

AI時代の統計的因果探索 — 相関から因果へ、そして自律因果探索へ —



技術解説

清水 昌 平*

Statistical Causal Discovery in the Age of AI

Key Words: Causal discovery, Causal AI, AI for Science

AI時代になぜ因果探索が必要なのか

近年、深層学習や大規模言語モデル(LLM)の発展により、人工知能(AI)は科学研究や産業のさまざまな場面で活用されるようになった。画像認識や自然言語処理に加え、創薬、材料開発、医療、金融など幅広い分野で高精度な予測が実現されつつある。このようなAIの科学研究への活用は AI for Science と呼ばれ、研究開発のあり方そのものを変革する可能性に期待が寄せられている。

しかし、現在のAIの多くはデータ中の相関関係を利用して、「何が起るか」を予測することは得意であっても、「何を変えれば何が起るか」という問いにデータに基づいて答えることは容易ではない。

例えば、チョコレート消費量が多い国ほどノーベル賞受賞者数が多いという有名な相関が知られている¹⁾。しかし、チョコレート消費量を増やせばノーベル賞受賞者数が増えるとは限らない。原因と結果の関係になくても、GDPなどの共通要因が両者に影響し、それらの相関を引き起こしている可能性があるからである。

このような「変化させたら何が起るか」という問いに答えるためには、相関関係ではなく因果関係を考える必要がある。統計的因果推論²⁾は、データを用いて、このような因果的な問いに答えるための方法論である。しかし、その実行には、変数間の因果構造を表す因果グラフをあらかじめ用意する必要がある。

ある。

AI for Scienceでは、データを基にAIが予測モデルを行い、その結果や背景知識を基に、人間とLLMが協働して仮説を生成し、それを実験や調査によって検証するという研究サイクルが期待されている。しかし、AIやLLMが生成する仮説は、必ずしも因果関係を反映したものとは限らず、相関に基づく仮説が含まれる可能性もある。そのため、「何が起るか」を予測するだけでなく、「何を変えれば結果がどう変わるか」という因果的な観点から仮説を評価・洗練することが重要となる。

このような課題を解決するための技術として注目されているのが、統計的因果探索である。統計的因果探索は、データから変数間の因果構造を推測し、因果推論に必要な因果グラフの構築を支援する技術である^{2),3),4)}。現実には、因果構造が事前に分かっているとは限らないため、データから因果構造を推定することが重要となる。さらに、LLMによる背景知識や文献情報の収集・整理と統計的因果探索を組み合わせることで、知識とデータの双方を活用した因果分析が期待されている⁵⁾。

また、推定した因果構造に基づいて因果デジタルツインを構築できれば、実際に介入する前に仮想的な介入やシミュレーションを行い、その結果を基に新たな仮説を生成できる。さらに、その仮説を実験や調査によって検証し、その結果を再びモデルへ反映することで、AIと人間が協働しながら因果に基づく科学研究を進める研究サイクルの実現へ繋げることができる。

統計的因果探索

前節で述べたように、統計的因果探索は、データから変数間の因果構造を推測する方法論である。統計的因果推論では、まず分析者が背景知識を基に、

* Shohei SHIMIZU



1977年4月生まれ
大阪大学大学院 基礎工学研究科 システム
創成専攻博士後期課程(2006年)
現在、大阪大学 産業科学研究所 教授
博士(工学)
TEL: 06-6879-8540
E-mail: shohei-shimizu@ds.sanken.osaka-u.ac.jp

変数間の因果関係を表す因果グラフを作成する。図1は、チョコレート消費量(チョコ)とノーベル賞受賞者数(賞)との関係を例にした因果グラフである。このように、因果グラフは、原因と結果の関係を矢印で表現したものである。この例では、GDPがチョコレート消費量とノーベル賞受賞者数の共通原因となり、両方に影響している可能性を表している。

