションで議論するように、実験操作の表現を自然に

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
統合することである。

実験  $E_k = (J_k, U_k)$  を、観測変数  $V$  (すなわち、 $J_k \sqcup U_k = V$  および  $J_k \cap U_k = \emptyset$ ) を、介入変数の集合  $J_k$  と受動観測変数の集合  $U_k$  に分割して特徴付ける。この表現では、受動的観測データセットは、 $J_k = \emptyset$  と  $U_k = V$  の「ヌル実験」であることに注意されたい。標準的な見解 (Spirtes et al., 2000; Pearl, 2000) に従い、この論文では、入ってくる因果的影響をすべて断ち切るランダム化「外科的」介入を考える。

は、平均  $\mu^k$  と共分散  $\text{cov}(\mathbf{c}) = \Sigma^k$  を持つ外生的介入分布によって決定される値に介入変数を設定することによって、介入変数に設定される。基礎となるグラフの中でモデルでは、これはすべてのエッジを介在するノードにカットすることに相当します (例として図3を参照)。

表記を簡略化するため、 $\mathbf{J}_k$  と  $\mathbf{U}_k$  という2つの  $(n \times n)$  対角の「指標行列」を表す。ここで、 $(\mathbf{J}_k)_{ii} = 1$  は、 $x_i \sqcup J_k$  の場合に限り、 $\mathbf{J}_k$  の他のすべてのエントリはゼロであり、 $\mathbf{U}_k = \mathbf{I} - \mathbf{J}_k$  である。ベクトル  $\mathbf{c}$  は介入分布によって決まる介入した変数の値、であるとする。

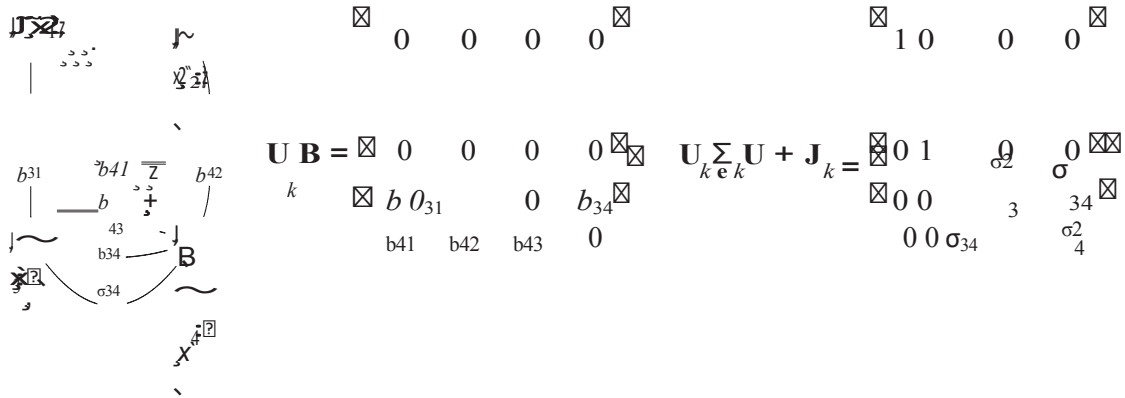


図3： 図2のモデルにおける変数 $x_1$  と $x_2$  への介入に対応する操作モデル、すなわち、 $J_k = \{x_1, x_2\}$  と $U_k = \{x_3, x_4\}$  の実験結果 $E_k = (J_k, U_k)$  です。

はそれ以外ではゼロである。実験 $E_k$ におけるモデルの振る舞いは、次の構造方程式で与えられる。

$$\mathbf{x} := \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{x} + \mathbf{U}_k \mathbf{e} + \mathbf{c} \text{ とする。} \quad (4)$$

介入された変数 $x_j \in J_k$  に対して、式4の操作されたモデルは、元の方程式 $x_j := \sum_{i \in \text{pa}(j)} b_{jii} x_{jii} + e_j$  を方程式 $x_j := c_j$  に置き換え、受動的に観測された変数 $x_u \in U_k$  の方程式は変更されないままである。

ここで、介入ベクトル $\mathbf{c}$ は平衡化過程を通して一定であり、相互の関係を保持する。介入分布からサンプリングされた値で固定された変動変数を使用します。別のアプローチでは、最初にシステムに「衝撃」を与えるだけの介入を検討し、その後、介入された変数が変動するようにすることができます。これには、ここで提供したものとは異なる表現と分析が必要になります。

セクション2.1で説明した受動的な観測設定と同様に、実験設定の時系列表現で

$$\mathbf{x}(t) := \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{x}(t-1) + \mathbf{U}_k \mathbf{e} + \mathbf{c}$$

は、 $t \rightarrow \infty$ として平衡に収束することが保証され、 $\mathbf{c}$ と $\mathbf{e}$ は共に時変である。これは、受動的な観測の設定で収束を保証する仮定を、次のように拡張することで実現する。

**定義3 (漸近安定性)** 潜在変数を持つ線形巡回モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  は、あらゆる可能な実験  $E_k = (J_k, U_k)$  に対して、行列  $\mathbf{U}_k \mathbf{B}$  の固有値  $\lambda_i$  が  $\forall i$  を満たす場合にのみ asymptotically stable となる:  $|\lambda_i| < 1$  を満たす。

漸近安定性は、実験  $E_k = (J_k, U_k)$  において、平衡時に得られるサンプルが  $\mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{U}_k \mathbf{e} + \mathbf{c})$  で与えられることを意味します。なお、受動的観測の場合は、 $J_k$  が空であるヌル実験という観点から含まれている。実際には、漸近的安定性の仮定は

は、調査対象のシステムがどのような介入を受けても分解したり爆発したりしないことを意味するので、平衡分布はすべての状況に対してよく定義されています。明らかに、これは多くの実際のフィードバックシステムには当てはまらず、実際、この仮定は我々の目的のために弱めることができる。しかし、セクション2.3で詳しく述べるように、漸近安定性を満たす基礎となる生成モデルの仮定は、我々の結果の解釈を単純化する。非周期モデル( $\mathbf{B}, \Sigma_c$ )の場合、すべての行列 $\mathbf{U}_k$   $\mathbf{B}$ の固有値はゼロなので、この場合、安定条件は些か満たされることになる。

一般に、実験はさまざまな形態をとることができる：同時に1つの変数ではなく複数の変数を変化させる以外に、変数への介入は互いに独立であったり、相関があったり、介入された変数ごとに異なる平均と分散を持つこともある。本論文の残りの部分では、表記を簡略化するために、標準的な実験の概念を採用することにする：

**定義4（正統的実験）**  $J_k$  の介入変数が外科的にランダム化され、外乱とも互いに無相関で、平均値ゼロ、単位分散である場合、実験 $E_k = (J_k, U_k)$  は正統的実験であるとされる。

この表記法の簡略化により、介入変数と受動観測変数への分割が実験を特定する唯一のパラメータとなり、純粹に実験の共分散行列 $\mathbf{C}^k$  の観点から理論を導出することができるようになる。次のレマは、一般性を損なうことなく $\mathbf{c}$ の無相関成分の仮定ができることを示す。しかし、最初に、我々は

という表記を追加した：任意の $(n \times n)$ 行列 $\mathbf{A}$ について、 $V \setminus S_r$  の変数に対応する行と $V \setminus S_c$  の変数に対応する列を削除し、残りの行と列の順序を変更せずに残った $\mathbf{A}$ のブロックを $\mathbf{A}_{S_r S_c}$ と表記します。

<sup>1</sup>**実験** $E_k = (J_k, U_k)$  で、介入変数 $\mathbf{c}$ が $E(\mathbf{c}) = \mu^k$ ,  $\text{cov}(\mathbf{c}) = \Sigma^k$  となるように外乱 $\mathbf{e}$ とは無関係にランダム化されている場合、**相関実験**、潜在変数 $(\mathbf{B}, \Sigma_c)$ を持つ線形循環モデルは、平均 $\mu \sim^k$  と共分散行列 $\mathbf{C}^k$ を生成する、 $\mathbf{c} \sim^k$  とすると、介入変数 $\mathbf{c}$ が $E(\mathbf{c}) = \mathbf{0}$ ,  $\text{cov}(\mathbf{c}) = \mathbf{J}_k$  で $\mathbf{e}$ から独立してランダム化される正統的な実験では、モデルは、次のように与えられる平均と共分散を持つ観測値を生成する。

$$\begin{aligned} \mu_{\mathbf{x}}^k &= \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k &= \mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k - \mathbf{T}^k (\mathbf{C}_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^k)^{-1} (\mathbf{T}^k)^T + \mathbf{T}^k (\mathbf{T}^k)^T, \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{T}^k = (\mathbf{C}_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^k)^{-1} (\mathbf{C}_{\mathbf{x}\mathbf{y}}^k)^T$ 。



**証明** 読みやすさを向上させるため、本論文のすべてのレンマと定理の証明は付録に繰り延べられる。

このレンマは、実際の実験において介入変数に与えられた値が相互に無相関でないときはいつでも、推定された平均と共分散行列を、介入がゼロ平均と単位分散で無相関であった場合に見出されるであろう標準化された形に簡単に変換できることを示す。<sup>2</sup> 実質的な仮定は、介入された変数の値

1. ランダム化とは、ここでは介入変数の共分散行列  $\text{cov}(c_J) = (\Sigma^k)_{JJ}$  を意味する。 は対称的である

positive-definite

です。

2. このレンマは、重回帰に慣れた読者には驚きではないだろう：行列  $T^k$  の  $[\cdot, j]$  のエントリは、 $x_j$  を介入する変数に回帰させたときの回帰係数である。係数の不偏推定値を得るために、回帰因子は無相関である必要はない。

変数 (c の成分) は、外乱 (e の成分) と無相関である。これは、介入される変数の値がシステム内の他の (受動的に観測される) 変数の特定の観測に依存する、いわゆる「条件付き介入」を除外するものである。これは許容できるほど弱い制限であると考えられる。

セクション2.1での導出を反映し、*正規の実験*では $E_k$ 、平均と共分散は、以下のように与えられる:

$$\mu_{\mathbf{x}}^k = 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k = (\mathbf{I} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma_{\mathbf{e}k}) (\mathbf{I} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T}. \quad (8)$$

ここで、*正規*のモデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  上の *正規の実験*  $E_k = (J_k, U_k)$  から得られる共分散行列の分析に焦点を当てることができます。表記を簡単にするために、変数  $x_1, \dots, x_j \in J_k$  が介入され、変数  $x_{j+1}, \dots, x_n \in U_k$  が受動的に観測されると一般性を損なわずに仮定します。この実験の共分散行列は、次のブロック形式となる。

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & (\mathbf{T}_{\mathbf{x}})^{kT} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k)_{U_k} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

何所

$$\begin{aligned} \mathbf{t}^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{b} \mathbf{u})^{-1} \mathbf{b} \mathbf{j}, \\ (\mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k)_{UU} &= (\mathbf{I} - \mathbf{b} \mathbf{u})^{-1} (\mathbf{b} \mathbf{j} (\mathbf{b} \mathbf{j})^T + (\sigma_{\mathbf{e}})_{uu}) (\mathbf{I} - \mathbf{b} \mathbf{u})^{-T}. \end{aligned}$$

こっくろこっくろ

左上のブロックは恒等行列  $\mathbf{I}$  で、*正規の実験*では介入された変数は単位分散で独立にランダム化されるからである。我々は、より複雑な右下のブロックの受動的観測変数間の共分散を3.2節で検討する。左下のブロック  $\mathbf{T}^k$  は、いわゆる *実験効果*である。  
 $ikuk$  実験効果  $t(x_i \sim x_u \parallel J_k)$  は、実験  $E_k = (J_k, U_k)$  において、変数  $x_i$  が変数  $x_u$  に及ぼす全体的な因果効果であり、それに相当する。

は、 $x_u$  をこの実験で介入された変数の集合に回帰させたときの  $x_i$  の係数である。変数  $x_i$  のみが実験に介入した場合、実験効果  $t(x_i \sim x_u \parallel \{x_i\})$  は標準的に *全効果*と呼ばれ、単に  $t(x_i \sim x_u)$  と表記される。 $x_u$  を除くすべての観測変数に介入した場合、実験効果は *直接効果*と呼ばれる:  $t(x_i \sim x_u \parallel V \setminus \{x_u\}) = 0$ 。

$$b(x_i \rightarrow x_u) = (\mathbf{B})_{ui} = b_{ui}.$$

2つの変数の間の共分散は、いわゆる「トレックルール」によって計算することができます。いくつかの形式

これらのルールは、Wright (1934) のパス解析の手法に遡る。我々の場合、これらのトレックルールは、実験効果  $t(x_i \sim x_u \parallel J_k)$  が、操作されたグラフの  $x_i$  で始まり  $x_u$  で終わるす

すべての有向パス上の変数に寄与する経路因果を表現の学習を意味している。

$P(x_i \sim x_u \mid J_k)$  とする。各パス  $p \in P(x_i \sim x_u \mid J_k)$  の寄与は、以下の式で形式化されるように、パス上のエッジ  $x_l \rightarrow x_m$  に関連する係数  $b_{ml}$  の積で決定される。

$$t(x_i \sim x_u \mid J_k) = \sum_{p \in P(x_i \sim x_u \mid J_k)} \prod_{(x_l \rightarrow x_m) \in p} b_{ml}、$$

ここで、積は経路  $p$  上のすべての辺  $x_l \rightarrow x_m$  に対して取られる。この式の完全な導出は付録Cに示されている（Mason, 1956の式12aも参照）。

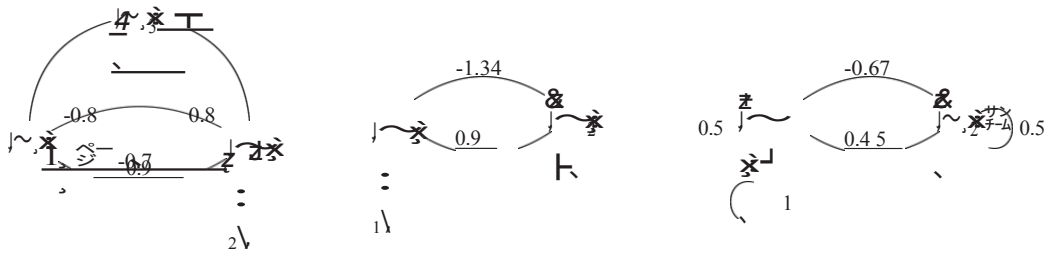


図4：左：元の漸近的に安定なモデル。中央：弱くしか安定しないマージナル化されたモデル。右：自己サイクルを持つ限界化モデル：漸近的に安定な自己サイクルを持つマージナル化モデル。

モデルにサイクルが含まれている場合、ある変数から他の変数への有向パスが無限に存在することになる。図3のモデル例では、トレックルールを用いて以下のように実験効果を計算することができる：

$$t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) = (b_{31} + b_{4134})(1 + b_{4334} + (b_{4334})^2 + \dots) = \frac{b_{31} + b_{4134}}{1 - b_{4334}}, (10)$$

$$t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) = (b_{41} + b_{3143})(1 + b_{4334} + (b_{4334})^2 + \dots) = \frac{b_{41} + b_{3143}}{1 - b_{4334}}. (11)$$

幾何級数の収束は、実験  $J_k = \{x_1, x_2\}$  の漸近安定性の仮定によって保証され、（唯一の）非ゼロ固有値  $\lambda = b_{4334}$  が以下を満たすことを保証する。  
 $|\lambda| < 1$ .

なお、実験効果は潜在的交絡の影響を受けていない。というのも、相互この独立性は、環状グラフに拡張されたグラフィカルなd-separation基準(Spirtes, 1995)からも直接導かれます：図3では、変数  $x_1$ 、 $x_3$  は、両頭の矢印を通る無向きのパスのいずれによってもd-connectedではない。

### 2.3 マージナル化 (Marginalization)

相関誤差を持つ線形構造方程式モデルの重要な特徴の1つは、モデルファミリーがマージナル化で閉じていることである。つまり、元の変数セット  $V$  の代わりに、次のような変数セットだけがあるとした。

が変数の部分集合  $V' \subset V$  にアクセスする場合、元のモデル  $(B, \Sigma_e)$  がモデルファミリーに属するとする、

であれば、 $V$  上のマージナル化モデル  $(\tilde{B}, \tilde{\Sigma}_e)$  もファミリーに含まれる。を通る有向パスがあれば

限界変数は  $\tilde{B}$  の有向辺に変換され、限界変数の交絡効果は外乱の共分散行列  $\tilde{\Sigma}_e$  に統合されます。

例えば、図4左は、変数  $V = \{x_1, x_2, x_3\}$  に対する漸近安定モデル  $(B, \Sigma_e)$  のグラフ構造と辺係数を示している。説明のために、変数  $x_3$  は観測されないと仮定する。そこで、マージナルモデルを記述したい。

$(\tilde{B}, \tilde{\Sigma}_e)$  を変数  $V = \{x_1, x_2\}$  だけに対して行う。重要なことは、この2つのモデルは、同じオブザベーションを生成することである。

受動的な観察設定と同時に、変数  $x_1, x_2$  に関するサーベイションがあります。

$x_1$ 、 $x_2$ 、 $\{x_1, x_2\}$  に介入する実験。つまり、マージナル化されたモデルは、以下のようになるはずだ。

$V$  の観測値が、すべての実験において元のモデルから得られる観測値と一致するようにする。

の両方で実行可能なイメージを持つ。したがって、 $x_1$  に介入する実験では、実験的な

の効果  $t(x_1 \sim x_2 \parallel \{x_1\}) = -0.7 - 0.8 - 0.8 = -1.34$  オリジナルモデルの実験効果は、マージナル化モデルの対応する実験効果に等しいはずです。もし、自己サイクルを追加したくない場合は、 $b \sim_1 = -1.34$ とするのが唯一の可能性である。同様に、 $b \sim_2 = t(x_2 \sim x_1 \parallel \{x_2\}) = 0.9$ とする。これにより、図4(中央)のモデルが得られる。

ただし、元のモデルは漸近安定であったが (**B**の固有値を計算すれば簡単にわかる)、**B**は絶対値が1より大きい固有値を持つため、マージナル化したカノニカルモデルは漸近安定でないことに注意。このように、関連する変数が分析に含まれていない場合、限界化では漸近安定性が保てない場合があることがわかる。幸運なことに、我々の識別の目的には、もっと弱い仮定で十分であることが判明した。この仮定を弱安定と呼ぶことにする:

**定義6 (弱安定性)** 潜在変数を持つ線形循環因果モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_c)$  は、すべての実験  $E_k = (J_k, U_k)$  に対して、行列  $\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}$  が反転可能である場合にのみ弱安定である。

なお、行列  $\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}$  の反転性は、行列  $\mathbf{U}_k \mathbf{B}$  にちょうど1に等しい固有値がないことと等価である (係数1の複素数固有値は、固有値が1である限り許される)。

の値は正確に  $1 + 0i$  ではない)。したがって、漸近的に安定なモデルは、定義上、弱安定でもある。

先に、漸近安定性は我々の文脈では不必要に強い仮定であることを指摘した。実際、この論文で紹介するすべての理論において、数学的に必要なのは弱い安定性だけである。しかし、数学的には好都合ですが、弱い安定性だけでは解釈の曖昧さを招く可能性があります: 式2で示した周期モデルの時系列解釈では、漸近的に安定でない弱安定モデルは、1つ以上の実験で平衡分布が得られないことになります。図4は、隠れ変数をマージナル化すると漸近安定性が失われる可能性があることを示しているが、ある実験に対して漸近安定でない学習済みモデルが、そのような問題のないケースに相当するのか、あるいはその実験において本当に基礎となるシステムが不安定なのかを一般的に知ることはできない。

本論文の残りの部分では、学習したモデルの一貫した解釈を保証するために、真の基礎となる漸近的に安定なデータ生成モデルが存在すると仮定し、場合によっては隠れ変数も含め、それによってすべての実験に対してよく定義された平衡分布が保証される。学習された弱安定モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_c)$  の解釈は、真の漸近安定モデルによって平衡時に生成される観測変数上の分布が、式7と式8で記述されるように平均と共分散を持つということだけである。<sup>3</sup> 漸近的に安定なモデルについて導かれたすべての方程式は、弱安

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
 定なモデルにも引き継がれる。<sup>4</sup>以下の2つのレムでは、観測変数に対する正準モデルが、隠れ変数と自己サイクルの場合（それぞれ）、元の線形サイクリックモデルとどのように関連しているかの詳細を与える。

潜在変数を持つ任意の線形構造方程式モデルのマージナル化モデルは、以下の Lemma の助けを借りて得ることができる。

**Lemma 7 (Marginalization)**  $(B, \Sigma_c)$  を変数上の弱安定線形環状モデルであるとする。 $V$ 、潜在変数を持つ。 $M \subset V$  を限界化された変数の集合を表すとする。すると、マージナル

- 
3. あるいは、基礎となるモデルの漸近安定性を仮定しないこともできるが、その場合、実験結果の予測は、当該実験が平衡分布になることを条件とする必要がある。
  4. 発散幾何級数の和は、和の公式  $\sum_{i=0}^{\infty} b^i$  を本質的に拡張することで評価できる。 $\sum_{i=0}^{\infty} b^i = \frac{1}{1-b}$   
 を  $b > 1$  のときにも適用できるようにした (Hardy, 1949)。

変数 $V \sim$ に対するモデル ( $B \sim, \Sigma \sim$  = によって定義される  $V \setminus M \sim$ ) を作成した。

$$\begin{aligned} B \sim &= b \sim + b \sim_{VV} (i - b_{mm}) b^{-1} \sim_{MMV} \\ \Sigma \sim_e &= (i - b) (i - b) - 1 \Sigma_e (I - B)^{-T} \sim_V (I - B)^{-T} \end{aligned}$$

も潜在変数を持つ弱安定線形循環因果モデルである。元のモデルの限界化共分散行列と限

界化モデルの共分散行列は、等しく

$V \sim$  の変数の任意の部分集合が介在する任意の実験。

$B \sim$  と  $\Sigma \sim_e$  の式は、直感的に理解できる簡単な説明がある。まず、係数行列  $B \sim$  は  $V \sim$  の変数の間に存在する係数で与えられる。

元のモデルに、 $V \sim$  の変数から  $M \sim$  の変数を経由する元のモデル内のパスを加えたもの。

と  $V \sim$  の変数に戻す。次に、マージナル化された外乱共分散行列  $\Sigma \sim_e$  は

は、 $V \sim$  の変数に関する観測された共分散を考慮することで得られる。

$V \sim$  の変数間の因果関係は、どのような実験でも限界モデルの共分散が元のモデルの共分散と同じになるようにします。

未観測変数のマージナル化に加え、自己ループを持つ任意の線形周期モデルから正統的モデル（すなわち、自己ループなし）を導出することに興味がある場合がある。これは次のレンマで可能である。

**レンマ8 (自己サイクル)**  $U_i$  を、要素  $(U)_{iii} = 1$  を除いてすべてゼロである  $(n \times n)$  -行列とする。 $_{ii}$  係数  $b$  を持つ変数  $x_i$  の自己ループを含む弱安定モデル  $(B, \Sigma_e)$  に対して、次のようになる。

で与えられる自己ループを持たないモデルを定義する。

$$\begin{aligned} B \sim &= B - \frac{b}{1 - b_{ii}} U_i (I - B) \text{、} \\ \Sigma \sim_e &= (I + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} U_i) \Sigma_e (I + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} U_i)^T \text{。} \end{aligned}$$

その結果、モデル  $(B \sim, \Sigma \sim_e)$  も弱安定で、すべての実験において平衡で同じ観測値を得ることができる。

図5は、このレンマの2つのモデルにおけるエッジの強さの関係を明示的に示したものである。係数の一部を再スケーリングしているだけなので、削除された自己ループを除けば、モデルのグラフ構造はそのままである。共分散行列  $\Sigma_e$  の構造も変化せず、1行と1列のみが再スケーリングされる。いくつかの自己ループを持つモデル  $(B, \Sigma_e)$  に対して、レンマ8を繰り返し適用して、自己ループのないモデルを得ることができる。これは、すべての実験に対して元のモデルと同じ平衡データをもたらすという意味で、元のモデルと同等である。マージナル化と同様に、自己ループの除去による標準化は、たとえ元のモデルであっても、漸近的に安定ではなく、弱く安定な正準モデルを生成する可能性があることに注意。



は漸近的に安定した。潜在変数による線形循環因果モデルの学習

結局のところ、自己ループは均衡に収束するまでのスピードや経路に影響を与えるが、均衡そのものには影響を与えない。我々のアプローチは、時系列の因果過程を扱わないため、自己ループに関する洞察は得られない。しかし、自己ループに関する不確定性は、学習したモデルが正準形式で、つまり、自己ループが存在しない状態で表現されても、均衡時の予測に影響がないことを意味する。したがって、データ生成モデルにおいて自己ループは厳密には禁止されていないが、以下の節では、自己ループのないモデルの観点から完全に理論を提示することができる。

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

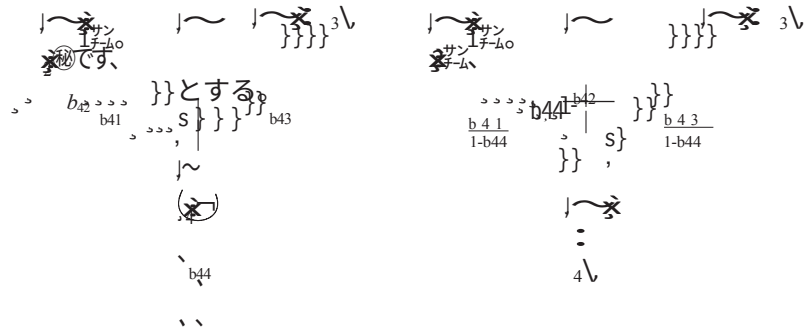


図5：自己ループを持つモデル（左）から自己ループを持たないモデル（右）へ係数を振動させた場合。2つのモデルは、均衡データから区別がつかない。

### 3. 識別可能性

受動的な観測・実験環境下でのモデルの完全な特徴づけにより、モデルパラメータを同定するのに十分（セクション3.1）かつ必要（セクション3.2）な条件を（実験セット上で）特定できるようになった。全体を通して、完全な同定（解の一意性）と表記上の簡略化のために、各実験において、式8で記述されるように無限サンプル限界で共分散行列を観測し、基礎モデルとすべての実験の両方が正準であると仮定します。前節で述べた理由から、我々はまた、我々が観察するモデルのマージナルな部分が弱く安定しているだけかもしれないが、漸近的に安定である基礎的な生成モデルがあると仮定する。我々が開発した学習アルゴリズムに興味のある読者は、セクション4まで読み飛ばして、必要なときにこのセクションの同定可能性条件に戻ってくればよい。

#### 3.1 充足感

図3の4変数の例に戻り、 $x_1$  と  $x_2$  が介在する場合、トレックルールを用いて実験効果  $t(x_1 \sim x_3 \parallel \{x_1, x_2\})$  と  $t(x_1 \sim x_4 \parallel \{x_1, x_2\})$  を式10と11で既に導きました。これらの式をまとめると、以下のようになります。

$$\begin{aligned} t(x_1 \sim x_3 \parallel \{x_1, x_2\}) &= b_{31} + t(x_1 \sim x_4 \parallel \{x_1, x_2\})b_{34} \\ &= t(x_1 \sim x_3 \parallel \{x_1, x_2, x_4\}) + t(x_1 \sim x_4 \parallel \{x_1, x_2\})t(x_4 \sim x_3 \parallel \{x_1, x_2, x_4\}). \end{aligned} \quad (12)$$

なお、式12は、 $\{x_1, x_2\}$  に介入した場合の実験効果と  $\{x_1, x_2, x_4\}$  に介入した場合の実験効果を関連付けている。これは、実験効果  $t(x_1 \sim x_3 \parallel \{x_1, x_2\})$  が、 $x_4$  を通らない単一のパス（寄与  $b_{31}$ ）を、すべて  $x_4$  を通る残りのパスから分離することによって計算でき

ることを示す。潜在変数による線形循環因果モデルが通常に  $x_4 \rightarrow x_3$  です。したがって、 $x_4$  を通るパスの合計寄与は、積  $t(x_1 \sim x_4 \parallel \{x_1, x_2\})b$  となります。<sup>34</sup>

式12は、フルモデルパラメータを同定するための、2つの別々の、しかし関連するアプローチを示している。

エーテルは、測定された実験効果のセットから得られる：一方では、ある実験セットの実験効果が、（既存のセットにはない）新しい実験の実験効果を特定するためにどのように利用できるかを示す例となる。したがって、1つの変数を除くすべての変数に介入する実験の実験効果をすべて推論できる実験セットがあれば、すべての直接効果を決定し、それによって**B行列**を特定したことになる。一方、式12は、測定された実験効果を用いて、どのように構成することができるかを示している。

未知の) 直接効果に対する線形制約  $b_{ji}$ 。したがって、すべての直接効果について解くのに十分な制約を満たす実験セットがあれば、再び**B行列**を同定することができるだろう。いずれの場合も、同定可能性を考える上で重要なのは、次のような問題である: モデルを特定するのに十分な実験効果をもたらす実験セットはどれか? 意外なことに、答えはどちらの場合も同じである。簡略化のため、本節では識別可能性の証明を第一のアプローチで示す。セクション4の学習アルゴリズムには、線形制約のシステムを含む第2のアプローチを用いる。

式 12 の例は、次のように一般化することができる: 前述のように、漸近的に安定なモデルの場合、実験  $E_k = (J_k, U_k)$  における  $x_i \in J_k$  の  $x_u \in U_k$  に対する実験効果  $t(x_i \sim x_u \parallel J_k)$  は、 $x_i$  から  $x_u$  へのすべての有向パスの係数の総積となる。観測変数  $x_j \in U_k$  に関して、2つの部分に分けて総積を計算することができる。まず、 $x_j$  を通らないすべてのパスを考える。 $x_j$  を通るすべてのパスは、 $x_j$  に追加的に介入することで遮断されるため、これらのパスの総積は実験効果  $t(x_i \sim x_u \parallel J_k \cup \{x_j\})$  と等しい。次に、残りのパスはすべて  $x_i \sim x_j \sim x_u$  という形式であり、 $x \sim_j$  は

$x_j$  がパス上に最後に出現したとき (パスにはサイクルが含まれることがあるので、 $x_j$  がパス上に複数出現することがあることを思い出してください)。すべてのサブパス  $x_i \sim x_j$  の係数の和積は  $t(x_i \sim x_j \parallel J_k)$  で与えられ、すべてのサブパス  $x_j \sim x_u$  の係数の和積は  $t(x_j \sim x_u \parallel J_k \setminus \{x_j\})$  である。

サブパス  $x_i \sim x_j$  と  $x_j \sim x_u$  のすべての組み合わせを取ると、すべてのパスの寄与が得られます。

$x_j$  を通して、積  $t(x_i \sim x_j \parallel J_k) t(x_j \sim x_u \parallel J_k \setminus \{x_j\})$  となります。したがって、次のようになります。

$$t(x_i \sim x_u \parallel J_k) = t(x_i \sim x_u \parallel J_k \setminus \{x_j\}) + t(x_i \sim x_j \parallel J_k) t(x_j \sim x_u \parallel J_k \setminus \{x_j\})。 \quad (13)$$

この式は付録Fで正式に導かれており、(漸近的に安定なモデルだけでなく) すべての弱安定なモデルで成立することも示されている。

ここで、2つの異なる実験から得られた上記のタイプの方程式を組み合わせ、新しい第3の実験の実験効果を決定することができることを示す。例えば、図2の変数  $V = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$  に対するモデルを考える。このとき、2つの単一介入実験が行われたとする。iments  $E_1 = (J_1, U_1) = (\{x_1\}, \{x_2, x_3, x_4\})$  and  $E_2 = (\{x_2\}, \{x_1, x_3, x_4\})$  を作ることで、以下ようになります。  
を、各実験の式 13 でそれぞれ代入した、

$$J_k := J_1 = \{x \quad \} \text{ となります。}_1$$

潜在変数による線形循環因果モデルの学習

$$J_k := J_2 = \{x_j := x_2, x_u := x_3\} \text{ となりま$$

$$す。$$

$$x_i := x_2$$

$$x_j := x_1$$

$$x_u := x_3$$

とすると、元の2つの実験における実験効果と、連合実験の実験効果  $E_3 = (\{x_1, x_2\}, \{x_3, x_4\})$  ( $J_3 = J_1 \sqcup J_2$  のため「連合」実験と表記する) の関係式が2つ得られる:

$$\frac{1}{t(x_2 \sim x_1 || \{x_2\})} \frac{t(x_1 \sim x_2 || \{x_1\})}{1} \frac{t(x_1 \sim x_3 || \{x_1, x_2\})}{t(x_2 \sim x_3 || \{x_1, x_2\})} = \frac{t(x_1 \sim x_3 || \{x_1\})}{t(x_2 \sim x_3 || \{x_2\})}$$

上式で、左側の行列の量、右側のベクトル  $\begin{Bmatrix} t(x_1 \sim x_2 || \{x_1\}) \\ t(x_2 \sim x_3 || \{x_1, x_2\}) \end{Bmatrix}$  の要素は、実験データから得られる実験効果である。未知の量は、左辺のベクトルにある。さて、左側の行列が反転可能であれば、最初の2つの実験の実験効果から、3番目の実験の実験効果を直接解くことができます。(他の実験効果についても同様の式が成り立つ)。このとき

以下のレンマは、弱い安定性条件が成立するとき、行列が反転可能であることを示し、一般に、2つの実験で観測された実験効果から、それらの結合実験と交差実験における実験効果を常に推定できることを示す。

**Lemma 9 (Union/Intersection Experiment)** 弱安定正規モデルにおいて、2つの実験  $E_k = (J_k, U_k)$  と  $E_l = (J_l, U_l)$  における実験効果を決定する。

- 連合実験  $E_{k \cup l} = (J_k \sqcup J_l, U_k \cap U_l)$  である。
- 交差点実験  $E_{k \cap l} = (J_k \cap J_l, U_k \cup U_l)$ 。

0/や  $V$  に介在する実験では実験効果がないため、これらの場合は実験効果が些細に決定されると考えられる。連合実験の場合、実験の完全な共分散行列  $C^{k \cup l}$  も決定することができる。交差実験の場合

$C^{k \cap l}$  は、受動的な観測データがあれば、十分に判断できる（付録J参照）。

正準モデルでは、変数  $x_u$  へのアークの係数  $b(- \rightarrow x_u)$ （直接効果  
他の変数のその変数に対する影響）は、 $x_u$  以外に介入した場合の実験効果と等しい、つまり、 $b(- \rightarrow x_u) = t(\sim x_u \parallel V \setminus \{x_u\})$  となります。したがって、特定の直接効果を決定するためには、与えられた一連の実験が、以下を適用するための基礎を提供することを保証することで十分である。

1つの変数以外に介入した実験の実験効果を得るために、レムマ9を繰り返す。4変数の例では、まず、Lemma9を用いて、 $\{x_1\} \cup \{x_2\} = \{x_1, x_2\}$  に介入した場合の実験効果を計算し（上記のように提案）、次のように与えることができます。

$x_4$  にのみ介入するさらなる実験を行うことで、実験効果を決定することができます。

$\{x_1, x_2\} \cup \{x_4\} = \{x_1, x_2, x_4\}$  に介在する実験の。得られた実験効果は、直接効果  $b(- \rightarrow x_3)$  を構成する。したがって、各変数について単一介入実験が可能であれば、レンマを用いてモデルのすべての直接効果を同定することは容易である。

では、レンマ9を繰り返し適用することで、すべての可能な直接効果を導き出すことができるような実験集合の一般的な条件は何であろうか。すべての順序付き変数の組について、次の組条件が満たされれば、すべての直接効果を決定できることが判明した。

**定義10（ペア条件）** 実験のセット  $\{E\}_{kk=1, \dots, K}$  は、変数の順序付きペア  $(x_i \dots)$  についてペア条件を満たす、 $x_u) \in V \times V$  (with  $x_i \neq x_u$ ) は、 $\{E\}_{kk=1, \dots, K}$  に  $x_i \in J_k$  ( $x_i$  が介入している)、 $x_u \in U_k$  ( $x_u$  が受動的に観察されている) という実験  $E_k = (J_k, U_k)$  が存在すればいつでも、そのような条件を満たす。

**B**を特定するには、変数のすべての順序ペアについて成立するペア条件が十分であることを見るのは難しくない。1つの変数 $x_u$ を考える。すべての順序ペアについてペア条件を満たす実験セットから、すべての $x_i \neq x_u$ について、ペア条件を満たす実験を見つけることができる。

のペア $(x_i, x_u)$ とする。以下では、このような実験を $E_i = (J \sim i, U \setminus i)$ と呼ぶことにする。さて、反復して

Lemma 9を用いると、実験 $\{E_i \sim i\}_{i \neq u}$ の連合実験 $E \models (J \sim u, U \setminus u)$ において、 $J \sim \square =_{St \neq u} J \sim i$ の変数に介入した実験効果を求めることができる。各 $x_i$ は少なくとも1つの実験で介入されたので、 $\square \neq u : x_i \in J \sim \square$ である。変数 $x_u$ は各実験で受動的に観察されたので、 $x_u \notin J \sim u$ となる。この連合実験が $J \sim \square = V \setminus \{x_u\}$ に介入する実験効果は、このように直接効果 $b(-\rightarrow x_u)$ となる。同様の操作を各 $x_u \in V$ は、すべての直接効果を識別することができます。

したがって、すべての順序付きペアについてペア条件が満たされれば、**B**のすべての要素を決定することができ、あとは外乱の共分散行列 $\Sigma_e$ を決定するだけである。受動的観測データの共分散行列 $C^0$ は、ヌル実験 $E_0 = (0/, V)$ から推定することができる。**B**と $C^0$ が与えられれば、式3を用いて $\Sigma_e$ を解くことができる:

$$\sigma_e = (\mathbf{i} - \mathbf{b})\mathbf{c}^0 (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T. \quad (14)$$

ヌル実験がない場合、共分散行列のブロック $(\Sigma_e)_{U_k, U_k}$ は、代わりに式8を用いて任意の実験における共分散行列 $E_k = (J_k, U_k)$ から決定することができる:

$$(\Sigma_e)_{U_k, U_k} = [(\mathbf{i} - \mathbf{u}_k)\mathbf{b}]\mathbf{c}^k (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k)\mathbf{b}^T]_{u_k, u_k}. \quad (15)$$

その結果、**B**が与えられたとき、以下の共分散条件を満たせば、 $(\Sigma_e)_{ij} = \Sigma_{ij}$ と判断することができる。

**定義11 (共分散条件)** 実験の集合 $\{E_k\}_{k=1, \dots, K}$ は、変数の非順序ペア $\{x_i, x_j\}$ について共分散条件を満たす。 $\subseteq V$ は、 $x_i \in U_k$ と $x_j \in U_k$ 、つまり両変数が受動的に観測されるような実験 $E_k = (J_k, U_k)$  in  $(E)_{k=1, \dots, K}$ が存在するたびに、その条件を満たす。

ペア条件と同様に、**B**がわかっていて、すべての変数のペアについて共分散条件が満たされていれば、 $\Sigma_e$ のすべての共分散を特定することができます。各変数 $x_i$ は少なくとも1回の実験で受動的に観測されなければならないという仮定が含まれているので、分散 $(\Sigma_e)_{ii}$ は決定できることに注意。

この結果をまとめると、カノニカルモデルの十分な同定可能条件が得られる:

**定理12 (識別可能性-充足性)** 正準実験 $\{E_k\}_{k=1, \dots, K}$ が与えられたとき、変数 $V$ 上の弱スタブ正準モデル $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$ は、実験の集合が、変数の各順序付きペア $(x_i, x_j) \in V \times V$  (with  $x_i \neq x_j$ ) のペア条件と変数の各非順序付きペア $\{x_i, x_j\}$ の共分散条件を満たす場合、変数 $V$ 上の識別が可能である。 $\subseteq V$ .

図2の4変数の場合、例えば、 $\{x_1, x_2\}, \{x_2, x_4\}, \{x_1, x_4\}, \{x_3\}$ に介入する実験セットで識別可能条件が成立する。明らかに、単一介入実験のフルセットまたはオールブットワン実験のフルセットと受動的な観測データセットでも可能である。この問題については4.2節で触れることにする。

### 3.2 必要性

定理12の条件が識別可能性にとって十分であるばかりでなく、実際には必要であること



を示すために、ある変数ペアに対してペア条件または共分散条件が満たされない場合に何が起こるかを検討する。共分散条件は**B**が既に同定されている場合にのみ $\Sigma_e$ の同定可能性を保証するので、より基本的な**対の条件**から始めることにする。

図6の2つのモデルを考えてみよう。このモデルは、パラメータはもちろん、構造さえも異なるが、すべての実験において、ペア条件を満たさない同じ観測結果をもたらす。

は、（順序）ペア  $(x_2, x_4)$  についてである。つまり、 $x_2 \in J_k$  と  $x_4 \in U_k$  が成立しない実験（受動的観測を含む）については、2つのモデルは区別できないが、 $(x_2, x_4)$ のペア条件を満たす実験については、一般的に2つのモデルは

は、実験効果が異なる（直接効果 $b_{42}$ の違いによる）。左のモデルでは、 $b_{42}$ による効果を分離することはできないので、ペアの条件を満たすことなく、ペアのための

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

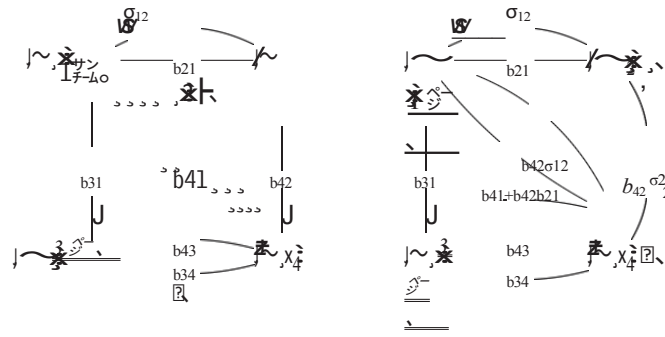


図6: モデルの未決定。左側: データ生成モデル $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$ 。右側: 順序ペア $(x_2, x_4)$ のペア条件を満たさない、すべての実験で同じ観測値を生成するモデル $(\tilde{\mathbf{B}}, \tilde{\Sigma}_e)$ 。

$(x_2, x_4)$ , その効果は右のモデルの他の場所で説明することができる。例えば、欠落したパス  $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_4$  の効果は、右のモデルにおいて、弧  $x_1 \rightarrow x_4$  の摂動係数  $b_{41} + b_{4221}$  によって説明される。

右のモデルの $\tilde{\mathbf{B}}$ 行列は、左のモデルの $\mathbf{B}$ 行列に摂動をかけて構築したものである。は、ペア条件を満たさないペア $(x_2, x_4)$ に対応する係数 $b_{42}$ 。摂動は、次のレンマで $\delta := -b_{42}$  とすることに相当する。

**Lemma 13 (Perturbation of  $\mathbf{B}$ )**  $\mathbf{B}$  を  $V$  上の弱安定正準モデルの係数行列とし、 $\{E\}_{kk=1, \dots, K}$  を、あるペア $(x_i, x_j)$  に対してペア条件を満たさない $\mathbf{B}$  上の実験の集合とする。集合  $K = V \setminus \{x_i, x_j\}$  と  $L = \{x_i, x_j\}$  とする。このとき、係数行列 $\tilde{\mathbf{B}}$  は次のように定義される。

$$\tilde{\mathbf{B}}_{KV} = \mathbf{B}_{KV} + \delta \mathbf{b}_{42} \mathbf{e}_{42}^T, \quad \tilde{\mathbf{b}}_{ik} = (\mathbf{i} - \mathbf{B}_{ll})(\mathbf{i} - \mathbf{b}_{ll})^{-1} \mathbf{b}_{lk}$$

は、ペア $(x_i, x_j)$  のペア条件を満たさない実験では、 $\mathbf{B}$  と同じ実験効果をもたらす。自由パラメータ $\delta$  は、 $\tilde{\mathbf{B}}$  が弱く安定するように選択されなければならない。