次に、この因果グラフと数学的理論に基づいて、介入効果を正しく推定するためにどの変数を分析に含めればよいかを導き⁶⁾、その変数を用いて介入効果を推定する。この例の因果グラフが正しければ、GDPを観測し、その影響を考慮して分析することにより、チョコレート消費量がノーベル賞受賞者数に与える影響を適切に評価できる。このように、因果グラフは統計的因果推論の出発点となる。

しかし、現実には十分な背景知識が得られず、このような因果グラフを事前に作成できるとは限らない。特に、多数の変数が関係する問題では、どの変数がどの変数の原因となっているかを人手だけで整理することは容易ではない。

そこで、データを利用して変数間の因果構造を推測し、それを因果グラフとして表現する技術として発展してきたのが統計的因果探索である。因果探索は、因果推論そのものを置き換えるものではなく、因果推論に必要な因果グラフをデータから構築することで、因果推論を実施しやすくする役割を担う。

統計的因果探索にはさまざまなアプローチが提案されているが、大きく分けると、変数の条件付き独立性に基づくアプローチと構造方程式モデルに基づくアプローチの2つに分類できる。以下では、それぞれの代表的な考え方を紹介する。

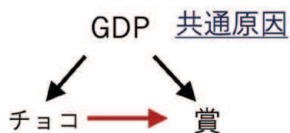


図1 GDPを共通原因として、チョコレート消費量とノーベル賞受賞者数との関係を表した因果グラフ。赤い矢印は分析対象となる因果効果を表す。

(1) 条件付き独立性に基づくアプローチ

条件付き独立性に基づく方法²⁾では、「仮定を満たす因果グラフ候補の中で、データに現れる変数間の

独立性・条件付き独立性と整合するものはどれか」を調べる。

例えば、図2では、最初に2つの変数 X と Y の因果グラフは非巡回であり、それらに共通原因は存在しないと仮定する。この仮定の下では、 X と Y の間に考えられる因果構造は、 X が Y の原因である場合、 Y が X の原因である場合、および両者が独立である場合の3つに限られる。もしデータから X と Y が独立であることが分かれば、 X と Y に関係がない図2(c)の構造を選択する。しかし、 X と Y の間に従属性が見られた場合には、図2(c)の構造を候補から外することができるが、図2(a)と図2(b)を変数間の従属性の有無により区別することはできない。図2(a)でも図2(b)でも、 X と Y は原因と結果の関係にあり、その因果関係により従属するからである。このように、条件付き独立性に基づく方法では、因果構造の候補を絞り込むことはできるものの、因果方向を一意に決定できない場合がある。

ただし、このアプローチの利点は、変数間の関係が線形か非線形か、あるいはデータがどのような分布に従うかについて強い仮定を必要としないことである。一方で、上記の例のように、条件付き独立性のみでは因果方向を一意に決定できない場合も多く、複数の因果構造候補が残ることがある。このような、データからは区別できない因果構造候補の集まりを同値類と呼ぶ。条件付き独立性に基づく方法では、この同値類までしか推定できない場合があり、そのようなとき因果方向は識別可能でないという。

3つの候補

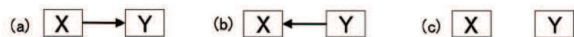


図2 仮定を満たす因果グラフ候補の中から、データと整合する因果グラフを選択する。

(2) 構造方程式モデルに基づくアプローチ

構造方程式モデルに基づく方法^{3),4)}では、各変数が他の変数からどのように生成されたかというデータ生成過程を構造方程式と呼ばれる方程式で表現する。

前節で述べたように、条件付き独立性に基づく方法では、データが持つ条件付き独立性だけを利用するため、因果方向を一意に決定できない場合がある。

そこで、変数間の関数関係やデータの分布についても仮定をおける場合は、その情報も利用して因果方向を推定しようという考え方が提案された⁷⁾。

例えば、LiNGAM法⁷⁾では、変数間の関係が線形であり、データが非ガウス分布に従うと仮定する。すると、図3(a)と図3(b)のようにXとYの間の因果方向が異なれば、それらのデータ分布は異なる。この違いを利用することにより因果方向を推測することができる。このように、条件付き独立性のみでは区別できなかった同値類に含まれる2変数間の因果方向も、関数形やデータ分布について仮定を置くことで利用できる情報が増え、因果方向を推定できる場合がある。