レンマ13は、ペア  $(x_i, x_j)$  についてペア条件が満たされない場合、測定した実験効果に基づいて $b_{ji}$  を特定できないことを示す。この例のように、一般には、 $\delta \neq 0$  の場合、モデル $\mathbf{B}$  と $\tilde{\mathbf{B}}$  は、ペア $(x_i, x_j)$  のペア条件を満たすどの実験でも、異なる実験効果をもたらすということを意味する。 $\delta$  の選択は重要ではなく、ほとんどの選択肢は

は、弱く安定した摂動モデルを生成する。

摂動の効果をより明確に見るために、次のように明示的に書くことができる:

潜在変数による線形循環因果モデルの学習で終わらない辺は変更なし)<sub>j</sub>

$b \sim_{ji} = b_{ji} + \delta$ である、 $(x_i \text{ の } x_j \text{ への直接効果を } \delta \text{ で摂動させる})$

$b \sim_{jj} = 0$ となる、 $(x \text{ で自己ループなし})_j$

$\square k \square / \{i, j\} : b \sim_{jk} = b_{jk} \frac{-\delta b_{ik} + b_{ij} b_{jk}}{1 - b_{ij} b_{ji}}.$   $(x \text{ への入射アークに必要な調整})_j$

上記の形から、ペア条件  $(x_i, x_j)$  に対してペア条件が満たされない場合、一般的にBのj行目の係数もすべて未同定になる可能性があることが明らかになった。従って、ペア条件を保証するために

係数 $b_{ji}$ の識別可能性は、すべてのペア $(x_i, x_j)$ についてペア条件が満たされている必要があります。図6では、ペア $(x_2, x_4)$ に対するペア条件が満たされていないため、係数 $b_{42}$ は未同定である。しかし、その結果、 $b_{41}$ も未同定となる。しかし、この例では、グラフの構造上、係数 $b_{43}$ がたまたま特定される。

もし、いくつかのペアについてペア条件が満たされない場合、レンマ13を各欠落ペアについて繰り返し適用することで、異なる係数を持つモデルに到達し、問題のペアを満たさないすべての実験についてオリジナルと同じ実験精神効果をもたらすことができます。各欠落ペアによって、システムに自由度が追加される。

レンマ13は、元のモデルと摂動されたモデルの実験効果が同じであることを保証しているに過ぎないことを強調しておく。しかし、次のレンマは、図6のように、あるペア $(x_i, x_j)$ に対してペア条件を満たさない実験では、2つのモデルが完全に区別できなくなるように、外乱の共分散行列を常に摂動させることができることを示す。

**Lemma 14 (Perturbation of  $\Sigma_e$ )** データを生成する真のモデルを $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$ とする。各実験 $\{E\}_{kk=1, \dots, K}$ について、得られたデータの共分散行列を $\mathbf{C}^k$ とする。すべての $\{E\}_{kk=1, \dots, K}$ とすべての $x_i \in J_k$ と $x_j \in U_k$ に対して、同じ実験効果 $t(x_i \sim x_j \parallel J_k)$ をもたらすような係数行列 $\tilde{\mathbf{B}} \neq \mathbf{B}$ が存在するなら、 $\tilde{\Sigma}_e = (\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{B}})(\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Sigma_e (\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{B}})^T$ とするモデル $(\tilde{\mathbf{B}}, \tilde{\Sigma}_e)$ は存在する。また、すべての $k = 1, \dots, K$ に対して、データ共分散行列 $\tilde{\mathbf{C}}^k = \mathbf{C}^k$ を生成し

レンマ14は、レンマ13と組み合わせて、識別可能性のために、ペア条件がすべてのペアに対して満たされなければならないことを示す。あるペアについてペア条件が満たされない場合、(2つのレンマを使用して)以下のような代替モデル(真の基本モデルとは異なる)を構築することができる。

は、利用可能なすべての実験について、まったく同じ共分散行列 $\mathbf{C}^k$ を生成する。図6では、ミッシングリンク $x_2 \rightarrow x_4$ の効果が、 $e_2$ と $e_4$ の間の追加の共分散 $b_{42}^2$ によって模倣されている。<sup>4</sup>

と、 $e_1$ と $e_4$ の間の共分散 $b_{42} \sigma_{12}$ である。

この結果は、実験効果に基づく制約のみに基づいて係数行列 $\mathbf{B}$ を特定することが、すでに2次統計量によって要約された情報を十分に利用していることを意味している。受動的に観測された変数間の共分散(式9の右下のブロックに相当)は、さらなる情報を提供しない。したがって、我々はこの結果を得る：

**定理15 (完全性)**  $V$  の変数に関する実験セット  $\{E_k\}_{k=1,\dots,K}$  の共分散行列が与えられたとき、弱安定正準モデルのすべての係数  $b(x_i \rightarrow x_j)$  は、これらに関して変数のすべての順序付きペアについてペア条件が満たされる場合にのみ、同定されます。

の実験を行います。

直感的には、受動的に観測された変数間の共分散は、未知数  $\Sigma_e$  にも依存するため、係数  $B$  の特定には役立たず、追加された未知数が共分散測定の利用を押し流す。

$B$  が既知であったり、すべてのペアについてペア条件が成立していても、ペア  $\{x_i, x_j\}$  について共分散条件が成立していない場合、一般に共分散  $\sigma_{ij}$  を特定することができない：実験のすべての操作グラフにおいて、弧  $x_i \leftrightarrow x_j$  はカットされているため、 $\sigma_{ij}$  のデータには影響がない。

がどのような方法であれこのことから、共分散条件も必要であることがわかる。ただし、対の場合とは異なり

の条件を満たさない場合、ある組の共分散条件を満たさなくても、他の共分散の識別可能性には影響しない。

ここで、これまでの結果を、フルモデルに対する十分かつ必要な識別可能性条件という形でまとめることができる。定理12は、ペア条件と共分散を満足することで

の条件をすべてのペアで満たすことがモデル同定可能性のために十分である。定理15は、変数のすべてのペアについてペア条件が満たされないと係数が同定できないことを示し、前項で、すべてのペアについて共分散条件を満たすことが、外乱のすべての共分散と分散を同定するのに必要であることを示した。これにより、以下の主結果が得られる。

実験セット  $\{E\}_{kk=1,\dots,K}$  が、すべての順序付きペア  $(x_i, x_j) \in V \times V (x_i \neq x_j)$  のペア条件とすべての順序なしペア  $\{x_i, x_j\}$  の共分散条件を満たす場合にのみ、 $V$  の変数に対する弱安定正準モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  のパラメータが特定される。  $\subseteq V$  .

最後に、識別可能性の結果と学習アルゴリズム（セクション4）は、データの2次統計とモデル空間の仮定にのみ基づいていることに留意されたい。追加の背景知識は含まれない。データが多変量ガウスである場合、これらの統計は利用可能な情報を使い果たし、それゆえ我々の識別可能条件は（少なくとも）この場合に必要である。

## 4. 学習方法

本節では、与えられた変数セットに対する実験セットから有限のサンプルデータが与えられた場合に、潜在変数を持つ線形循環モデルを推論するためのアルゴリズム（LLCと呼ばれる）を提示する。Lemma 9 (Union/Intersection Experiment)は、Collollary 16 (Model Identifiability)の条件を満たす正規の実験セットが与えられた場合のモデル発見の手順を自然に示唆しているが、本節では少し異なるルートを追求することにする。これにより、可能な限りモデルを特定することができるだけでなく、真のモデルが与えられた実験セットによって過大または過小に決定される場合の（一般的な）状況をより直感的に表現することができるようになる。前回に引き続き、弱安定カノニカルモデル（定義2、4、6）に対するカノニカル実験の集合を考えると仮定することにする。セクション2の議論から、この仮定は本質的に一般性を失うことなく行うことができることが明らかになったはずである：漸近的に安定なモデルは弱安定な正準モデルに変換でき、元の実験における介入が外乱に依存しない限り、どんな実験も正準実験として再記述することができる。ここで紹介するように、基本的なLLCアルゴリズムは、 $\mathbf{B}$  のすべてのエッジ係数の値の推定と、 $\Sigma_e$  の擾乱間の分散と共分散の推定のみを提供します。後ほど、パラメータの誤差推定値を得る方法と、基本アルゴリズムを構造発見などの異なる学習タスクに適応させる方法について説明する。

### 4.1 LLC Algorithm

アルゴリズムの導出を説明するために、再び、図3の  $x_1$  と  $x_2$  に介在する実験から導かれた式12から始める。

$$t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) = b_{31} + t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\})b_{34} .$$

これにより、測定された実験効果  $t(x_1 \sim x_j \parallel \{x_1, x_2\})$  の未知の直接効果  $b_{31}$  と  $b_{34}$  に対する  $x_3$  への線形制約が得られる。一般に、実験で観測された実験効果  $E_k = (J_k, U_k)$  は、未知の直接効果に対する線形制約として使用できる。

は、式12と同様に、次のような形式を持つ。

$$t(x_i \sim x_u \parallel J_k) = b_{ui} + \sum_{x_j \in U_k \setminus \{x_j, u\}} t(x_i \sim x_j \parallel J_k) b_{uj}, \quad (16)$$

ここで、 $x_i \in J_k$  および  $x_j, x_u \in U_k$ 。3.1節の式と同様に、漸近的に安定なモデルにおいては、式16もまた、漸近的に安定なモデルを結ぶ経路の和という観点から自然に解釈可能である。

の変数がある： $x_i$  が  $x_u$  に及ぼす実験的效果は、 $x_i$  が  $x_u$  に及ぼす直接的効果と、 $x_i$  から他の  $x_j \in U \setminus \{x_u\}$  への各パスの効果に、その  $x_j$  から  $x_u$  への直接接続を掛けたものである(あるいは、式13を繰り返し適用することによって式16に達することもわかる)。

実験  $E_k$  の共分散行列  $C^k$  は  $x_i \in J_k$  と  $x_j \in U_k$  を持つすべてのペア  $(x_i, x_j)$  の実験効果を含むので、各実験は式16の形の  $m_k = |J_k| \times |U_k|$  の制約を生成します。実験セット  $\{E_k\}_{k=1, \dots, K}$  について、我々は制約を  $B$  の  $(n^2 - n)$  未知の係数  $b_{ji}$  に線形な方程式系として表すことができる。(正準モデルではすべての  $i$  について  $b_{ii} = 0$  であることを思い出してください。

$$Tb = t \text{ である、} \quad (17)$$

ここで、 $T$  は (測定された) 実験効果の  $(\sum_k m_k \times (n^2 - n))$  -行列、 $b$  は  $(n^2 - n)$  -行列である。

ベクトルは未知の  $b_{ji}$  であり、 $t_k$  は (測定された) 実験に対応する  $(\sum_k m_k)$  -ary ベクトルである。

の影響を式16の左辺に与える。

行列  $T$  が完全な列順位を持つことを前提に、 $b$  についてこの方程式系を解き、 $b$  を  $B$  (ゼロの対角線を含む) に並べ替えることができます。任意の1つの制約 (例えば、式16) は、いくつかのエッジのエッジ係数に対応するタイプ  $b_u$ 、未知数を含むだけなので node  $x_u \in U_k$ 、方程式を並べ替えると、次のような方程式系を示すことができる。つぎのようなかたち

$$\begin{array}{ccc} \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad \boxed{\cdot} \\ \text{III} & b_1 & d \\ \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad t_2 \quad \boxed{\cdot}, \\ \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad \boxed{\cdot} & \boxed{\cdot} \quad \boxed{\cdot} \\ & b_n & \\ & \text{デーエヌエヌ} & tn \end{array} \quad (18)$$

ここで、 $T$  はブロック外のすべてのエントリーがゼロに等しいブロック対角行列である。式17の方程式系を  $(n^2 - n)$  個の未知数で解く代わりに、式18により、方程式系を  $n$  個のブロックに分離し、それぞれ直接効果  $b_u$  を異なる  $x_u$  に制約することができる。

このように、それぞれ  $(n - 1)$  個の未知数を持つ  $n$  個の方程式系  $T b_{uuu} = t_u$  を別々に解きます。このとき、行列  $T$  がフルカラムランクを持つのは、すべての  $T_{uu}$  が同様にフルカラムランクを持つ場合のみである。

例えば、図3の4変数モデルの  $J_k = \{x_1, x_2\}$  に実験が介在する場合、以下の実験共分散行列が得られる：

$$\begin{array}{ccc} \boxed{\cdot} & 1 & 0 \\ & t(x_1 \sim x_2 | \{x_1, x_2\}) & t(x_1 \sim x_2 | \{x_1, x_2\}) \end{array}$$



潜在変数による線形循環因果モデルの学習

$$C_k = \begin{pmatrix} \text{var}_k(x_1) & \text{cov}_k(x_1, x_2) & \text{cov}_k(x_1, x_3) & \text{cov}_k(x_1, x_4) \\ \text{cov}_k(x_2, x_1) & \text{var}_k(x_2) & \text{cov}_k(x_2, x_3) & \text{cov}_k(x_2, x_4) \\ \text{cov}_k(x_3, x_1) & \text{cov}_k(x_3, x_2) & \text{var}_k(x_3) & \text{cov}_k(x_3, x_4) \\ \text{cov}_k(x_4, x_1) & \text{cov}_k(x_4, x_2) & \text{cov}_k(x_4, x_3) & \text{var}_k(x_4) \end{pmatrix}$$

この共分散行列により、未知数に対する次の4つの線形制約を構成することができます。

$b$ 'sです:

$$t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) = b_{31} + t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\})b_{34}, \quad (19)$$

$$t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) = b_{41} + t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\})b_{43}, \quad (20)$$

$$t(x_2 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) = b_{32} + t(x_2 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\})b_{34}, \quad (21)$$

$$t(x_2 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) = b_{42} + t(x_2 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\})b_{43}. \quad (22)$$

さらに実験  $E_l = (J_l, U_l)$  で  $J_l = \{x_4\}$  とすると、以下の3つの追加制約が得られます:

$$t(x_4 \sim x_1 \mid \{x_4\}) = b_{14} + t(x_4 \sim x_2 \mid \{x_4\})b_{12} + t(x_4 \sim x_3 \mid \{x_4\})b_{13} \quad (23)$$

$$t(x_4 \sim x_2 \mid \{x_4\}) = b_{24} + t(x_4 \sim x_1 \mid \{x_4\})b_{21} + t(x_4 \sim x_3 \mid \{x_4\})b_{23} \quad (24)$$

$$t(x_4 \sim x_3 \mid \{x_4\}) = b_{34} + t(x_4 \sim x_1 \mid \{x_4\})b_{31} + t(x_4 \sim x_2 \mid \{x_4\})b_{32} \quad (25)$$

式19~25を式18の形に変換すると、式19、21、25は  $T_{33}$  の一部となり、式20、22は  $T_{44}$  の一部となり、残りの式23、24はそれぞれ  $T_{11}$  と  $T_{22}$  の一部となることがわかります。ここでは、式19、21、25で構成される  $T_{33}$  に注目する:

$$\begin{aligned} T_{33}b &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) \\ t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{31} \\ b_{32} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) \\ t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{31} \\ b_{32} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} t(x_1 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_4 \mid \{x_1, x_2\}) \\ t(x_1 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) & t(x_2 \sim x_3 \mid \{x_1, x_2\}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{31} \\ b_{32} \end{pmatrix} = t_3. \end{aligned}$$

のように  
なります。

Lemma9 (Union/Intersection実験) を考えると、実験  $E_k$  と  $E_l$  の実験効果は、 $J = V \setminus \{x_3\}$  に介入する実験効果の判定に十分であり、 $b_{31}$ 、 $b_{32}$ 、 $b_{34}$  の値を直接指定できることがわかります。当然のことながら、行列  $T_{33}$  は反転可能で、係数  $b_{31}$ 、 $b_{32}$ 、 $b_{34}$  も解くことができます。

上の方程式系から求める。付録Kでは、すべての順序付きペアについてペア条件が満たされるとき、 $T$ は完全な列順位を持つことを正式に示す。

上記の方法で  $B$  を求めると、共分散行列  $\Sigma_c$  を求めることができる。  
は、ヌル実験  $E_0 = (0, V)$  が利用できる場合は式14を、そうでない場合は、共分散条件のみがすべてのペアで満たされるより一般的なケースで式15を簡単に使用することができます。

これまで我々は、ある実験で「観測された」共分散と実験効果という観点からアルゴリズムを説明してきた。もちろん実際には、有限のサンプルデータしかなく、上記の量はデータから推定しなければならず、推定された共分散と実験効果は、その真の基礎値と正確には一致しない。このことは、当然ながら、以下のアルゴリズムの文脈で説明される実用的な影響を持つ。

LLCアルゴリズム (アルゴリズム1) は、線形で、潜在変数を持ち、サイクルを含む可能性のあるモデルのためのもので、このセクションでこれまで説明したアイデアを集

めたものである。潜在変数のある線形循環因果モデルの学習における不可避なサンプリング変動の最も初歩的な処理以外はすべて省略される。このアルゴリズムは、Moore-Penrose擬似逆行を使って方程式系を解くことにより、利用可能な線形制約の二乗誤差の合計を最小化する。したがって、異なる実験から得られた線形制約が部分的に矛盾している場合はいつでも、アルゴリズムは、利用可能なすべての制約を満たすために可能な限り近づく妥協点を見つけます。同様に、 $\Sigma_e$  の統計的推定を改善するために、特定の変数の組が受動的に観測されたすべてのインスタンスを平均化する。特定のペアについて共分散条件が満たされない場合、そのペアの外乱の共分散は未定義のままである。

有限サンプルデータの統計的なばらつきを考慮して、この基本的なアルゴリズムに加えることができるいくつかの標準的な修正があります。サンプルサイズが実験間で大きく異なる場合は、実験室のサンプルサイズに応じて制約方程式を再重量化する。

の実験から得られたものであるため、より正確な制約が有利になります。各実験で観測されたサンプルを別々にブートストラップすることで、*同定*されたパラメーターの誤差の概算を得ることができる。セクション6.2では、これらの誤差推定値からZスコアを計算し、これを構造発見に利用する。最後に、ある種の正則化はオーバーフィッティングを避けるのに役立つ（セクション6.2および6.3参照）。ここでは、LLCアルゴリズムの主な貢献を説明するために、LLCアルゴリズムを削ぎ落とした形で紹介しましたが、コード実装<sup>5</sup>、これらの追加機能を使用するための様々なオプションが用意されています。

ペア条件がすべての順序付きペアで満たされない場合、 $T$ は十分な制約のセットを提供せず、モデルは過小決定である。<sup>6</sup>それでも、モデルに関するいくつかの推論が可能である。詳細は、以下の過少決定に関するセクションで議論する。とりあえず、このアルゴリズムは、ペア条件を満たすペアのリストと、共分散条件を満たすペアのリストも出力することに注意。これらを用いて、過小決定を特徴付けることができることを示す。

こうして、利用可能な実験セットを完全に利用するアルゴリズムが出来上がった：モデル識別可能性条件が満たされた場合、真のモデルの推定値を返し、システムが過剰決定された場合、利用可能な制約に対する妥協点を見つけ、モデルが過小決定された場合、何が回復でき、何が回復できないか、そのような状況でどのように進めるかを次のセクションで示す。

## 4.2 不決断

実験セットが、すべての順序付き変数ペアについてペア条件を満たさない場合でも、LLCアルゴリズムは、すべての係数の推定値を持つモデルを返すことに変わりはない。サンプリングエラーがなければ、 $T$ -matrixのヌルスペースをチェックして、**B**のどのエントリーが実際に過小決定であるかを特定することができる：**B**の要素は、それが**T**のヌルスペースに直交する場合にのみ決定される。場合によっては、満足するペア条件から明らかでなかったにもかかわらず、他の係数の特定の値によって特定の係数が決定されていることに気づくこともある。図6の例の係数 $b_{43}$ （レンマ13以降の議論参照）は、その

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
ようなケースである。

しかし、実際には、ヌルスペースを使用して残りの決定不足を特定することは、誤解を招く可能性があります。 $\mathbf{T}$ の制約は推定値に基づいているため、そのヌルスペースはどの係数が決定されているかを正しく特定できない可能性があります。より保守的なアプローチをとり、順序付きペア $(x_i, x_j)$ に対してペア条件が満たされないような $i$ が存在するときは、すべての $k$ に対して任意の $b_{jk}$ を未決定として扱うことができる。これは、ペア $(x_i, x_j)$ に関して、レンマ13(Perturbation of B)に従ってモデルを摂動させると、以下の係数がすべて変化する可能性があるという事実による。

は、観測された実験効果をそのままに、 $b_{jk}$ 、形式を変更します。同様に、第5ステップの同定可能性に関する保守的な条件を実装している。

trix: 共分散  $\sigma_{ij}$  ペアに対して共分散条件が満たされていれば確定として扱うことができる  $\{x_i, x_j\}$  と直接効果  $B_{\{x_i, x_j\}, V}$  が決定される。どのパラメータを同定するかによって、Lemma 9 (Union/Intersection Experiment)を用いて、以下のパラメータを一貫して予測することができる。

- 
5. 学習アルゴリズムを実装したコードは <http://www.cs.helsinki.fi/u/ajhyttin/exp/> で公開されています。
  6. 統計的なばらつきがあるため、この場合でも $\mathbf{T}$ はフルランクになる可能性があります、それがまたがる次元のいくつかは、係数に関する情報ではなく、推定値の誤差を表すにすぎません。詳しくは4.2節を参照。

---

## アルゴリズム1 LLCアルゴリズム

---

1. 実験セット  $\{E\}_{kk=1,\dots,K}$  の入力データ。行列  $T$  とベクトル  $t$  を空として初期化する。
2.  $E\}_{kk=1,\dots,K}$  を用いて、どの順序の変数の組がペア条件を満たし、どの順序の変数の組が共分散条件を満たすかを判定します。
3. 各実験について  $E_k = (J_k, U_k)$ :

- (a) 共分散行列  $C^k$  を推定する。  $x$
- (b) 推定された共分散行列から、実験効果を抽出する。  
 $t(x_i \sim x_u \mid J_k)$  for all  $(x_i, x_u) \in J_k \times U_k$ .
- (c) 各対  $(x_i, x_u) \in J_k \times U_k$  について、方程式を追加する。

$$T_{ij} + \alpha \sum_{x_j \in U_k \setminus \{x_i\}} t(x_i \sim x_j \mid J_k) b_{uj} = t(x_i \sim x_u \mid J_k)$$

をシステム  $Tb = t$  に変換する。

4.  $b = T^\dagger t$  で方程式を解き、 $T^\dagger$  は  $T$  の Moore-Penrose 擬似逆数で、 $b$  を並べ替えて  $B$  を求める。
5. 任意のペア  $\{x_i, x_j\}$  について。  $\leq V$  は、これらの実験で推定された共分散の平均として、外乱の共分散を計算する  $E_k = (J_k, U_k)$  ここで  $\{x_i, x_j\}$  は  $\subseteq U_k$  である。

$$(\Sigma)_{eij} = \text{mean}(\{((I - U_k B)C^k(I - U_k B)^T)_{ij} \mid \{x_i, x_j\} \subseteq U_k\}),$$

$x_i = x_j$  のときの分散を含む(特定のペアについて共分散条件を満たさない場合、平均は不定となる)。

6. 推定モデル  $(B, \Sigma_e)$ 、ペア条件が成立しない変数の順序付きペアのリスト、共分散条件が成立しない変数のペアのリストを出力せよ。
- 

実験セットが識別可能条件を満たさない場合でも、利用可能な実験のうち、実験効果、またはユニオンまたはインターセクション<sup>7</sup> 実験の共分散行列全体が表示されます。

過小決定を特徴付ける代わりに、モデルの識別可能性条件を満たす方法を検討する

ことができる。潜在変数による線形循環因果モデルが考えられます。一つは基礎となる仮定を強化するアプローチであり、もう一つは追加的な実験を行うアプローチである。最初のアプローチでは、付加的な仮定は、領域固有または領域一般的なものである。計量経済学では、特定のエッジの存在を除外するような領域の背景知識を含めるのが一般的である（つまり、特定のエッジ係数がゼロであることが知られている）。一方、忠実性は、我々は仮定していないが、因果関係発見アルゴリズムで広く使われている(Spirtes et al., 2000)。ここで考える線形モデルでは、忠実性の仮定により、ゼロの

---

7. 交差点実験において共分散行列 $C^k_{\Pi}$ を完全に決定するためには、追加の受動的な観測データである。Lemma 9に続く議論を参照されたい。

2つの変数の間の共分散は、その変数間の因果関係がないことを意味する。多くの状況において合理的ではあるが、忠実性が満たされない有名な事例がある。例えば、2つの変数間の2つ以上のパスが正確に相殺される場合、変数が（多面的に！）因果的につながっているにもかかわらず、変数間の共分散がゼロであることが判明する。また、データにノイズが多い場合、大量のデータや特定の実験がない限り、忠実でない因果関係に近いものと忠実でないものが区別できないこともある。それでも、忠実性が合理的な仮定であると判断されれば、さらなる制約を与えることができる。Hytinenら(2010)では、忠実性と背景知識を現在のフレームワークに統合することについて議論している。しかし、潜在変数を持つ線形循環モデルにおいて、忠実性に基づいて引き出せる追加の推論に関して完全な手順を開発することは、まだ未解決の課題である。

もし追加で実験ができるのであれば、追加で満たすペア条件の数を最大化するような次の実験を選択するのが明らかな戦略である。複数の変数に同時に介入する実験を考慮した場合、そのような最良の実験を総当たりで探すと、変数の数が指数関数的に増えてしまう。この場合、より効率的な選択戦略やヒューリスティックを検討することができる。ほとんどの場合、追加の実験は、ペア条件がすでに満たされているペアのテストも繰り返すことになる。式18に含まれる場合、このようなテストから得られる制約は推論をより信頼性の高いものにすることができるので、特定の繰り返しを含むように意図的に実験を選択することができる。

追加的なペア条件の満足度に関して貪欲な実験選択は、必ずしも全体の実験数を最小にすることはできない。❖❖❖❖❖❖ば、6つの変数 $x_1, \dots, x_6$ がある場合。 $x_6$ の6つの変数があり、これまでペア条件が満たされていない、つまり実験が行われていない場合、貪欲な戦略では、すべてのペアでペア条件を満たすために5つの介入セットのシーケンスを推奨することがある：

$$J_1 = \{x_1, x_2, x_3\}, J_2 = \{x_4, x_5, x_6\}, J_3 = \{x_1, x_4\}, J_4 = \{x_2, x_5\}, J_5 = \{x_3, x_6\}.$$

しかし、次の4つの介入セットは、すべてのペアでペア条件を満たすのに十分であるが、この点で貪欲な手順では選択されないだろう：

$$J_1 = \{x_1, x_2, x_3\}, J_2 = \{x_3, x_4, x_5\}, J_3 = \{x_5, x_6, x_1\}, J_4 = \{x_2, x_4, x_6\}.$$

可能な背景知識があれば）実験の最適な選択は、有向グラフのいわゆる「最小完全分離



潜在変数による線形循環因果モデルの学習系」を見つけるといふ組合せ論における理論と密接な関係がある（いくつかの関連する結果についてはHyttinen et al., 2012およびSpencer, 1970を参照）。ここでの完全な議論は本論文の範囲を超えている。

統計的な観点から、すべての実験にわたる総サンプルサイズが一定に保たれていても、より多くの変数に同時に介入することが、より高い推定精度につながることを発見した（Eberhardt et al., 2010）。つまり、それぞれが変数のすべてのペアについてペア条件を満たす2つの実験セット（例えば、上記の6つの変数に関する4つの実験セットと、それぞれが1つの変数に介入する6つの実験セット）については、合計サンプルサイズが同じであっても、複数の変数に同時に介入する実験シーケンスの方が、基礎となるモデルのより良い推定を提供します。

## 5. シミュレーション

LLC-アルゴリズムの性能を、実験データを利用できるよく知られた学習アルゴリズムと比較しました。LLC-algorithmを直接適用する競合する手順は存在しないため、LLC-algorithmの性能を比較した。

周期的モデルや潜在変数モデルを含む探索空間において、我々は、実験設定に容易に適応でき、異なるモデル空間の仮定におけるLLCの性能を説明するための良いコントラストを提供する2つの手順を比較のために選択しました。ベースラインとして、Geiger and Heckerman (1994)による、線形ガウス条件付き確率分布を持つ非環状ベイジアンネットワークの学習手順（GHと呼ばれる）を使用しました。実験データはCooper and Yoo (1999)の手法により、GHのローカルスコアの計算に組み込まれる。GHは非周期性と因果的充足性（潜在的な交絡がないこと）を仮定しているため、これらの仮定を外した場合の課題の難易度上昇を評価するのに有用な基礎となる。また、潜在的交絡のない離散循環因果モデル用に設計されたDirected Cyclic Graphicalモデル（DCG, Schmidt and Murphy, 2009）を学習するアルゴリズムと比較する。このモデルでは、受動的に観測される分布は、ポテンシャルのグローバル正規化積として表現される。

$$P(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z} \prod_{i=1}^n \phi(x_i; x_{\text{pa}(i)}) \text{ となります,}$$

ここで、Zはグローバルな正規化定数である。正規化された条件付き確率分布の代わりに正規化されていないポテンシャルを使用することで、グラフ構造にサイクルを許容することができます。実験データは、操作された変数に対応するポテンシャルを式から落とすだけでモデル化され、例えば、次のような操作された分布になる、

$$P(x_2, \dots, x_n | x_1) = \frac{1}{Z} \prod_{i=2}^n \phi(x_i; x_{\text{pa}(i)}) \text{ となります,}$$

Schmidt and Murphy (2009) は、離散データのモデル化に  $\phi(x_i; x_{\text{pa}(i)}) = \exp(b_i(x_i) + \sum_{j \in \text{pa}(i)} w_{ij}(x_i, x_j))$  という形のポテンシャルを用い、数値最適化技術でペナルティ付き尤度関数を最大化してモデルを学習します。このap-apに適合させるために閾値として、連続データ（データ生成過程の最後の方）を2値データに離散化するアプローチをとった。DCGモデルは、介入下の循環系を分析するのに有効かもしれないが、その根底にある因果関係の生成過程はあまり明確ではないことに注意する必要がある。確かに、我々のデータ生成過程では、一般にDCGのモデルファミリーに適合するような分布は得られない。

一見すると、比較のためにさらに2つの手順を考慮するのが自然であるように見える

潜在変数による線形循環因果モデルの学習

： サイクルを許容するが潜在変数を許容しないCyclic Causal Discovery アルゴリズム（CCD、Richardson、1996）と、潜在を許容するがサイクルを許容しないFast Causal Inference アルゴリズム（FCI、Spirtes et al、2000）である。どちらも条件付き独立性検定に基づくもので、因果モデルの等価クラスを返す。しかし、背景知識を両手順に統合して単一の実験データセットから学習することはできるが、異なる実験からの（おそらく相反する）結果をどのように結合すべきかは明確ではない。このため、これらのアルゴリズムの適切な結合手順を特定するためには、別の分析が必要となる。Claassen and Heskes (2010)のアプローチは、FCIに関してこの方向へのいくつかのステップを提供しているが、彼らのフレームワークでは、介入は特定の変数を対象としていないため、我々のコンテキストには全く適合しない。我々は、Itani et al. (2008)による最近の提案との比較を検討したが、この執筆の時点では、完全に自動化された手順は、現在の著者には利用できないものであった。

LLC-とGH-、DCG-アルゴリズムとの比較のために、5つの異なる条件下でのモデルを検討しました：

1. 潜在変数を含まない線形非循環モデル、
2. 潜在変数を持たない線形循環モデル、
3. 潜在変数を持つ線形非循環モデル、
4. 潜在変数を持つ線形循環モデル、および
5. 潜在変数を含まない非線形非周期モデル。

各条件について、10個の観測変数を持つ因果モデルを20個ずつランダムに生成した。グラフでは、各ノードが0-3個の親を持つ。潜在変数を持つモデルでは、10個の観測変数に外生する5個の潜在変数が存在した。構造方程式は次のような形式である。

$$x_j := \sum_{i \in \text{pa}(j)} (b_{ji} x_i + a_{ji} x_i^2) + e_j,$$

ここで、 $e_j \sim N(0, \sigma^2)$ ,  $b_{ji} \sim \pm \text{Unif}(0.2, 0.8)$ ,  $a_{ji} = 0$  ただし、非線形のモデルで  $a_{ji} \sim \text{Unif}(-0.2, 0.2)$  となる第5条件は除く。2番目と4番目の条件では、少なくとも1つのサイクルを含むモデルが得られるまでサンプリングした。各モデルから、以下の条件でサンプルを収集した。

受動的な観察設定（無効実験）と10回の追加実験において、それぞれ単一の（しかし異なる）変数に介入した。介入された変数は、常に平均値ゼロ、単位分散を持つ正規分布にランダム化されていた。総サンプル数（1,000～100,000）は11の異なる実験に均等に配分され、ある実験が他の実験より正確な推定値を提供する可能性があるという事実を考慮した調整は不要であった。なお、この実験セットは、定理12（識別可能性-充足性）のLLC法の識別可能条件を満たしている。

アルゴリズムの出力を評価する方法は様々である。すべてのテスト条件が、テストされるアルゴリズムの少なくとも一つの仮定に違反することを考えると、我々は各手順の定量的な出力の直接比較は行わないことにした。その代わりに、セクション6でケーススタディとして検討するセルラーネットワーク推論課題において適用されるものと同じ定性的な尺度を使用しました。Stolovitzky et al. (2009)に従い、シミュレーションは、各手法が、観測された変数間のすべての可能なエッジのリストを、エッジが真のグラフにあることの信頼度の低い順にソートして出力することを要求されるように設計されている。この目的のために、我々は3つのアルゴリズムを以下のように適合させた。LLCで

は、エッジを**B**の学習係数の絶対値に従って高いものから低いものへと単純にランク付けした。係数の大きさはエッジの存在に対する信頼度を直接表すものではないが、経験的にシミュレーションで非常にうまくいくことがわかった。(GHについては、Koivisto and Sood (2004)のダイナミックプログラミングアルゴリズムを用いて、全てのDAG構造（内次数境界は3）に対する限界エッジ確率を計算し、各エッジの信頼度をスコア化した。DCGは2値変数を用いるため、各エッジは  $w_{ij}(0, 0)$ 、 $w_{ij}(0, 1)$ 、 $w_{ij}(1, 0)$ 、 $w_{ij}(1, 1)$  の4つの重みと関連している。重みは（正則化パラメータ $\lambda$ で）ペナルティ化されているので、エッジ $x_j \rightarrow x_i$ は、関連する4つの重みが0であるときは常に存在しないことになる。Schmidt and Murphy (2009)に従い、重みの $L^2$ -normを使って各エッジの強さ、つまり順位を決定するためです。LLCと同様に、これは順序を生成するためにうまく機能したようです。

---

8. データ生成モデルでは外乱 $e_j$ は無相関であるが、元の変数の一部が観察されないと考えた場合、学習したモデルの外乱は実際には相関がある。

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

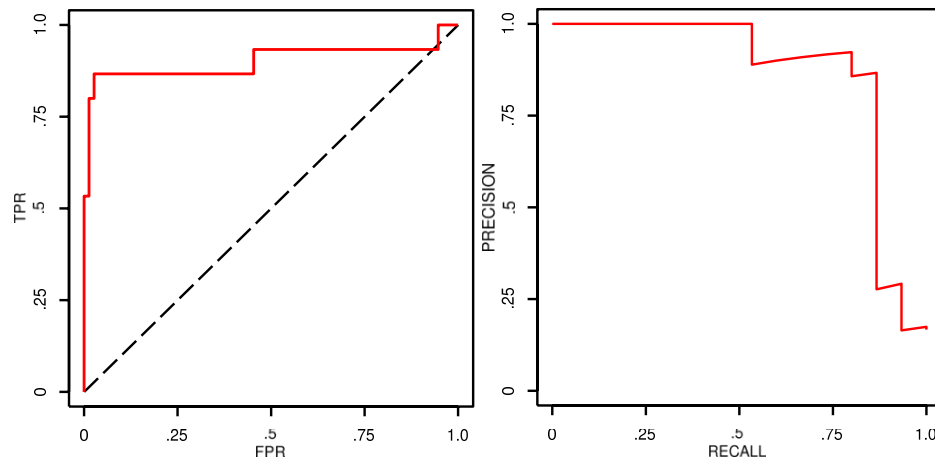


図7： 潜伏のない線形非循環モデル（条件1）において、11回の実験で均等に分割した1,000サンプルでLLCを実行した場合の出力のROC曲線（左）、PR曲線（右）の例。

すべての可能なエッジの順序付きリストがあれば、エッジが存在すると予測される閾値を定義するだけで、個々のエッジの存在または不在のバイナリ予測を得ることができます。これらのバイナリ予測は、基礎となるモデルのグラントゥールースと比較することができます。しかし、閾値の選択はある程度任意であるため（そして、生成モデルの一般的な疎密に関するドメイン固有の知識が必要）、以下に説明するように、ROC（Receiver Operating Characteristic）曲線とPR（Precision Recall）曲線、およびこれらの曲線下の面積を報告する一般的なアプローチに従っています。このシミュレーションの評価は、セクション6のケーススタディの評価とも一致する。

ROC曲線（図7左）は、閾値の異なる値に対して、真陽性率（TPR）と偽陽性率（FPR）をプロットすることで描かれる。

$$\begin{aligned} \text{TPR} &= \frac{\text{存在すると正しく予測された \# 辺}}{\text{\# モデル生成時のエッジ}} \\ \text{FPR} &= \frac{\text{存在すると誤って予測された \# 辺}}{\text{\# 生成モデルにはないエッジ}} \end{aligned}$$

強力な分類法のROC曲線は、スコアのある閾値に対して左上隅の近く（完全な分類）に達するはずであり、一方、ランダムに分類すると図7の破線の曲線になる。ROC曲線下面積（AUROC）は、分類アルゴリズムの威力を評価するための簡単な1桁のスコアとしてよく使われる。我々の設定で因果エッジを発見する場合、AUROC値は、真のモデルに存在するランダムなエッジが、ランダムに存在しないエッジよりも高いスコアを獲得する確率を指定する。AUROC値は通常、0.5（ランダムな分類）から1.0（完全な分類）までの範囲である。

検索アルゴリズムの品質を測るもう一つの指標は、PRカーブにおけるPrecisionとRecallのトレードオフを調べることである（図7、右）。

$$\begin{array}{lcl} \text{精度} & & \frac{\# \text{ 存在すると正しく予測されたエッジ}}{\# \text{ 存在すると予測されるエッジ}} \\ \text{リコール} & & \frac{\# \text{ 正しく存在すると予測されたエッジ}}{\# \text{ モデル生成時のエッジ}} \end{array}$$

完全な分類アルゴリズムは、すべての想起値に対して1の精度を持つはずである。PR曲線下面積（AUPR）は、スコアの異なる閾値における平均精度を指定し、0.0から1.0（完全な分類）の範囲とすることができます。

図8は、シミュレーションの結果を示している。DCGについては、いくつかの正則化パラメータ値（ $\lambda = 2^8, 2^7, \dots, 2^{-7}, 2^{-8}$ ）でアルゴリズムを実行し、常に最高のAUROCとAUPR-スコアを報告しています。LLCとGHは、それ以上のチューニングを行わずに実行されます。最初の条件（線形非周期的潜伏のないモデル）、どの手法もサンプルサイズが大きくなるにつれて正しい因果構造を学習するようである。サンプルサイズが小さい場合、GHアプローチはベイズプレイヤーを使用することで利益を得ることができる。また、サンプルサイズが非常に小さい場合に、より良いパフォーマンスが必要であれば、LLCアルゴリズムにそのようなプリアールを追加することも可能である。他の条件では、GHはサンプルサイズが大きくても良い結果を得ることができません。これは、GHが使用する制限モデルクラスに生成モデルが含まれていないため、他の方法で適合できない測定された相関を考慮するために、誤ったエッジを追加し始めるからです。一方、LLCは、モデルクラスが大きいため、少なくとも部分的には低いサンプルサイズでも問題がない。第2条件（潜在を含まない環状モデル）、第3条件（潜在を含む非環状モデル）、第4条件（潜在変数を含む環状モデル）では、十分なサンプルがあれば、LLCもDCGも因果構造のかなり良い推定値を見つけることができます。DCG法の不正確さは、データの離散化に起因している。潜在的交絡がある場合のDCGの性能は、DCGモデルが潜在変数を明示的に表現していないことを考えると、驚くほど良好である。この結果は、潜在交絡に起因する観測変数間の依存性が、観測変数間の因果関係に起因する依存性に比べて弱かった可能性を示唆して



潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
いるのかもしれない。非線形データ条件では、唯一の離散（したがって非線形）手法であるDCGが最良の結果を得ることができた。

GHとDCGは、さらに調整しなければ、より大きなサンプルサイズや多数の変数（ $n$ ）に拡張することができません。DAGの数が超指数関数的に増加するため、現在、GHのアプローチは30～50変数以下に制限されています。さらに、ローカルスコアの計算では時間がかかる。一方、DCGは $n + 4n(n - 1)$ 個のパラメータに対する数値最適化が必要であり、これも $n$ が大きい場合には実行不可能である。

最も基本的なアルゴリズム（アルゴリズム1）では、共分散行列の推定と、次元が $(n - 1) \times (n - 1)$ の $n$ 個の行列に対する擬似逆行列の計算が必要なだけで、LLCアルゴリズムは成立します。このような手順は、シミュレーションで使ったように、次のことが可能です。

は、比較的高い（例えば、 $n = 100$ ）数の変数にスケールすることができます。しかし、次で見るように

のセクションでは、基本的な手順に正則化を加えることが有用であり、どのエッジが存在し、どのエッジが存在しないかを推測するために必要な係数の誤差の推定値を得るために、リサンプリングアプローチに頼らなければならないかもしれない。このような基本的な手法の適応や拡張は、もちろん手法の複雑さを著しく増大させるが、小さなサンプルサイズでの精度を高めるという点では、十分な効果が得られる可能性がある。

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

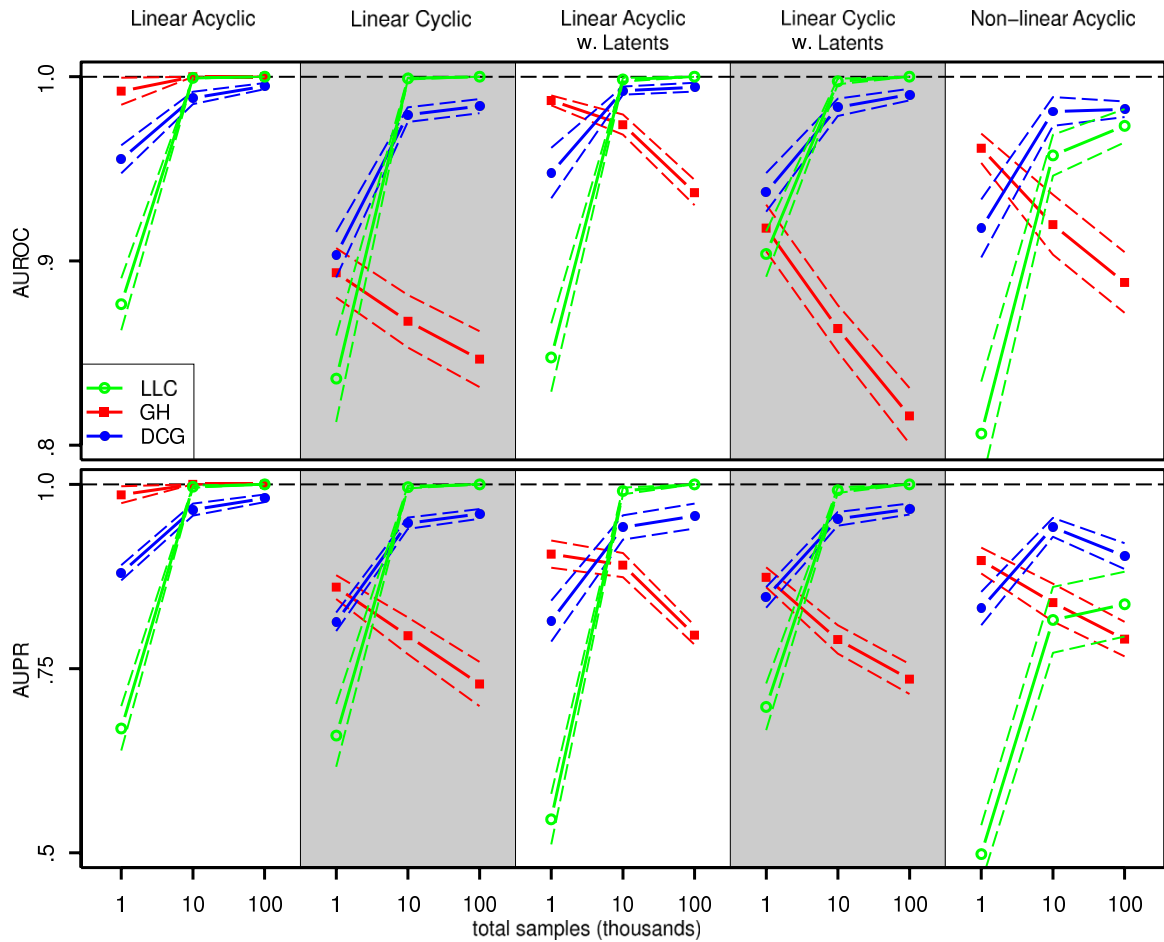


図8: シミュレーション結果: 受動的観察実験と10回の単一介入実験に均等に分けられた合計サンプルサイズ1,000-100,000 (x軸) に対して、5つのモデル条件 (列、詳細は本文参照) におけるLLC-、GH-、DCG-アルゴリズムのAUROC (上) およびAUPR (下) 値。実線の各点は、それぞれ10個の観測変数を持つ20個のモデルの平均値で、破線はこの平均値の標準偏差を示す。本図以降の薄いグレーの濃淡は、視覚的に区別するためにのみ使用されている。