LiNGAM法は2006年に提案され、データに基づいて因果方向を識別できる可能性を示した。その後、この考え方は未観測共通原因^{8),9)}、時系列データ¹⁰⁾、非線形性¹¹⁾、離散変数と連続変数が混在する場合^{12),13)}などへ拡張され、現在では医学^{14),15)}、環境学¹⁶⁾、政策科学¹⁷⁾、金融¹⁸⁾、製造業など幅広い分野で利用され始めている。

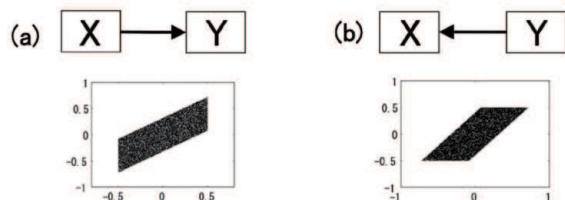


図3 因果方向が異なる因果グラフと対応するデータ分布

因果探索の適用

統計的因果探索は、様々な分野で異なる課題に対して利用されている。しかし、いずれの分野にも共通するデータ活用の目的は、単にデータから予測を行うことではなく、「何が原因となって結果が生じるのか」を明らかにし、介入に基づく意思決定を支援することである。以下では、医学、環境学、政策科学、金融を例に、各分野における課題、それに対して適用された因果探索アルゴリズム、そして得られた知見を紹介する。

(1) 医学

医学分野では、健康診断データや電子カルテなどの大規模なデータが蓄積されている。一方で、生活

習慣や検査項目は互いに複雑に影響し合っており、どの要因に介入すれば健康状態を改善できるかを明らかにすることは容易ではない。

Kotokuら¹⁴⁾は、DirectLiNGAMアルゴリズム¹⁹⁾を用いて、大阪府の大規模健康診断データからBMI、血圧、血糖値、脂質などの健康指標間の因果構造を推定した。その結果、BMIが血糖や肝機能へ影響を及ぼすことなど、生活習慣病に関連する因果構造が示唆された。さらに、Okudaら¹⁵⁾は、健康診断業務のワークフローを背景知識として利用しつつ、DirectLiNGAMアルゴリズムを全国規模の健康診断データへ適用し、保健指導がBMIや血圧などへ及ぼす長期的な因果効果を推定した。その結果を利用した介入シミュレーションへの展開が期待されている。

(2) 環境学

環境毒性学では、化学物質が生体へどのような影響を及ぼすかを整理したAdverse Outcome Pathway (AOP) が広く利用されている。しかし、多くのAOPは専門家の知識に基づいて構築されており、未知の経路を発見することや客観的な検証が容易ではない。

Hikiら¹⁶⁾は、DirectLiNGAMアルゴリズムを用いて毒性データからAOPの因果構造を推定し、さらに複数データセットを統合して因果探索を行うLiNGAMの拡張法²⁰⁾により複数の実験データを統合して解析した。その結果、既知のAOPと整合する因果構造を再現だけでなく、複数データを統合することで推定結果の安定性が向上する可能性を示した。これにより、統計的因果探索が専門家によるAOP構築を支援し、新たな毒性経路の仮説生成にも利用できる可能性が示された。

(3) 政策科学

政策立案では、限られた予算の中でどの施策を優先すべきかを判断するため、政策に関する変数間の因果関係を理解することが重要である。しかし、多数の変数が相互に影響しあうため、人手だけで因果構造を整理することは容易ではない。

高山ら¹⁷⁾は、DirectLiNGAMアルゴリズムおよび未観測共通原因を扱える条件付き独立性に基づく方法であるFCI法²⁾を用いて、博士課程進学者数、DC1採択者数、大学の研究環境などの因果構造を分