## 6. ケーススタディDREAMチャレンジデータ

DREAM (Dialogue for Reverse Engineering Assessments and Methods) は、携帯電話ネットワーク推論手法の長所と短所を公平に評価するために毎年開催されている課題である。本節では、2008年に実施されたDREAM 3と2009年に実施されたDREAM 4のインシリコ

#### 潜在変数による線形循環因果モデルの学習

ネットワークチャレンジに、LLC-methodを適用した方法について説明します。5つのサブチャレンジに分けられた25のモデルのネットワークサイズは、10～100ノードであった。

参加者は、さまざまな種類の細胞における遺伝子制御ネットワークの有向グラフ構造を、実験データから学習することになった。データはインシリコ、つまりシミュレーションされたもので、その目的は

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

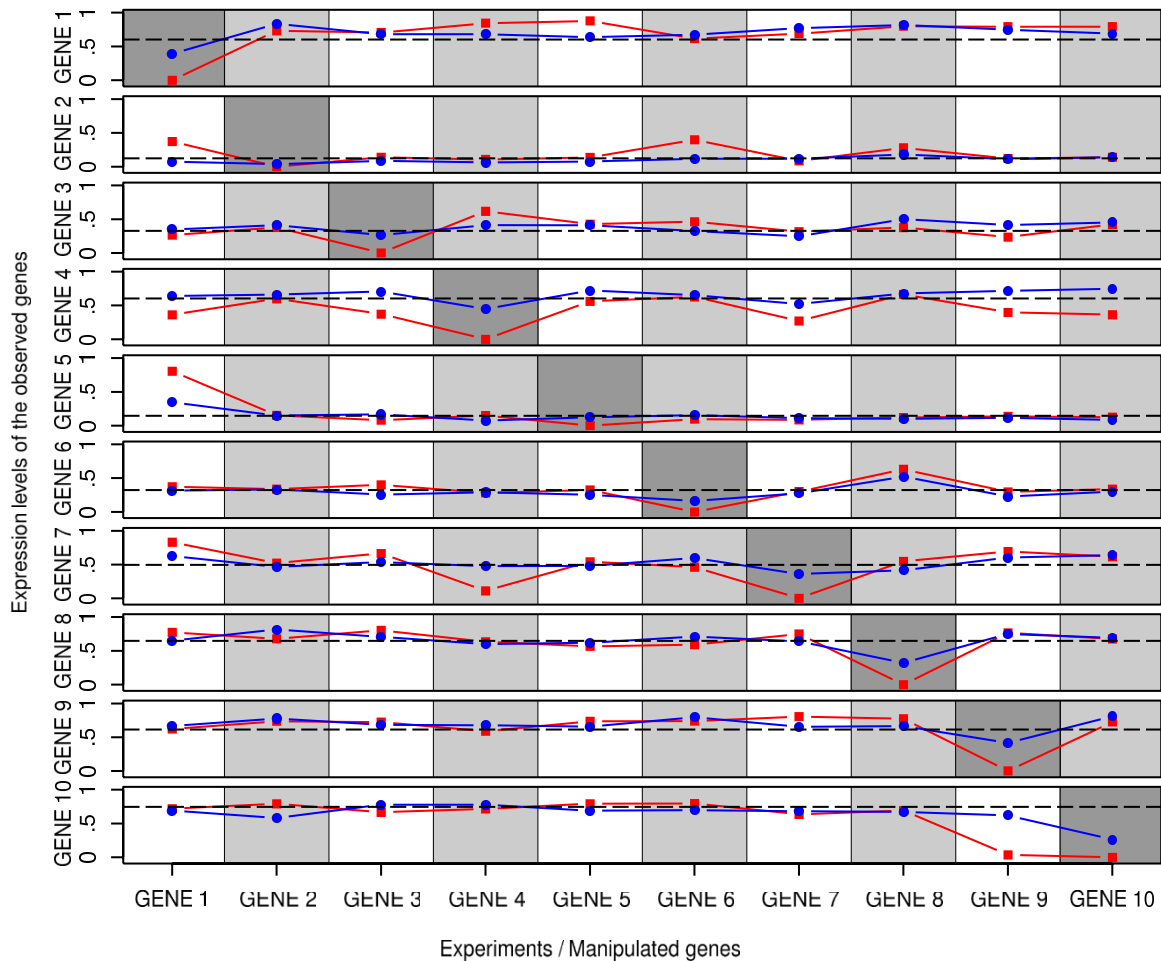


図9】10変数DREAMネットワーク推論チャレンジの1つに提供されたデータの一例。各行は、列で示された遺伝子がノックダウン (-) またはノックアウト (□) された場合の、10個の遺伝子のそれぞれの定常状態の発現レベルを示す。については各遺伝子について、破線は受動的に観測された値を示す。濃いグレーの網掛けは対角線上の要素で、それぞれの遺伝子に介入したときに測定されたレベルを示している。10行目から、10番目の遺伝子の発現レベルは、9番目の遺伝子または10番目の遺伝子そのものを操作した場合にのみ強く反応することがわかる。

は、グランドトゥルースのネットワーク構造にアクセスすることができる。データ生成

モデルは、ネットワーク学習アルゴリズムの現実的な性能評価を実現するために、生物学的に妥当なものとして設計された (Marbach et al., 2009)。ネットワークは、既知の生物学的相互作用ネットワークから抽出されたモジュールに基づき、元のネットワークの機能的・構造的特性を維持したまま作成した。そして、生物学的に妥当な力学的プロセスをシミュレートし、ノイズを加えたデータを作成した (Prill et al., 2010)。

参加者に提供されたデータには、遺伝子発現レベルの定常状態（時間の経過とともにレベルがこの値に収束する）をmRNA濃度として測定する2つの指標があり、数種類ある。

を異なる条件で表示した。1つのデータセットを図9に可視化した。各条件で2つのデータベクトルしか提供されなかったことを考えると、セクション5でテストしたGHとDCGは直接適用できない。また、課題では、モデル化した細胞が摂動から平衡状態に戻って回復するまでの時系列データもいくつか提供された。LLC（あるいは我々が検討した他の手順）はこのデータを素直に利用することができないため、時系列データを分析に含めない。各チームは、モデル内の可能性のあるエッジの存在に対する確信度やスコアを出力することになっていた。学習アルゴリズムの性能は、セクション5で説明したのと同じ方法で、単一のデータセット（Stolovitzky et al., 2009）のAUROCとAUPRスコアを用いて比較された。最後に、5つのモデルからなる各サブチャレンジにおいて、5つのネットワークすべてについて個々のネットワークのスコアを平均化した総スコアを用いて、競合チームを比較した。

以下、LLCをどのようにアレンジしてこの課題に適用したかを説明し、オリジナル課題に参加したチームが獲得したスコアと比較します。

## 6.1 総効果の推計

遺伝子 $i$ がノックダウンされたり、ノックアウトされたりすると、我々の枠組みでは、変数 $x_i$ が介在する実験のアウトカムとして結果を扱うことができます。しかし、DREAMのデータでは、発現量の定常値しか得られず、完全な共分散行列は得られません。それでも次のようなアプローチで、実験における総効果を求めることができる。まず、定常値を個々のサンプルとしてではなく、異なる介入（または受動的オブザーベーション）のもとでの変数の期待値として扱います。第2に、 $E(\mathbf{x})=\mathbf{0}$ 、したがって $E(\mathbf{e})=\mathbf{0}$ と仮定できるように、受動的観察定常値をすべての介入定常値から差し引く。総効果 $t(x_i \sim x_j)$ は、 $x_j$ を唯一の操作変数 $x_i$ に回帰したときの $x_i$ の回帰係数だけだと思い起こす。したがって、 $x$ の期待値または定常値は、 $E(\mathbf{x})=\mathbf{0}$ 、 $E(\mathbf{e})=\mathbf{0}$ である。 $x_i$ が $x_i^{i,ko}$ の値に操作されたとき（ノックアウトされたとき）は、単純に $t(x_i \sim x_j) - x_i^{i,ko}$ となります。同様の推論です。

は、 $x_i$ が値 $x_i^{i,kd}$ に操作されたときに適用されるので、最小二乗法で $t(x_i \sim x_j)$ を推定することができます。

方程式系の解を求める：

$$t(x_i \sim x_j) - x_i^{i,ko} \quad t(x_i \sim x_j) - x_i^{i,kd}$$

データセットがすべての順序ペアについてペア条件を満たすと、DREAM実験はモデルの識別可能性についてセクション3で与えられた要件を満たし、すべてのペア  $(x_i, x_j)$  についてすべての総効果  $t(x_i \sim x_j)$  が推定できる。

## 6.2 ネットワーク推論

推定された総効果があれば、LLCアルゴリズムを直接適用して直接効果行列 **B** を推定することができた。しかし、強力な結果を得るためには、次のようにアルゴリズムを適応させる必要があることがわかりました。

まず、セクション5のシミュレーションとは異なり、係数  $b_{ji}$  の絶対値は、 $b_{ji}$  の推定値の大きな分散の可能性を全く考慮していないため、エッジ  $x_i \rightarrow x_j$  の存在に対する良い信頼尺度を提供しないことがわかった。直接再サンプリングとしてを追加することで、 $K$  ノイズデータセットを作成しました。

を分散 $\sigma^2 = 0.1$ の正規分布から各生データポイントに適用した。そして、上記で説明したように、総効果を推定した。

次に、直接効果**B**を推定するために、重み $\lambda=0.1$ の $L^1$ -norm penalizationを用いて式17のLLC方程式系を解いた。ノイズの多いデータセットからの直接効果**B**の推定値 (**b**としてベクトル化) は、次のように計算される。

$$\min_{\mathbf{b}} \|\mathbf{T}\mathbf{b} - \mathbf{t}\|_2 + \lambda \|\mathbf{b}\|_1.$$

セクション4で説明するように、推定は $n$ 個の別々の最小化問題で行うことができる。 $L^1$ -norm penalizationは、忠実度の仮定に似た方法で、スパース構造に対する事前準備と考えることができることに注意。

最後に、各リンク $b$ のZスコア $_{ji}$ を次のように計算する。

$$Z_{ji} = \text{mean}(\{b^k\}_{k=1}^K) / \text{std}(\{b^k\}_{k=1}^K).$$

Zスコアが高いほど、エッジの存在に確信が持てる。Zスコアを使用すると、推定分散も小さい限り、小さな係数でも高いスコアを得ることができます。

図10は、その結果をまとめたものです。まず、DREAM 4のチャレンジは、ベスト10チームの結果のばらつきが少なく、DREAM 3のチャレンジよりも競争力があったということがわかります。5つのチャレンジでの総合順位は、実際のチャレンジに参加した約30チームの中で、3位、9位、3位、2位、10位となっています。どちらのスコア指標でも、評価に明確な差はありません。特に、他の多くの候補者と異なり、時系列データを利用していないため、この結果は励みになります。時系列データをどのように活用するかは、まだ未解決の問題です。データのノイズ、十分な数のサンプルへのアクセス、因果関係の非直線性の可能性などが、さらなる誤差の原因となる。

### 6.3 予測精度

構造発見だけでなく、因果関係モデリングのもう一つの重要な側面は、これまで見たことのない実験条件下での予測です。そこでDREAM4では、新しい実験環境下での遺伝子発現量の定常値を予測するボーナスラウンドを設けた。データは、構造発見チャレンジと同じものを使用しました。5つの10変数モデルについては、常に1組の遺伝子がノック



アウトされた5つの状況において、すべての定常的な発現量を予測することが求められました。5つの100変数モデルについては、それぞれ20のダブルノックアウトの設定について予測が求められた。

変数  $x_i$  と  $x_j$  のノックアウト値は、データによって  $x_i^{i,ko}$  と  $x_j^{j,ko}$  と定義されます。

$u \neq i, j$  となるような変数  $x_u$  の値を、実験結果の解釈を用いて推定する。の効果を回帰係数で表す：

$$x_{u,i,j,ko} = t(x_i \sim x_u \parallel \{x_i, x_j\}) - x_i^{i,ko} + t(x_j \sim x_u \parallel \{x_i, x_j\}) - x_j^{j,ko}.$$

前節で述べたように  $t(x_i \sim x_k \parallel \{x_i\})$  と  $t(x_j \sim x_k \parallel \{x_j\})$  を推定できるので、レンマ9（Union/Intersection）を用いて量  $t(x_i \sim x_k \parallel \{x_i, x_j\})$  と  $t(x_j \sim x_k \parallel \{x_i, x_j\})$  も推定できる。について線形方程式群（付録Gの式35）を解く。

正則化パラメータ  $\lambda$  を持つ  $L_2$  事前分布を用いた実験効果。つまり、データ生成モデルは潜在変数を持つ線形周期モデルであると仮定し、定常的な

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

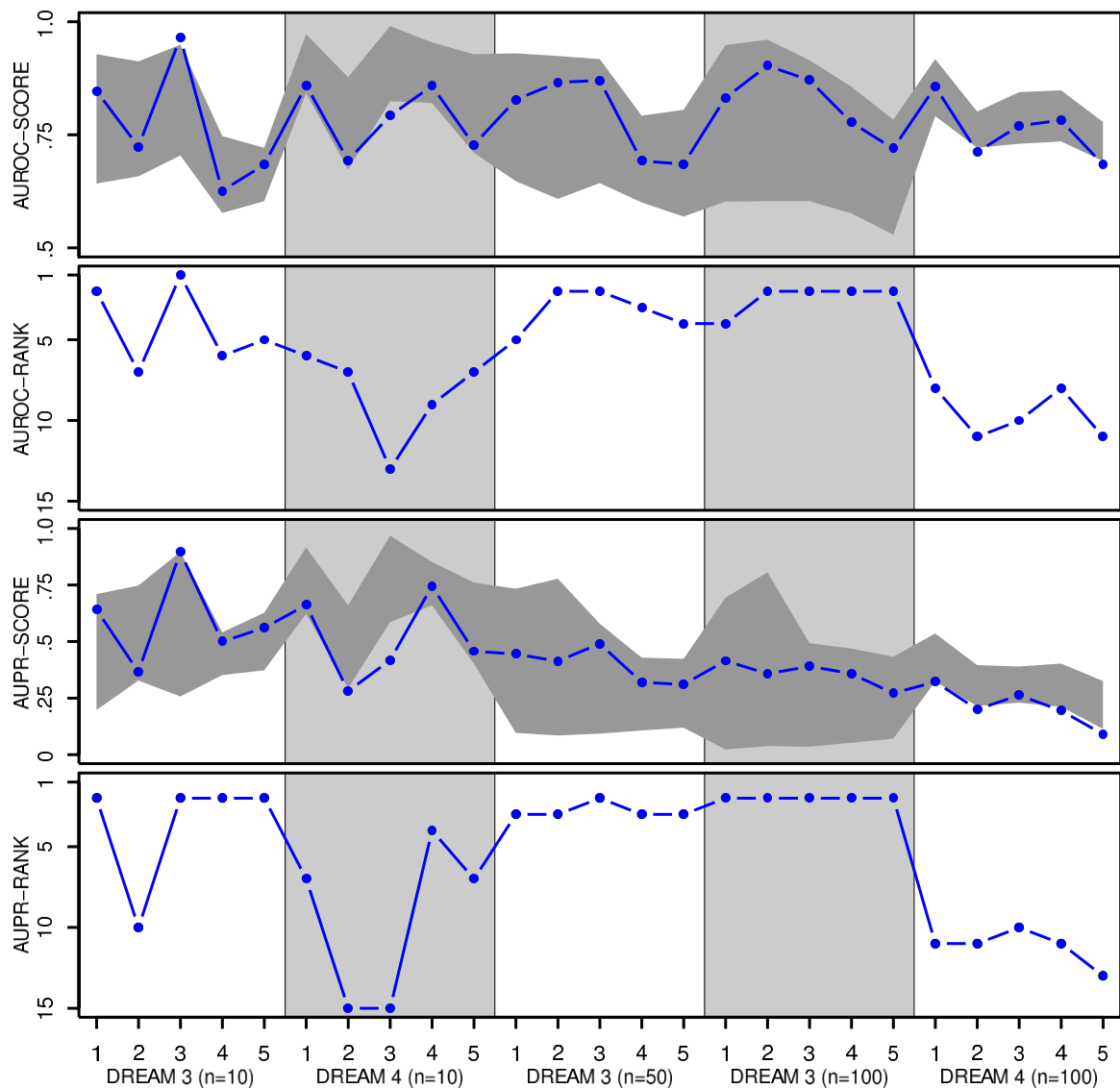


図10: DREAM *in silico*ネットワーク推論課題の結果概要: DREAM 3とDREAM 4の各チャレンジにおけるAUROCスコアとAUPRスコア(1行目と3行目)、および競合チーム間の対応するランク。濃いグレーの領域の上部は、各個別データセットについて競合チームの中で最も優れた結果を示し、下部は常に第10位の結果を示しています。各チャレンジには、全体で約30の競技者が参加しました。

潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
は、提供された関連する単一のロックアウト実験データに基づいて、特定の複合（二重）ロックアウト実験の状態値を示す。(ダブルロックアウトの効果は、シングルロックアウトの実験データに基づいて、レンマ9によって特定される)。このように、個々の予測作業において、この特定の予測に無関係なデータは無視され、実際に使用されるデータのみが使用される。

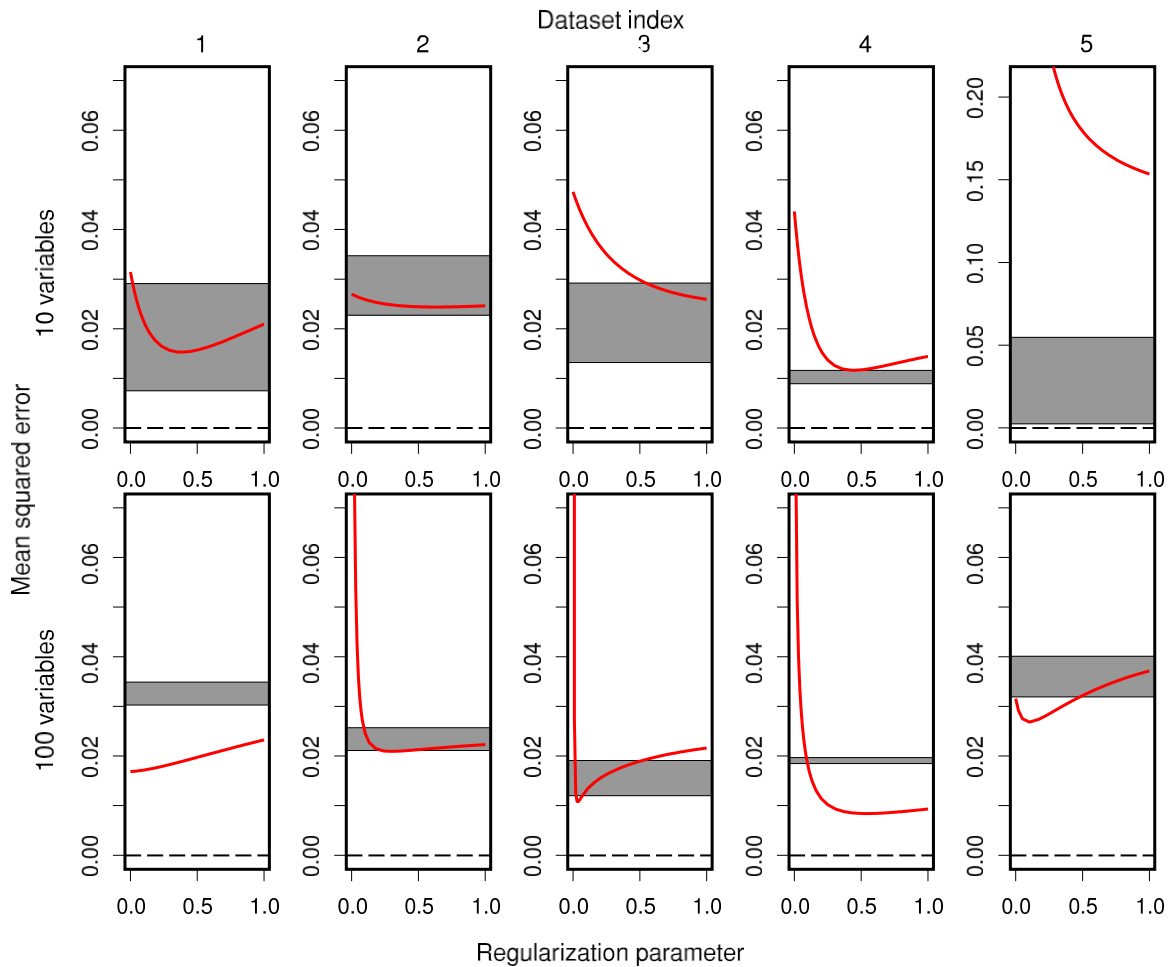


図11: 予測性能: 図11: 予測性能: 5つの10変数モデル（上）と100変数モデル（下）の二重介入実験における予測値の平均二乗誤差を、正則化パラメータの関数としてプロットした。赤線は、我々の手順での予測誤差を示す。濃い灰色の部分の下は、個々のデータセットについて、競合するチームの中で最も良い結果を示し、上は常に3番目に良い結果を示している。

関連性がある。実際には、このことは、目下の予測課題にとって重要でないモデル化の仮定にわずかに違反があっても、予測はより頑健であることを意味します。

図11は、予測の品質を評価したものです。予測値は、グランドトゥールースからの平均二乗誤差、つまり変数と要求された異なる予測値の平均二乗誤差の合計を使用して比

潜在変数による線形循環因果モデルの学習

較されます。10変数モデルの場合、私たちの手順の結果は、参加した7つのチームの結果と競合しています。100変数モデルでは、正則化パラメータ値の範囲において、5つの参加チームの中で最も良い予測値を達成しました。

## 7. エクステンション

我々は、線形非再帰構造方程式モデルの標準的な解釈の観点から、この論文で理論を提示し、発展させてきた。この解釈では、擾乱 $\mathbf{e}$ のベクトルは、平衡化プロセスを通して一定に保たれる。Lauritzen and Richardson (2002)に従い、我々はこの循環モデルの最も一般的な解釈を *決定論的平衡解釈* と呼ぶ。平衡状態における観測変数 $\mathbf{x}$ の値は、外乱 $\mathbf{e}$ の決定論的関数であるからだ。このモデルでは、セクション2.1<sup>x</sup>で定義したように、異なる観測ベクトル $\mathbf{x}$ は異なる外部影響 $\mathbf{e}$ からのみ生じ、それぞれの実験 $E_k$  に対して共分散行列 $\mathbf{C}^k$  をもたらす。このセクションでは、理論を他の関連線形循環モデルへ拡張するためのいくつかの事前アイデアについて述べる。

のみが存在するデータに対する本手法の適用を、第6節で既に見てきた。単一の受動観測データベクトル  $\mathbf{x}_0$  と、2つの実験データベクトル  $\mathbf{x}_k^{kd}, \mathbf{x}_k^{ko}$  (対応する場合、LLC法を適用するためには、各実験が一度に一つの変数に介入する場合、それぞれ遺伝子ノックダウン実験とノックアウト実験に対するものである。この場合、LLC法を適用するためには、基本的に、異なる実験条件間で変化しない単一の(一定の)外乱ベクトル $\mathbf{e}$ が存在すると仮定しなければならず、実験効果は、非介入変数の値の変化(受動的観察データから実験データへ)を、対応する介入変数の値の変化で除したものである。この仮定のもとでは、本論文で示した理論は、実験効果から変数間の直接効果を推定するために直接適用できる。

しかし、上記のような、各実験が複数の変数に同時に介入するようなデータに対して、本論文で提供する仕組みを完全に適用したい場合、1つか2つの実験データベクトル  $\mathbf{x}_k$  を得るだけでは十分ではない。むしろ、介入された各変数が介入されていない変数に及ぼす影響を分離するためには、一般的に複数のデータベクトルが必要となる場合がある。しかし、必要な実験プロトコルの詳細や、十分かつ必要な同定可能条件については、今後の研究に委ねられる。

別の拡張として、観測されたデータベクトルが、確率的なダイナミクスを持つプロセスによって到達した平衡状態から生じるモデルを考える。具体的には、時系列過程

$$\mathbf{x}(t) := \mathbf{B}\mathbf{x}(t-1) + \mathbf{e}(t) \text{ とする、}$$

ここで、 $\mathbf{e}(t)$ は各時間ステップ $t$ で新たにサンプリングされ、常に平均 $\mu_e = \mathbf{0}$ 、分散共分

散行列 $\Sigma_e$ を持つ同じ分布から得られる。 $\mathbf{x}$ のすべての変数は、前の時間ステップの値と新しい外乱項 $e(t)$ を与えられて同時に更新される $\diamond\diamond$ 。明らかに、このシステムはもはや決定論的な均衡を持たないが、漸近的に安定なモデル $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$ では、プロセスは、サンプルベクトル $\mathbf{x} (t = \infty)$ が以下のものから描かれている均衡に収束する。

$$\mu_{\mathbf{x}} = \mathbf{0},$$

$$\mathbf{C} =_{\mathbf{x}} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^t \mathbf{B}^{t-i} \Sigma_e (\mathbf{B}^T)^{t-i}.$$

決定論的モデルと同様に、平衡時に描かれる観測ベクトル $\mathbf{x}$ は、プロセス開始時の初期値とは無関係である。異なる観測データベクトル $\mathbf{x}$ は、複数の並列チェーンを実行することによって得られる。介入は、与えられた変数がある値に設定することとしてモデル化することができる。

- 
9. このモデルは、Lauritzen and Richardson (2002)の論文の第6節と第7節で議論されている確率的均衡モデルとは異なることに注意する必要がある。彼らは、特定の順序で変数を逐次更新することを考える。

をある分布から引き、その変数を平衡化プロセスの間、一定に保つ。

このようなモデルでは、介入された変数と介入されていない変数の間の共分散は、実験効果に相関し、決定論的なケースを反映する。したがって、本稿で紹介した理論は、直接効果行列**B**を推定するために使用することができる。直接効果が与えられ、受動-観察共分散行列**C<sub>x</sub>**が与えられれば、次の関係式を用いて**Σ<sub>e</sub>**を推定できる。

$$\sigma_e = \mathbf{c}_x - \mathbf{b} \mathbf{c}_x^T.$$

ただし、非介入変数間の共分散の式は決定論的な場合と直接平行ではないので、この特定のモデルに主な関心がある場合は、この論文で紹介した理論のいくつかを適応する必要があることに注意してください。

これまで議論してきたすべてのモデルでは、介入は、介入された変数をその通常の原因から独立させることによって、完全にコントロールすることを想定してきた。介入のこの表現は、ランダム化比較試験における介入や、変数が特定の値に「クランプ」される場合の介入と一致するものである。しかし、介入はこの意味で「外科的」である必要はなく、介入された変数とその原因親との間の関係を壊すことなく、介入された変数に追加の影響を加えることだけが可能である。このような介入は、「ソフト」介入と呼ばれることがある。線形モデルにおいて、それらは、因果関係の発見に有用であることが知られている道具変数と形式的に等価である。つまり、式4から行列**U<sub>k</sub>**は両方のケースで削除されるが、影響**c**はまだ追加される。ソフト介入による介入変数への影響が既知であり、つまり**c**が測定され、複数の同時ソフト介入が独立して行われると仮定すると、介入変数の実験的効果を決定することができることが示される。このように、ここで説明した機械全体は、ごくわずかな調整だけで移行することができる。ソフトな介入を互いに独立して組み合わせることができることから、非常に効率的な実験プロトコルを開発することができる。Eberhardt et al. (2010)では、統計的な観点からも、ソフト介入は因果関係の発見に必要なサンプル数が全体的に最も少ないと思われることを発見した。

最後に、LLC-Algorithm は、**B** の未知の直接効果  $b_{ji}$  を線形に制約するために、測定された実験効果  $t(x_i \sim x_u || J)$  を使用していることに注目する価値があります。

は、総効果  $t(x_i \sim x_u)$  を制約する  $\diamond\diamond^{10}$  実際、このような表現は、Eberhardt et al. (2010) で



潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
 開発されたものである。実験  $E_k = (J_k, U_k)$  が与えられたとき、未知の総効果  $t(x_i \sim x_u)$  に対する測定された実験効果の線形拘束は、次のように与えられる。

$$t(x_i \sim x_u) = t(x_i \sim x_u \parallel J_k) + \sum_{x_j \in J_k \setminus \{x_i\}} t(x_i \sim x_j) t(x_j \sim x_u \parallel J_k).$$

この制約は、式16の直接効果に関する制約と同様の形式を持つが、異なる実験効果の集合を組み合わせている。このような制約を総効果で表現することは、総効果を特定するためのLLCに類似したアルゴリズムの基礎を形成する。すべての総効果が決定されると、必要に応じて、直接効果を容易に推論することができます（Eberhardt et al., 2010を参照）。

- 
10. 総効果は、原因のみが介入の対象となる単一介入実験における実験効果、すなわち  $t(x_i \sim x_u) = t(x_i \sim x_u \parallel \{x_i\})$  に対応することを想起されたい。

## 8. 結論

我々は、一連の実験から得られたデータを用いて、サイクルや潜在変数を含む可能性のある線形因果モデルを同定する手順を説明した。線形を仮定することは重要な制約であるが、他のすべての点で、これほど弱い仮定で動作する他の手順を我々は知らない。このモデル空間を考えると、ペア条件と共分散条件の充足が識別可能性にとっていかに重要であることを示したことになる。さらに、同定可能性条件が満たされない場合、モデルの過小決定は一般にかなり局所的であることを指摘した。

正準モデルと正準実験のセットという観点からの分析にもかかわらず、これらは実際には非常に弱い条件でしかないことを指摘した：また、潜在変数を持つほぼすべての線形周期モデルは、利用可能なデータおよび生成された新規予測に関して完全に等価な正準モデルによって表現することができる。このように、我々の手順は、非常に一般的なモデルファミリーと実験セットアップを扱うことができる。

我々は、LLCアルゴリズムが、同様の推論問題を解くために設計されたアルゴリズムと比較して、かなり良いパフォーマンスを示すことを示した。さらに、DREAM課題では、現実的なデータに対して、我々のアルゴリズム（問題に適切に適応された）がどのように機能するかを比較することができました。線形性の仮定にもかかわらず、すべての課題において競争力があります。

セクション7では、我々のモデルと探索手順を確率的ダイナミクスを持つモデルにどのように一般化できるかを示唆した。Eberhardt et al (2010) では、いわゆる「ソフト」介入による実験も検討した。未解決の問題が残っている：すべての順序付けられた変数のペアに対してペア条件を満たす実験に基づく探索手順が、モデルの識別に十分であるような、モデルが満たすべき最小の条件は何であろうか。Hyttinen et al. (2011)では、この条件がノイズ・オア・パラメトリゼーションを持つ離散非周期モデルにおける識別可能性に必要かつ十分であることが示された。この条件が他のモデル群にどの程度一般化するかは分かっていない。

## 謝辞

極めて詳細かつ有用なコメントをいただいた匿名査読者の方々に感謝する次第である。

A.H.とP.O.H.は、フィンランドアカデミーとヘルシンキ大学研究費から支援を受けた。

F.E. はJames S. McDonnell Foundation から「Ex-perimental Planning and the Unification of Causal Knowledge」についての助成を受けた。

## 付録A. データの中央揃え

ここでは、データをセンタリングする方法を示し、外乱の平均がゼロであると仮定した潜在変数を持つ線形周期モデルでモデル化できるようにする。また、このモデルの予測を実際のデータ生成プロセスの予測に変換する方法についても検討する。全体を通して、各実験で平均と共分散行列を無限サンプル限界で観測することを仮定する。

真のデータ生成モデルを、潜在変数  $(\mathbf{B}, \Sigma_e, \mu_e)$  を持つ線形循環モデルとする。

ここで、 $\mu_e \neq \mathbf{0}$ . 平均値  $\mu^0$  の受動的観測データを観測したとする。

experiment  $E_k = (J_k, U_k)$  データ生成モデルは、以下の平均と共分散行列を持つデータを生成する:

$$\begin{aligned}\mu_x^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{U}_k \mu_e + \mathbf{J}_k \mu), \\ \mathbf{C}_x^k &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\sigma^k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T}.\end{aligned}\quad (26)$$

によって、まずすべてのデータ

$$\mathbf{x}^- = \mathbf{x} - \mu_x^0 \quad (27)$$

とすると、センタリングされたデータは、平均  $\mu^{-k} = \mu^k - \mu^0$  と、変化していない共分散行列  $\mathbf{C}^{-k} = \mathbf{C}^k$  を持つことになります。

式27のセンタリングは、 $J_k$  の介在する変数をランダム化する代わりに、次のことを意味する。平均  $(\mu^k)_{JJ}$  と共分散  $(\Sigma^k)_{JJ}$  は、中心化された変数が以下のようにランダム化されているとみなされる。

平均  $(\mu_{c_k}^k)_{JJ} = (\mu^k - \mu^0)_{c_k JJ}$  および共分散  $(\Sigma_{c_k}^{-k})_{JJ} = (\Sigma^k)_{c_k JJ}$ 。以降の式から

は、ゼロ平均の外乱を持つ対応するモデル  $(\mathbf{B}^{\sim}, \Sigma_{\sim e}, \mu_{\sim e})$  が、 $\mathbf{B}^{\sim} = \mathbf{B}$ 、 $\Sigma_{\sim e} = \Sigma_e$  となり、介在する変数が平均  $(\mu^{-k})_{JJ}$  でランダム化されるとき、中心化されたデータを生成する。

と共分散  $\mathbf{C}^{-k}$  があります:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{C}}_x^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^{\sim})^{-1} (\Sigma_{\sim e}^k + \mathbf{U}_k \Sigma_{\sim e} \mathbf{U}_{ek}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^{\sim})^{-T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\Sigma_e^k + \mathbf{U}_k \Sigma_e \mathbf{U}_{ek}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-T} = \mathbf{C}_x^k = \mathbf{C}^{-k}, \\ \mu_{\tilde{x}}^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^{\sim})^{-1} (\mathbf{U}_k \mu_{\sim e}^0 + \mathbf{J}_k \mu_x^{-})^k \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_k^{-1} (\mu^k - \mu^0)^c + \mathbf{J}_k \mu_x^{-} | \mu^0 = (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mu^{-1}_e \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{J} \mu^{-1}_k \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{J}^{-1}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mu^{-1}_e + (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mu^{-1}_e - \mu^0 \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{J} \mu^{-1}_k \mathbf{C} + (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (-\mathbf{J}_k + \mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mu^{-1}_e - \mu^0 \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{J} \mu^{-1}_k \mathbf{C} + (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (-(\mathbf{I} - \mathbf{U}_k) + \mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mu^{-1}_e - \mu^0 \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{U}_{\sim e}^k + \mathbf{J} \mu_{\sim e}^k) - \mu^0 = \mu^k - \mu^0 = \mu^{-k}.\end{aligned}$$

したがって、センタリングは  $\mathbf{B}$  と  $\Sigma$  に関して無害である。この恒等式は、ある新しい実験  $E_k$  におけるゼロ平均擾乱モデルの予測を、実際のデータ生成モデルの予測に変換する方法をも示している:  $\mu^k = \mu^0 + \mu_{\sim e}^k$  and  $\mathbf{C}^k = \mathbf{C}_{\sim e}^k$ .

万が一、受動的な観測データが得られない場合は、実験  $E_k$  で観測されたデータベクトル  $\mathbf{x}$  を単純に中央に配置すればよい:

$$\mathbf{x}^- := \mathbf{x} - \mu_x^k$$

これは本質的に、各実験で観測された平均値を無視するだけに相当する。論文の理論は、データの共分散行列が外乱の平均値から独立しているため、直接効果行列  $\mathbf{B}$

と共分散行列を推定する線形モデルの学習ができます。これは構造発見には十分ですが、新規の実験セットアップで観測された平均値の一貫した予測を実現したい場合は、 $\mu_e$  も推定することが必要です。実験  $E_k = (J_k, U_k)$  では、データは平均値  $\mu_x^k$ 、だから  $(\mu_e)_U$  は、 $((I - U_k B) \mu_x^k)_U$  で推定できる。

$$\begin{aligned} ((I - U_k B) \mu_x^k)_U &= ((I - U_k B)(I - U_k B)^{-1} (U_k \mu_e + J_k \mu_x^k))_U \\ &= (U \mu_{ke} + J \mu_x^k)_U = (\mu_e)_{Uk}. \end{aligned}$$

したがって、各変数 $x_i$ が何らかの実験で操作されずに観測され、**B**が同定されれば、ベクトル全体 $\mu_e$ を推定することができる。そして、任意の新規実験 $E_k$ の予測平均 $\mu^k$ は、式26を使用して求めることができる。平均値の予測に関する追加の議論については、付録BとJを参照されたい。

## 付録B．レンマ5(相関実験)の証明

相関実験  $E_k$  において、 $\mathbf{c}$  は平均  $\mu^k$  と共分散行列  $\Sigma^k$  のようなランダム化されたものである。 $(\Sigma^k)_{JJ}$  が対称的な正定値であることから、モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  は次のような観測結果をもたらす。

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_k^{\mathbf{x}} &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mu_{\mathbf{c}}^{-1k} \backslash \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\sigma_{\mathbf{c}}^k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} \\ \tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}} &= \\ &= \frac{(\Sigma^k)_{JJ} J_k}{(\mathbf{i} - \mathbf{b} \mathbf{u}_k)^{-1} \mathbf{b} \mathbf{u}_j (\sigma_{\mathbf{c}}^k)_{jj} \mathbf{c} \backslash k k} \frac{(\Sigma^{\mathbf{c}})_{JJ} \mathbf{B}^{TJ} J_{kk} (\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U} \mathbf{U})^{-T}}{*} \backslash \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{b} \mathbf{u} \mathbf{u})^{-1} ((\sigma_{\mathbf{c}})_{u,u} \text{ かつ } + \mathbf{b} \mathbf{u}_j (\sigma^k)_{jj} \mathbf{b}^T \text{ c k k U k J k}) (\mathbf{i} - \mathbf{b} \mathbf{u} \mathbf{u})^{-T} \backslash. \end{aligned}$$

そして、レンマで定義された行列  $\tilde{\mathbf{T}}_k$  は、観測された共分散行列  $\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}}$  の観点から、次のようになります。

モデルパラメータ **B** のみで表現しています：

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}} &= ((\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}})_{JJ} J_k \tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}})_{JJ} \backslash = \frac{(\Sigma^k)_{JJ} J_k}{(\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U} \mathbf{U})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{U} J_k (\Sigma^{\mathbf{c}})_{JJ} \backslash k k} \frac{(\Sigma^k)_{JJ} J_k}{\mathbf{c} \backslash k k} \backslash^{-1} \\ &= \frac{\mathbf{I}}{(\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U} \mathbf{U})^{-1} \mathbf{B} \mathbf{U} J_k} = ((\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) \backslash J_k \backslash)^{-1} \end{aligned}$$

ここで、行列  $(\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}})_{JJ} = (\Sigma^k)_{JJ}$  は正定値行列であるため、反転可能である。次の

を適用します：

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}} (\tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}})^T &= ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})_{JJ} ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})_{JJ}^T \backslash \\ \tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}} (\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}})_{JJ} (\tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}})^T &= ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})_{JJ} (\Sigma^k)_{JJ} ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})_{JJ}^T \backslash \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} \sigma^k (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} \backslash. \end{aligned}$$

さて、式5と式6から、介在する変数が平均値ゼロ、単位分散でランダム化されていた場合の実験の統計量を計算することができます（式7と式8で現れます）：

$$\begin{aligned} \mu_{\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}}}^k &= 0 \backslash, \\ \tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}} &= \tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}} (\tilde{\mathbf{C}}_k^{\mathbf{x}})_{JJ} (\tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}})^T + \tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}} (\tilde{\mathbf{T}}_k^{\mathbf{x}})^T \backslash \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\sigma_{\mathbf{c}}^k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek} - \sigma^k + \mathbf{j}_k) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} \backslash \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{潜在変数による線形循環因果モデルの学習} \\ & = (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek} + \mathbf{j}_k) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T}. \end{aligned}$$

レンマの公式は、予測値 $\hat{\mathbf{c}}$ と $\mathbf{C}$ を変換するためにも使用できることに注意してください。 $\mathbf{c}^k$   
 $\mathbf{c}^k$ ここで、 $\mathbf{c}^k$ は平均 $\mu^k$ と共分散 $\Sigma^k$ でランダム化されている:

$$\begin{aligned} \mu^k &= \mathbf{T}^k \mu^k, \\ \mathbf{C}^k &= \mathbf{C}^k + \mathbf{T}^k (\Sigma^k)_{JJ} (\mathbf{T}^k)^T - \mathbf{T}^k (\mathbf{T}^k)^T, \end{aligned}$$

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

ここで、 $\mathbf{T}_x^k = (\mathbf{C}_x^k)_{VJ}$ 。

## 付録C．漸近的に安定なモデルに対するトレック則の導出

漸近安定性の定義から、 $\mathbf{U}_k \mathbf{B}$ の固有値はすべて絶対値で1未満であることがわかります。行列 $\mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k$ の固有値は $\mathbf{U}_k \mathbf{B}$ の固有値と等しいので、行列 $(\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k)^{-1}$ は次の幾何級数として書くことができる：

$$(\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k)^{-1} = \mathbf{I} + \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k + \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k + \dots$$

さて、実験効果 $t(x_i \sim x_u || J_k)$ は、トレックルールが意味する和積で表すことができます：

$$\begin{aligned} t(x_i \sim x_u || J_k) &= (\mathbf{T}_x^k)_{u_i}^{x_i} \\ &= ((\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U}_k)^{-1} \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{J})_{u_i}^{x_i} \text{となる。} \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k + \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k + \dots)_{u_i}^{x_i} \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{J} \\ &= b_{ui} + \sum_j \left( \frac{b_{uj} b_{jli}}{\square} \right) \dots \\ &= \sum_{j \in P(x_i \sim x_u || J_k)} \prod_{j \in U_k} b_{jli} \text{とする。} \end{aligned}$$

## 付録D．レンマ7（マージナル化）の証明

以下では、限界モデル $E_k = (J \sim_k, \mathcal{U}_k)$ の実験とフルモデル $E_k = (J_k, U_k)$ の対応する実験が、 $J_k = J \sim_k$ と $U_k = \mathcal{U}_k \sqcap M$ を満たすことに注意する。一般性を損なわない範囲で、変数は $x_1, \dots, x_i \in J \sim_k, x_{i+1}, \dots, x_j \in U \sim_k$ および $x_{j+1}, \dots, x_n \in M$ とし、ブロック行列の操作を容易にする。

### D.1 弱い安定性

完全モデル $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$ が弱安定であれば、限界化モデル $(\mathbf{B}^\sim, \Sigma_e^\sim)$ も弱安定であることを示す。 $\mathbf{B}^\sim, \Sigma_e^\sim$ が弱安定であることを反仮定とし、したがって、以下のものが存在す



る。 潜在変数による線形循環因果モデルの学習

実験  $E_{k/h}$  は  $(I - \Gamma_k B \sim)$  が特異であるような、あるいは等価的に行列  $\Gamma_k B \sim$  が単位固有値を持つようなものです:

$\square v \sim \neq \Gamma_k B \sim v \sim = v \sim$  となるような  $0$  である。次に、このとき  $U_k B$  も、以下に定義する固有ベクトル  $v$  に対応する単位固有値を持つことを示す:<sup>11</sup>

---

11.  $I - B M M$  の反転性は、実験  $(V \sim, M)$  における  $(B, \Sigma e)$  の弱い安定性から導かれる。

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

$$\begin{aligned}
 U^k B v &= U^k \tilde{v} \quad B V \sim V \sim \quad B V \sim \quad v \quad \| v = \quad \tilde{v} \\
 &= U \tilde{v} \quad I \circ \quad B \quad B M M \quad I - B M M \quad B^{-1} \quad \tilde{v} \\
 &= U \tilde{v} \quad I - B M M \quad U \tilde{v} \quad (I - B M M)^{-1} \quad B M V \sim v \\
 &= U \tilde{v} \quad B M M \quad (I - B M M)^{-1} \quad B M V \sim v \\
 &= (I - B M M) \quad (I - B M M)^{-1} \quad B M V \sim v \quad | \text{Bの定義} \\
 &= (I - B M M) \quad (I - B M M)^{-1} \quad B M V \sim v = v.
 \end{aligned}$$

したがって、 $(I - U_k B)$  は特異であり、フルモデル  $(B, \Sigma_e)$  は弱安定ではない。これは仮定に反するので、 $(B, \Sigma_e)$  は弱安定でなければならない。

## D.2 等共分散マトリックス

実験  $E_k$  において、 $(B, \Sigma_e)$  によって生成される共分散行列  $(C)^k$  が等しいことを示す必要があります。

を、 $(B, \Sigma_e)$  によって生成される共分散行列  $C^k$  に変換する。このため、まず次のように導出する必要がある。

の識別が可能です：

$$(i - b u \sim u_k \sim - b u \sim m (i - b m m)^{-1} b m u \sim)^{-1}, \quad (28)$$

$$(I - B \sim) \sim^{-1} B \sim = b u \sim j \sim + b u \sim m (i - b m m)^{-1} b m j \sim, \quad (29)$$

$$(I - B \sim) \sim^{-1} B \sim = ((i - b u u)^{-1} b u j \sim)^{-1} b m j \sim, \quad (30)$$

$$\begin{aligned}
 ((I - U_k B \sim)) \sim^{-1} \sim &= (i - u_k b) \sim^{-1} \sim. \quad (31)
 \end{aligned}$$

目標は式31を導き出すことで、両モデルとも  $x_i \in J \sim k$  から  $x_u \in U \sim k$  まで同じ実験効果を出

すことを意味する。潜在変数による線形循環因果モデルの学習

式28と式29は、レンマ7における限界化モデルの定義から直接導かれる。式30を示すために、行列  $(\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k')$  をブロック単位で反転させる（限界化変数に対応する行の不要なブロックは'記号で置換される）：

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k')^{-1} &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{B}_{U_k} & -\mathbf{B}_{U_k} \mathbf{U}_k' \\ -\mathbf{B} \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k' & \mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{M}_k \mathbf{M}_k' \end{pmatrix}^{-1} \quad \text{|| ブロック行列の逆行列と式 28} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{B}_{U_k} & \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{M}_k \mathbf{M}_k')^{-1} \mathbf{B}_{U_k} \mathbf{U}_k' \\ \mathbf{U}_k' (\mathbf{I} - \mathbf{B}_{U_k})^{-1} & \mathbf{I} - \mathbf{B} \mathbf{M}_k \mathbf{M}_k' \end{pmatrix}^{-1}
 \end{aligned}$$



潜在変数による線形循環因果モデルの学習 (32)

$$(\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mathbf{v} =$$

$$\mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{U}_k^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \text{となる。} \quad (33)$$

式32は、行列 $\mathbf{v}$ を用いて式31を言い直ただけである。式33は、以下の導出によって検証される：

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mathbf{v} = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{U}_k^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{B}) \quad |\mathbf{U}_k = \mathbf{I} - \mathbf{J}_k| \\ & = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} - \mathbf{J}_k) \mathbf{v} = \mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} - \mathbf{J}_k) \\ & = \mathbf{v} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_k \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_k \mathbf{v} \quad \text{Eq.32.} \\ & = -\mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_k \mathbf{v} + \mathbf{v} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_k \mathbf{v} = \mathbf{J}_k \mathbf{v} \\ & = \mathbf{0} . \end{aligned}$$

最後に、共分散行列 $\tilde{\mathbf{C}}^k$ を示すことができる。 $\mathbf{x}$  のマージナルモデルと一致します。  
マージナル化された共分散行列( $\mathbf{C}$  原型の)  
 $\tilde{\mathbf{C}}^k$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{C}}^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{I} + \mathbf{U}_k \tilde{\Sigma} \sim \mathbf{e} \mathbf{U} \sim_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \quad \|\tilde{\Sigma} \sim \mathbf{e} \text{ の定義} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{I} + \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B} \sim) \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Sigma_e (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-T} \tilde{\Sigma} \sim^T (\mathbf{I} - \mathbf{B} \sim)^T \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{J} \sim_k (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} + \\ &\quad (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{U} \sim_k (\mathbf{I} - \mathbf{B} \sim) \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Sigma_e (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-T} \tilde{\Sigma} \sim^T (\mathbf{I} - \mathbf{B} \sim)^T \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \quad \text{||Eq. 33} \\ &= (\mathbf{I} \sim \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{J} \sim_k \mathbf{J} \sim_k (\mathbf{I} \sim \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} + \\ &\quad \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{U}^{-1}_k (\mathbf{I} - \mathbf{B}) (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \Sigma_e (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-T} (\mathbf{I} - \mathbf{B})^T \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-T} \tilde{\Sigma} \sim^T \quad \text{||Eq. 32} \\ &= \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{J}^{-1}_k (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-T} \tilde{\Sigma} \sim^T + \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \mathbf{U} \Sigma^{-1}_{kek} \mathbf{U} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-T} \tilde{\Sigma} \sim^T \\ &= \tilde{\Sigma} \sim (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k \Sigma \mathbf{U}_{ek}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}) \tilde{\Sigma} \sim^T \mathbf{v} \sim^T = (\mathbf{C})^k \sim.\end{aligned}$$

## 付録E. レンマ8(自己サイクル)の証明

ここでも、まず弱い安定性を示し、その後、共分散行列が等しいことを確認する。

### E.1 弱い安定性

まず、自己ループを持たないモデル  $(\mathbf{B} \sim, \tilde{\Sigma} \sim_e)$  が弱安定であることを示し、モデル  $(\mathbf{B} \sim, \Sigma_e)$  が  
を持つ自己ループは弱く安定である。実験での  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  の弱安定に注目する  $(V \sim \omega \sim)$ 。

$\{x_i\}, \{x_i\}$  は、 $b_{ii} \neq 1$  を意味する。そこで、 $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  が弱安定であると仮定する。ある実験  $E_k$  において、 $(\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)$  が反転しないことを反仮定して、 $\mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim \mathbf{v} = \mathbf{v}$  となるような  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$  を仮定する。行列  $\mathbf{B}$  は、レンマにおける  $\mathbf{B} \sim$  の定義を反転することにより行列  $\mathbf{B} \sim$  の関数として書くことができる：

$$\mathbf{B} = (\mathbf{I} - b \mathbf{U}_{iii}) \mathbf{B} \sim + b \mathbf{U}_{iii}.$$

$x_i \in J_k$  とすると、 $\mathbf{U} \mathbf{U}_{ki} = \mathbf{0}_{n \times n}$  となる。

$$\mathbf{U}_k \mathbf{B} = \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - b \mathbf{U}_{iii}) \mathbf{B} \sim + b \mathbf{U} \mathbf{U}_{iki} = \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim.$$

となり、 $\mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{v} = \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim \mathbf{v} = \mathbf{v}$  となる。あるいは、 $x_i \notin U_k$  とすると、 $\mathbf{U} \mathbf{U}_{ki} = \mathbf{U}_i$  となり、このとき

$$\begin{aligned}
 \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{v} &= \mathbf{U}_k (\mathbf{I} - b \mathbf{U}_{iii}) \mathbf{B} \mathbf{v} + b \mathbf{U}_k \mathbf{U}_{iii} \mathbf{v} \\
 &= (\mathbf{I} - b \mathbf{U}_{iii}) \mathbf{U}_k \mathbf{B} \mathbf{v} + b \mathbf{U}_k \mathbf{U}_{iii} \mathbf{v} \\
 &= (\mathbf{I} - b \mathbf{U}_{iii}) \mathbf{v} + b \mathbf{U}_{iii} \mathbf{v} = \mathbf{v} \text{ です。}
 \end{aligned}$$

どちらの場合も行列  $\mathbf{U}_k \mathbf{B}$  は単位固有値を持つので、 $\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}$  は特異である。これはモデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  が弱安定であるという仮定と矛盾するので、モデル  $(\mathbf{B}^\sim, \Sigma_e)$  は弱安定である必要がある。

を安定させることができます。

## E.2 等共分散マトリックス

そして、任意の実験  $E_k$  において、2つのモデルが同じ共分散行列を持つデータを生成することを示す。まず、変数  $x_i \in J_k$  とすると、 $\mathbf{U} \mathbf{U}_{ki} = \mathbf{0}_{n \times n}$ 、 $\mathbf{U}_k \mathbf{B} = \mathbf{U}_k \mathbf{B}^\sim$ （上に示したとおり）となる。

$$\mathbf{U}_k \Sigma^\sim \mathbf{e} \mathbf{U}_k = \mathbf{U}_k \left( \mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i \right) \Sigma_e \left( \mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i \right)^T \mathbf{U}_k = \mathbf{U}_k \Sigma \mathbf{U}_{ek} .$$

共分散行列は三重に等しい:

$$\begin{aligned} & \sim^k \mathbf{C}_{\mathbf{x}} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k \Sigma \sim \mathbf{e} \mathbf{U}_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \\ & = (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} = \mathbf{c}^k \mathbf{x} \end{aligned}$$

あるいは、変数  $x_i \in U_k$  とすると、 $\mathbf{U} \mathbf{U}_{ki} = \mathbf{U}_i$  となり、以下の理由から。

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U} \mathbf{U}_{ki} (\mathbf{I} - \mathbf{B})) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \\ &= \mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} - \mathbf{J}_k \mathbf{B}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} \quad \|\mathbf{U} \mathbf{J}_{ik} = \mathbf{0}_{\mathcal{X}^n} \\ &= \mathbf{I} + \frac{\mathbf{I} - \mathbf{A}_i}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i, \end{aligned}$$

の場合、共分散行列も等しくなります:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{\mathbf{x}}^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k \Sigma \sim \mathbf{e} \mathbf{U}_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \quad \|\Sigma \sim \mathbf{e} \text{の定義}\} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i) \Sigma_e (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i)^T \mathbf{U}_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} ((\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i) \mathbf{J}_k (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i)^T \quad \|\text{diag. mat.のマルチプルは} \\ &\quad \text{commutes する。} \\ &\quad + \mathbf{U}_k (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i) \Sigma_e (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i)^T \mathbf{U}_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i) (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k \Sigma \mathbf{U}_{ek}) (\mathbf{I} + \frac{b_{ii}}{1 - b_{ii}} \mathbf{U}_i)^T (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \|\text{id.} \\ &\quad \text{above.} \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b} \sim)^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b} \sim) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) \\ &\quad - (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b} \sim)^T (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b} \sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} = \mathbf{c}^k \cdot \mathbf{x} \end{aligned}$$

## 付録F. 式13の導出

Lemma 7 (限界化) は、 $U_k$  の一部の変数が限界化されている場合、介入変数  $x_i \in J_k$  から観測変数  $x_u \in U_k$  への弱い安定性と実験効果が (共分散行列の一部として) 保存されることを示した。そして、変数  $U_k \setminus \{x_j, x_u\}$  がマージナル化された弱安定モデルにおいて、式13が適用されることを示せば十分である。Lemma 8 (Self cycles)により、このモデルには自己ループが存在しないと一般性を損なわずに仮定することができる。

限界モデル  $(\mathbf{B}, \Sigma_e)$  における  $U_k = \{x_j, x_u\}$  の実験  $E_k = (J_k, U_k)$  を検討する。 $J_k \cup \{x_j\}$  に介入する実験における実験効果は、直接効果  $t(x_i \sim x_u \mid J_k \cup \{x_j\}) = b_{ui}$  と  $t(x_j \sim x_u \mid J_k \cup \{x_j\}) = b_{uj}$  だけ。残りの実験効果  $t(x_i \sim x_u \mid J_k)$  と  $t(x_i \sim x_j \mid J_k)$  は行列  $((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})_{U_k, J_k}$  に現れる。



潜在変数による線形循環因果モデルの学習

$$\begin{aligned}
 ((\mathbf{I} - \mathbf{B}_k)^{-1})_{uj} &= (\mathbf{I} - \mathbf{B}_{uu})^{-1} b_{uj} \\
 &= \frac{1}{1 - b_{uj}b_{ju}} \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}} = \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}} \\
 &= \frac{1}{1 - b_{uj}b_{ju}} \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}} = \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}} \\
 &= \frac{1}{1 - b_{uj}b_{ju}} \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}} = \frac{b_{ju}}{1 - b_{uj}b_{ju}}
 \end{aligned}$$

これで、式13が検証できる：

$$\begin{aligned} t(x_i \sim x_u || J_k \sqcup \{x_j\}) + t(x_i \sim x_j || J_k) t(x_j \sim x_u || J_k \sqcup \{x_j\}) &= b_{ui} + \frac{b_{ji} + b_{jubui}}{1 - b_{uj} b_{ju}} b_{uj} \\ &= \frac{b_{ui} - b_{uj} b_{jubui} + b_{uj} b_{ji} + b_{uj} b_{jubui}}{1 - b_{uj} b_{ju}} = \frac{b_{ui} + b_{uj} b_{ji}}{1 - b_{uj} b_{ju}} = t(x_i \sim x_u || J_k). \end{aligned}$$

## 付録G. レンマ9の証明 (ユニオン／インターセクション実験)

この証明では、まず未知の実験効果に関する線形方程式系を導出し、それが弱安定性のもとで一意的な解を持つことを明らかにする。

### G.1 式13の一般化

式13を繰り返し適用することで、 $E_k = (J_k, U_k)$  におけるいくつかの実験的効果と、 $E_{k \cup l} = (J_k \sqcup J_l, U_k \cap U_l)$  におけるいくつかの実験的効果を関連付けるように一般化できる：

$$t(x_i \sim x_u || J_k) = t(x_i \sim x_u || J_k \cup J_l) + \sum_{x_j \sqcup J_l \sqcup J_k} t(x_i \sim x_j || J_k) t(x_j \sim x_u || J_k \cup J_l) \quad \text{である} \quad (34)$$

ここで、 $x_i \in J_k, x_u \in U_k \cap U_l$ . 一般化の別の書き方は、 $E_k = (J_k, U_k)$  におけるいくつかの実験効果を  $E_{k \cap l} = (J_k \cap J_l, U_k \cup U_l)$  における実験効果に関連づける：

$$t(x_i \sim x_u || J_k \cap J_l) = t(x_i \sim x_u || J_k) + \sum_{x_j \sqcup J_k \sqcup J_l} t(x_i \sim x_j || J_k \cap J_l) t(x_j \sim x_u || J_k).$$

ここで、 $x_i \in J_k \cap J_l, x_u \in U_k$ .

### G.2 ユニオン実験における実験効果を表す式

まず、 $V$  を以下のような不連続な集合に分割する： $I = J_k \cap J_l$  (両実験に介入)、 $K = J_k \setminus J_l$  ( $E_k$  にのみ介入)、 $L = J_l \setminus J_k$  ( $E_l$  にのみ介入)、 $O = U_k \cap U_l$  (両実験で消極的に観測)。  $x_k \in K, x_u \in O$  の各対  $(x_k, x_u)$  について、実験  $E_k$  の実験効果を用いて式34の形の方程式を作ることができる：

$$t(x_k \sim x_u || J_k \sqcup J_l) + \sum_{x_j \sqcup L} t(x_k \sim x_j || J_k) t(x_j \sim x_u || J_k \sqcup J_l) = t(x_k \sim x_u || J_k).$$

このようなペアの方程式は、すべてブロックマトリックスできれいに表現することができます：

$$(\mathbf{T}^{k \cup l})_{\mathbf{x}}^{OK} + (\mathbf{T}^{k \cup l})_{\mathbf{x}}^{OL} (\mathbf{T}^k)_{\mathbf{x}}^{LK} = (\mathbf{T}^k)_{\mathbf{x}}^{OK}.$$

同様に、 $x_k \in I$  の変数に関する線形循環因果モデルの学習についても、実験  $E_l$  の実験効果を用いて方程式を立てることができる。 $x_k \in I$ 、 $x_u \in O$  のペア  $(x_k, x_u)$  については、どちらの実験効果でも方程式を立てることができるが、その中で、実験  $E$  の効果のみを用いた方程式を立てることが判明した。

の実験効果  $E_k$  が必要である。この方程式は次のような系を形成する：

$$\begin{array}{c} \mathbf{h} \\ k \square l \\ (\mathbf{T}_x)OI (\mathbf{T}_x)OK (\mathbf{T}_x)OL \end{array} \quad \begin{array}{c} \mathbf{i} \\ l \square l \\ (\mathbf{T}_x)OI (\mathbf{T}_x)OK (\mathbf{T}_x)OL \end{array} \quad \begin{array}{c} \mathbf{h} \\ k \square l \\ (\mathbf{T}_x)OI (\mathbf{T}_x)OK (\mathbf{T}_x)OL \end{array} \quad \begin{array}{c} \mathbf{i} \\ l \square l \\ (\mathbf{T}_x)OI (\mathbf{T}_x)OK (\mathbf{T}_x)OL \end{array} \quad (35)$$

### G.3 インバーティビリティ

さて、右の行列と行列**Q**がわかったので、右から**Q**<sup>-1</sup>をかけて左の行列を解きたいと思  
います。したがって、**Q**が反転可能であることを示す必要があります。*O*の変数/は行列  
**Q**に一切登場しないので、限界モデル ( $B \sim, \Sigma_e$ ) を考える。

を、 $V \sim = V \oplus$ の上に置き、変数*O*をマージナル化する。に対応するマージナル化された  
実験

を実験 $E_k$ と実験 $E_l$ に当てはめると、それぞれ $E \sim_k = (I \cup K, L)$ と $E \sim_l = (I \cup L, K)$ となる  
。仮定通り(**B**,  $\Sigma_e$ )が弱安定であれば、(**B**<sup>~</sup>,  $\Sigma_e$ )もレンマ7 (限界化) により弱安定であ  
る。すべての

**Q**の実験的効果は、マージナル化で保存される。これで、ブロックは式9を用いて表現で  
きる:

$$\begin{aligned} (T^k)_{LI} &= (T \sim^k)_{LI} = ((I - B \sim_{LL})^{-1} B \sim_{L, I \cup K})_{LI} = (I - B \sim_{LL})^{-1} B \sim_{LI}, \\ (T^k)_{LK} &= (T \sim^k)_{LK}^x = ((I - B \sim_{LL})^{-1} B \sim_{L, I \cup K})_{LK} = (I - B \sim_{LL})^{-1} B \sim_{LK}, \\ (T^l)_{KL} &= (T \sim^l)_{KL}^x = ((I - B \sim_{KK})^{-1} B \sim_{K, I \cup L})_{KL} = (I - B \sim_{KK})^{-1} B \sim_{KL}. \end{aligned}$$

式中で反転している行列は、マージナル化されたモデルが弱安定であるため、反転可能な  
行列である。さて、**Q**は3つの単純な正方行列の積として書くことができる:

$$\begin{pmatrix} \boxed{I} & \boxed{0} & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{I} & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \boxed{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (i - b \sim_{ll})^{-1} b \sim_{li} & \sim & (i - b \sim_{ll})^{-1} b \sim_{lk} \\ \sim & \sim & \sim \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (I - B \sim_{KK})^{-1} B \sim_{K, I \cup L} & \sim & \sim \\ \sim & \sim & \sim \end{pmatrix}$$

になります。

左の行列と右の行列は、反転可能なブロックを持つブロック対角行列として反転可能で  
ある。真ん中の行列を線で示したブロックで考えてみます。右上のブロックは0だけな  
ので、対角の2つのブロックが可逆であれば、この行列は可逆である。右下のブロック  
は、実験においてマージナル化されたモデルが弱安定であるため、反転可能である

$(I, K \cup L)$  である変数  $i$  による可逆循環行列  $Q$  は可逆である。なお、この因数分解は、 $I = 0$  の場合にも有効である。

#### G.4 実験効果に関する行列式

交差点実験の方程式の導出と反転可能性の証明は、非常に同様に進められる。ここでは、完全性を期すために、ユニオン実験と交差点実験における実験効果を解くための公式を示す：

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OI} & (\mathbf{T}_x)_{OK} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix}^{-1} \\ & \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix}^{-1} \\ & \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{i} \\ (\mathbf{T}_x)_{OL} & (\mathbf{T}_x)_{OL} \end{pmatrix}^{-1} \end{aligned}$$

ユニオンとインターセクションの実験における完全な共分散行列を決定する方法については、付録Jを参照。

## 付録H. レンマ13(Bの摂動)の証明

$x_i \in J_k, x_j \in U_k$  の実験  $E_k = (J_k, U_k)$  は、ペア  $(x_i, x_j)$  に対してペア条件が満たされないの  
で、考慮する必要がない。そこで、 $x_j \in J_k$  の実験  $E_k = (J_k, U_k)$  を考える。レンマ13以降  
の本文で説明したように、 $B$  と  $B^\sim$  は  $j$  番目の行でだけ異なる。そして、 $x_j \in J_k$  とすると、  
 $U_k B^\sim = U_k B$  となり、実験効果は等しくなるはずである。

実験  $E_k = (J_k, U_k)$   $x_i \in U_k, x_j \in U_k$  を残す。実験  $E_{k'} = (K, L) = (V \setminus \{x_i, x_j\}, \{x_i, x_j\})$  の特  
殊ケースでは、代替係数行列  $B$  の定義によって実験効果は同じであることがわかる：

$$T_x^{k'} = (I - \begin{matrix} LL \\ LK \end{matrix})^{-1} B \sim = (I - B \begin{matrix} LL \\ LL \end{matrix})^{-1} (I \begin{matrix} LL \\ LL \end{matrix}) (I - \begin{matrix} \\ -1BLK \end{matrix}) = (I - B \begin{matrix} LL \\ LL \end{matrix})^{-1} B \begin{matrix} LL \\ LL \end{matrix} = T^{k'}.$$

それ以外の場合、介入セット  $J_k$  は、プレゼンテーション  $J_k = K \cap (J_k \cup L)$  を持  
つ。先ほど、実験  $(K, L)$  では実験効果が同じであることを指摘しました。先に、 $x_j$  が  
介入するとき、実験効果が等しいことを示したが、これは特に実験  $(J_k \cup L, U_k \subseteq L)$  に  
おいて成り立つ。レンマ9（連合／交差実験）により、交差実験  $E_k$  の効果は次のように  
定義される。

を元の2つの実験の実験効果で割ったものなので、実験効果は実験  $E_k$  で等しくなるはず  
です。

## 付録I. レンマ14の証明 ( $\Sigma$ の摂動)。

任意の実験  $E_k = (J_k, U_k)$  をとる。このとき、2つのモデル  $(B, \Sigma_e)$  と  $(B^\sim, \Sigma_e^\sim)$  は同  
じ実験精神効果をもたらす。すると、以下の恒等式が証明できる：

$$u_k (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} = u_k (i - u_k b) j_k^{-1}, \quad (36)$$

$$(i - u_k b^\sim) j_k^{-1} = (i - u_k b) j_k^{-1}, \quad (37)$$

$$(i - u_k b^\sim) j_k^{-1} (i - u_k b^\sim)^{-T} = (i - u_k b) j_k^{-1} (i - u_k b)^{-T}, \quad (38)$$

$$(i - u_k b^\sim) u_k^{-1} (i - b^\sim) = (i - u_k b) u_k^{-1} (i - b). \quad (39)$$

式36は、実験  $E_k$  において、2つのモデルの実験効果が同じであることから直接導かれる。

式37は、以下により証明される：

$$\begin{aligned} & (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} \|u_k + j_k = i \\ & = u_k (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} + j_k (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} \|j_k (i - u_k b^\sim) = j_k \\ & = u_k (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} + j_k (i - u_k b^\sim) (i - u_k b^\sim) j_k^{-1} \\ & = U_k (I - U_k B^\sim) J_k^{-1} + J_k \|Eq. 36. \end{aligned}$$

潜在変数による線形循環因果モデルの学習

式38は、式37から導かれる：

$$\begin{aligned}
 & (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \|\mathbf{j} \mathbf{j}_{kk} = \mathbf{j}_k, \mathbf{j}_k = \mathbf{j}_{kk}^T \\
 & = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{j}_{kk}^T (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-T} \\
 & = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{J}^{-1} ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B} \sim)^{-1} \mathbf{J})^{-1T} \quad \text{||Eq. 37.} \\
 & = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} ((\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1})^{-1T} \\
 & = (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B})^{-T}.
 \end{aligned}$$

式39は、以下により証明される：

$$\begin{aligned} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim) \mathbf{u}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim) &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim)^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim - \mathbf{j})_k \\ &= \mathbf{I} - (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^\sim) \mathbf{J}_k^{-1} \quad \|\text{Eq. 37} \\ &= \mathbf{i} - (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) \mathbf{j}_k^{-1} = (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) \mathbf{u}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}). \end{aligned}$$

最後に、2つのモデルによって生成された共分散行列が等しいことを示すことができる：

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{C}}_x^k &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^\sim)^{-1} (\mathbf{J}_k + \mathbf{U}_k \Sigma^\sim \mathbf{e} \mathbf{U}_k) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_k \mathbf{B}^\sim)^{-T} \quad \|\Sigma^\sim \mathbf{e} \text{の定義} \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim) \mathbf{j}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim)^{-T} + \quad \|\text{Eq. 38, 39} \\ &\quad (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim) \mathbf{u}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim) (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-1} \sigma_e (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim)^T \mathbf{u}_k (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}^\sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) \mathbf{j}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} + \\ &\quad (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) \mathbf{u}_k^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}) (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-1} \sigma_e (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T \mathbf{u}_k (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} \\ &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} = \mathbf{c}^k \cdot \mathbf{x} \end{aligned}$$

## 付録J. ユニオン実験とインターセクション実験の共分散マトリックス

たとえ実験セットが完全なモデルの同定を可能にしないとしても、データ生成モデルが潜在変数を持つ線形循環モデルであると仮定すれば、いくつかの未知の実験設定において、一貫した事前予測が可能である。レンマ9は、既に実施された2つの実験の連合実験と交差実験において、実験効果を予測できることを示した。以下では、この結果を共分散行列全体の予測に拡張する。

データ生成モデルを  $(\mathbf{B}, \Sigma)$  とする。実験  $E_k$  を実施したとする。共分散行列  $\mathbf{C}^k$  と共分散行列  $\mathbf{C}^l$  を観測する実験  $E_l$ 。式17を解くことで

を用いると、2つの実験で同じ実験効果をもたらす行列  $\mathbf{B}^\sim$  を求めることができる。ここで、次のように定義する。

$$\mathbf{M}_1^\sim := (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}^\sim) \mathbf{j}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}^\sim)^{-T},$$

$$\mathbf{M}_2^\sim := (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}^\sim) \mathbf{u}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim).$$

を推定値  $\mathbf{B}^\sim$  を使用している。ここで、行列  $\mathbf{M}_1^\sim + \mathbf{M}_2^\sim \mathbf{C}^k \mathbf{M}_2^{\sim T}$  は共分散に等しいを示すことができる。

行列  $\mathbf{C}_x^{k \cup l}$  真のデータ生成モデルが実験  $E_{k \cup l} = (J_{k \cup l}, U_{k \cup l}) = (J_k \sqcup J_l, U_k \cap U_l)$  で生成することになります：

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_x^\sim + \hat{\mathbf{m}}_x^k \mathbf{m}_x^{\sim T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B}^\sim) \mathbf{J}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B}^\sim)^{-T} \quad \|\text{Eq. 38 and 39} \\ &\quad + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}^\sim) \mathbf{u}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim) \mathbf{c}_x^k (\mathbf{i} - \mathbf{b}^\sim)^T \mathbf{u}_{k \cup l} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}^\sim)^{-T} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B}) \mathbf{J}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B})^{-T} \quad \|\text{Eq. 8} \end{aligned}$$



潜在変数  $\mathbf{b}$  による線形循環因果モデルの学習

$$\begin{aligned}
 &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b}) \mathbf{j}^{-1}_{kUl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b})^{-T} + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b}) \mathbf{u}^{-1}_{kUl} (\mathbf{i} - \mathbf{b})(\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} \\
 &\quad - (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T \mathbf{u}_{kUl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b})^{-T} \quad \|\mathbf{u}_{kUl} = \mathbf{u} \mathbf{u}_{lkk} \\
 &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b}) \mathbf{j}^{-1}_{kUl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b})^{-T} + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b}) \mathbf{u} \mathbf{u}^{-1}_{lkk} \mathbf{u} (\mathbf{i} - \mathbf{b})(\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} \\
 &\quad - (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T \mathbf{u} \mathbf{u}_{kkl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{kUl} \mathbf{b})^{-T} \quad \|\mathbf{u}_k = \mathbf{i} - \mathbf{j}_k
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}) \mathbf{j}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b})^{-T} + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}) \mathbf{u} \mathbf{u}_{lk}^{-1} ((\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) - \mathbf{j}_k) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-1} \\
 &\quad - (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) (\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b})^{-T} ((\mathbf{i} - \mathbf{u}_k \mathbf{b}) - \mathbf{j}_k^T) \mathbf{u} \mathbf{u}_{kl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b})^{-T} \quad \|\mathbf{u} \mathbf{j}_{kk} = \mathbf{0}_{n \times n} \\
 &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}) \mathbf{j}_{k \cup l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b})^{-T} \\
 &\quad + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b}) \mathbf{u} \mathbf{u}_{lk}^{-1} (\mathbf{j}_k + \mathbf{u}_k \sigma \mathbf{u}_{ek}) \mathbf{u} \mathbf{u}_{kl} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cup l} \mathbf{b})^{-T} \quad | \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}_{lk} = \mathbf{u}_{k \cup l} \\
 &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{J}_{k \cup l} + \mathbf{U}_{k \cup l} \Sigma_e \mathbf{U}_{k \cup l}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cup l} \mathbf{B})^{-T} = \mathbf{C}_{k \cup l}^x.
 \end{aligned}$$

交差点実験の共分散行列全体を予測するためには、実験 $E_k$ と $E_l$ の観測値に加え、パッシブ観測データの共分散行列 $\mathbf{C}^0$ が必要です。

ここで、行列を定

義します。

$$\mathbf{M}_3 := (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \tilde{\mathbf{b}}) \mathbf{j}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \tilde{\mathbf{b}})^{-T},$$

$$\mathbf{M}_4 := (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \tilde{\mathbf{b}}) \mathbf{u}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \tilde{\mathbf{b}}).$$

そして、 $\mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_4 \mathbf{C}^0 \mathbf{M} \sim \mathbf{T}$ が共分散行列 $\mathbf{C}^{k \cap l}$ と等しいことを示すことで、データ生成。

$E_{k \cap l} = (J_{k \cap l}, U_{k \cap l}) = (J_k \cap J_l, U_k \cap U_l)$ となります：

$$\begin{aligned}
 &\mathbf{m}_3 + \mathbf{m}_4 \mathbf{C}^0 \mathbf{m} \sim \mathbf{t} \\
 &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{J}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B})^{-T} \quad \|\text{Eq.38 and 39} \\
 &\quad + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \tilde{\mathbf{b}}) \mathbf{u}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \tilde{\mathbf{b}}) \mathbf{C}^0 (\mathbf{i} - \tilde{\mathbf{b}})^T \mathbf{u}_{k \cap l} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \tilde{\mathbf{b}})^{-T} \\
 &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B}) \mathbf{J}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B})^{-T} \quad \|\text{Eq.3} \\
 &\quad + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b}) \mathbf{u}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}) \mathbf{C}^0 (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T \mathbf{u}_{k \cap l} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b})^{-T} \\
 &= (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b}) \mathbf{j}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b})^{-T} \\
 &\quad + (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b}) \mathbf{u}_{k \cap l}^{-1} (\mathbf{i} - \mathbf{b}) (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-1} \sigma_e (\mathbf{i} - \mathbf{b})^{-T} (\mathbf{i} - \mathbf{b})^T \mathbf{u}_{k \cap l} (\mathbf{i} - \mathbf{u}_{k \cap l} \mathbf{b})^{-T} \\
 &= (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B})^{-1} (\mathbf{J}_{k \cap l} + \mathbf{U}_{k \cap l} \Sigma_e \mathbf{U}_{k \cap l}) (\mathbf{I} - \mathbf{U}_{k \cap l} \mathbf{B})^{-T} = \mathbf{C}_{k \cap l}^x.
 \end{aligned}$$

上記の共分散行列の予測式は、実際に行われた実験の介入集合から連続した組合と交差をとって実験の介入集合に到達できる限り、異なる実験における共分散行列の一貫した推定値を見つけるために繰り返し使用することができます。<sup>12</sup>

## 付録K. LLC アルゴリズム

ここでは、LLC学習法の行列 $\mathbf{T}$ は、すべてのペアについてペア条件が満たされていれば、フルカラムランクになることを示す。これは、係数や直接効果が完全に同定されることを意味する。

まず、連合実験 $E_{k \cup l}$ で得られた式16のタイプの方程式は、実験 $E_k$ と $E_l$ で得られた方程式の単なる線形結合であることを示す。これは、付録Gのレンマ9とその証明から、かなり直接的な帰結である。任意の実験 $E_k$ において、 $x_i \in J_k$ と $x_u \in U_k$ を持つすべてのペ

ア  $(x_i, x_u)$  潜在変数による線形循環因果記号の学習に表すことができる：

$$B_{\{x\}J} + B_{\{x\}}^{(Tk)} (U_{mm}^2) J = (\mathbf{T})_{\{x\}J}^k \Leftrightarrow \\ (B_{\{x\}J})_{uk}^T + ((\mathbf{T}^k)_{\{x\}J})_{uk}^T (B_{\{x\}}^{(Tk)})_{uk}^T = ((\mathbf{T}^k)_{\{x\}J})_{uk}^T。$$

12. なお、 $\mu_e \neq 0$ の場合、 $\mathbf{M}_{\mu k}^{-2}$ と $\mathbf{M}_{\mu 0}^{-4}$ は、連合と交差の実験における観測平均の推定値を提供する。  
イメントです。

実験  $E_k$  で得られた方程式と、実験  $E_l$  で得られた  $x_j \square L$  とのペア  $(x_j, x_u)$  に対応する方程式は、係数  $b_{ij}$  を制約する一つの系に集めることができる：

左の行列の左側のブロックは、Appendix Gで紹介したQ行列の転置に過ぎないことに注意されたい。**Q**はデータ生成モデルが弱安定であるという仮定のもとで反転可能であることが示されたので、式群に左から $\mathbf{Q}^{-T}$ を乗じることができる。として、付録Gの式35のブロックの中で、次のような恒等式が得られます：

したがって、左から式40に $\mathbf{O}^{-T}$ を掛けると、次のような式体系になる:

連合実験  $E_{kul} = (J_{kul}, U_{kul})$  について、 $I \cup K \cup L = J_{kul}$ ,  $\mathcal{O} = U_{kul} \setminus \{x_u\}$  が成立する。この方程式系は、次のような簡単な形で書くことができる:

3484

これらは、係数 $b$ を制約する実験 $E_{k|l}$ の方程式のすべてです<sup>16</sup>。任意の $x_u \in O$ を考えたので、同じ手順を各 $x_u \in O$ について繰り返すことができます。これにより、連合実験で得られた方程式がすべて出尽くします。このように、実験 $E_{k|l}$ で得られた方程式はすべて、元の2つの実験 $E_k$ と $E_l$ で得られた方程式のいくつかの線形結合である。

最後に、行列 $\mathbf{T}$ がフルカラムランクであることは、次のように検証できる。行列 $\mathbf{T}$ がフルカラムランクであることは、系 $\mathbf{T}\mathbf{b} = \mathbf{t}$ がせいぜい一意解を持つことと同じである。元の方程式系 $\mathbf{T}\mathbf{b} = \mathbf{t}$ は、実験 $\{E\}_{k|l=1,\dots,K}$ に集まったすべての方程式（式16のようなもの）から構成されている。我々は次のことができる。  
結合実験 $E$ で得られるであろう方程式を常に追加する $k|l$  2つの実験の $E_k$

と $E_l$ の方程式がすでにシステム内にある場合、システムの可能な解をさらに制限することなく、その方程式を追加することができます。これは、追加された方程式が、すでにシステム内にある方程式のいくつかの線形結合に過ぎないからである。すべてのペアについてペア条件が満たされている場合、追加することによって、常に

方程式が既に存在する2つの実験の連合実験から、最終的に、すべての変数 $x_u \in V$ に対して、集合 $V \setminus \{x_u\}$ に介在する実験の方程式を追加できる（これは、定義10の後に議論された理論的根拠に従う）。これらの方程式は、直接効果 $\mathbf{b}$ を直接かつ一意に決定する。解答空間はずっと制限されていなかったなので、手順で新しい方程式を追加することで、元のシステムは最大でも一意解を持っていたことが推測でき、これは元の行列 $\mathbf{T}$ が完全な列ランクを持っていることを意味します。

## 参考文献

- K.A. Bollen. *潜在変数による構造方程式*. John Wiley & Sons, 1989.
- D.M. Chickering. ベイジアンネットワーク構造の等価クラスを学習する。 *マーチン・レーニング研究誌*, 2:445-498, 2002a.
- D.M. Chickering. 貪欲な探索による最適な構造同定. *機械学習研究*, 3:507-554, 2002b.
- T.クラアセン、T.ヘスケス。異なる実験からの複数モデルにおける因果関係発見。において  
*神経情報処理システムの進歩* 23, ページ 415-423, 2010.
- G.クーパー、C.ユウ。実験データと観測データの混合から因果関係を発見する。 In *Proceedings of the Fifteenth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, pages 116-125, 1999.
- D.イトン、K.マーフィー。不確実な介入からの正確なベイズ構造学習. In *Proceedings of the Eleventh International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, 2007.
- F.エバーハルトとR.シャイネス。介入と因果推論。 *科学哲学*, 74:5: 981-995, 2007.
- F.F. Eberhardt, C. Glymour, and R. Scheines.  $n$ 個の変数間のすべての因果関係を特定するのに十分な、そして最悪の場合必要な実験数について。 In *Proceedings of the Twenty-First Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, pages 178-184, 2005.

F.Eberhardt, P. O. Hoyer, and R. Scheines. 潜在的な変数を持つ線形循環モデルを発見するための実験の組み合わせ。第13回人工知能と統計に関する国際会議議事録, 2010.

F.M. Fisher. 連立方程式モデルに対する対応原理. *Econometrica*, 38(1): pp.73-92, 1970.

R.A. フィッシャー 実験計画法(*The Design of Experiments*). Hafner, 1935.

D.ガイガーとD.ヘッカーマン。ガウシアンネットワークの学習. 技術報告書 MSR-TR-94-10, Microsoft Research, 1994.

- C.グリモア、R.シャイネス、P.スパーテス、K.ケリー。因果構造の発見：人工知能、科学哲学、統計モデリング。Academic Press, 1987.
- G・H・ハーディ ダイバージェント・シリーズオックスフォードClarendon Press, 1949.
- A.Hyttinen, F. Eberhardt, and P. O. Hoyer.潜在変数を持つ線形環状モデルに対する因果発見。第5回確率的グラフィカルモデルに関するヨーロッパワークショップ, 2010にて。
- A.Hyttinen, F. Eberhardt, and P. O. Hoyer.潜在的交絡を持つノイジー・オア・モデル。In *Proceedings of the Twenty-Seventh Conference Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, 2011.
- A.Hyttinen, F. Eberhardt, and P. O. Hoyer.因果関係発見のための実験選択。Submitted, 2012.
- S.伊谷、M.オハネシアン、K.サックス、G.P.ノーラン、M.A.ダーレ。因果的な環状ネットワークにおける構造学習。 *JMLR Workshop & Conference Proceedings*, volume 6, pages 165-176, 2008.
- M.Koivisto and K. Sood.ベイジアンネットワークにおける厳密なベイジアン構造発見。 *機械学習研究*, 5:549-573, 2004.
- S.L. Lauritzen と T. S. Richardson.チェーングラフモデルとその因果関係の解釈。 *王立統計学会誌：シリーズB（統計的方法論）*, 64:321-348, 2002.
- D.Marbach, T. Schaffter, C. Mattiussi, and D. Floreano.リバースエンジニアリング手法の性能評価のための現実的なインシリコ遺伝子ネットワークの生成。 *Journal of Computational Biology*, 16(2):229-239, 2009.
- S.J. Mason.フィードバック理論：シグナルフローグラフのさらなる特性。Technical Report 303, Research Laboratory of Electronics, Massachusetts Institute of Technology, 1956.
- S.Meganck, B. Manderick, and P. Leray.ベイズネットワークを学習するための決定理論的アプローチ。技術レポート、Vrije Universiteit Brussels, 2005.
- K.P. Murphy.因果ベイズネット構造の能動的学習。技術報告、U.C. Berkeley, 2001.
- E.Nyberg と K. Korb。情報提供のための介入。In *Causality and Probability in the Sciences*.College Publications, London, 2006.



潜在変数による線形循環因果モデルの学習  
J.パール*Causality*.オックスフォード大学出版局, 2000.

R.J. Prill, D. Marbach, J. Saez-Rodriguez, P. K. Sorger, L. G. Alexopoulos, X. Xue, N. D. Clarke,  
G. Altan-Bonnet, and G. Stolovitzky. システム生物学モデルの厳密な評価に向けて:  
DREAM 3 の課題。 *PLoS ONE*, 5(2):e9202, 2010.

T.S.リチャードソン フィードバックモデル: 解釈と発見. 博士論文、カーネギーメロン大  
学、1996年。

M.Schmidt and K. Murphy. 有向環状グラフモデルを用いた離散インターベンションデータ  
のモデリング。 In *Proceedings of the Twenty-Fifth Conference Conference on Uncertainty in  
Artificial Intelligence*, 2009.

ヒュッティネン、エーベルハルト  
、ホイヤー

S.清水聡、P. O. Hoyer、A. Hyvärinen, and A. J. Kerminen.因果関係発見のための線形非ガウス型非周期モデル. *機械学習研究*, 7:2003-2030, 2006.

J.スペンサー極小完全分離系。 *組合せ論研究*, 8(4):446 - 447, 1970.

P.Spirtes.フィードバックモデルの有向環状グラフ表現. *第11回人工知能における不確実性会議議事録*, 1995.

P.スピルテス、C.グリモア、R.シャイネス。 *因果関係、予測、探索*. MIT Press, 2nd edition, 2000.

G. Stolovitzky, R. J. Prill, and A. Califano.DREAM 2の課題からの教訓。 *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1158(1):159-195, 2009.

S.Tong and D. Koller.ベイジアンネットワークにおける構造のための能動的な学習。 *第17回国際人工知能合同会議予稿集*, ページ863-869, 2001.

T.VermaとJ.Pearl。コーザルネットワーク：意味論と表現力. *第4回人工知能における不確実性会議議事録*, ページ352-359, 1988.

S.ライトパス係数の方法. *数理統計学年報*, 5(3):pp.161- 215, 1934.