析した。その結果、研究大学では日本学術振興会特別研究員DC1などの経済的支援が博士課程進学を後押しする可能性や、大学の種類によって博士課程進学に至る因果メカニズムが異なる可能性が示唆された。このような分析は、エビデンスに基づく政策立案(EBPM)において、政策立案や政策評価を支援する新たな分析手法として期待されている。

(4) 金融

金融分野では、金融リテラシーが投資や老後資金準備を促進すると広く考えられてきた。しかし、多くの研究は相関分析に基づいており、金融リテラシーが実際に金融行動の原因となっているかは明らかではなかった。

Jiangら¹⁸⁾はFCI法²⁾を用いて、日本銀行の金融リテラシー調査データを分析した。その結果、金融リテラシーが投資や老後資金準備へ直接因果的に影響するという証拠は得られず、むしろ投資経験や老後資金準備が金融リテラシーの向上につながる可能性や、両者に共通する未観測要因の存在が示唆された。この結果は、相関分析だけでは見えなかった因果構造を明らかにし、金融教育や金融政策のあり方を再検討する重要な知見となる。

AIと因果探索の融合

近年、LLMは、科学論文や専門書など膨大な知識を学習しており、専門分野に関する背景知識を活用した推論が可能になってきた。一方、統計的因果探索はデータから因果構造を推定できるものの、実際のデータではサンプルサイズの不足やモデルの仮定と現実のずれなどにより、不自然な因果構造が推定されることがある。そこで注目されているのが、LLMの知識とデータに基づく統計的因果探索を組み合わせるアプローチである。

Takayamaら⁵⁾は、LLMと統計的因果探索を相互に補完させる「統計的因果プロンプティング(Statistical Causal Prompting: SCP)」を提案した。まず、統計的因果探索によってデータから因果構造を推定する。次に、その結果をLLMへ入力し、文献や背景知識に照らして各因果関係の妥当性を評価させる。最後に、その評価結果を背景知識として再び因果探索アルゴリズムへ反映し、より妥当な因果構造を推定する。すなわち、データから得られる統

計的情報と、LLMが持つ背景知識とを相互に利用しながら因果構造を洗練させることが特徴である。

ベンチマークデータおよび未公開の健康診断データを用いた実験では、LLMが生成した背景知識を利用することで、統計的因果探索単独の場合よりも適切と考えられる因果構造に近い結果が得られた。また、統計的因果探索の結果をLLMへのプロンプトに組み込むことで、LLM自身の因果判断の精度が向上する傾向が示された。さらに、未公開データに対しても有効であったことから、LLMが単に学習済みデータを記憶しているだけではなく、背景知識を利用して因果探索を支援できる可能性が示唆された。

一方で、LLMは誤った知識や不適切な推論を行う場合もあり、その出力をそのまま利用することは望ましくない。Takayamaらの論文では、このようなリスクを検討するとともに、統計的因果探索による検証や専門家による確認を組み合わせることで、より信頼性の高い因果分析を実現できる可能性を議論している。

自律因果探索

AIと因果探索の融合は、個々の分析手法の高度化にとどまらず、科学研究の進め方そのものを変える可能性を持っている。現在の因果分析では、背景知識の収集、変数の定義、分析対象とするデータの選択、因果仮説の構築など、多くの工程を研究者が手作業で行っている。しかし、対象が複雑化し、利用できるデータが急速に増加する中で、これらを人間だけで行うことはますます困難になっている。

そこで著者らは、人間とAIが協働して因果仮説を構築・検証する自律因果探索(Autonomous Causal Discovery)を構想している。自律因果探索では、LLMが文献等から背景知識を収集・整理し、統計的因果探索がデータから因果構造を推定する。さらに、両者を統合することで、背景知識とデータの双方を利用した因果仮説を自動的に生成することを目指す。

さらに、推定された因果構造に基づいて因果デジタルツインを構築できれば、実際に介入を行う前にシミュレーションによって介入効果を予測し、有望な仮説を効率的に絞り込めるだろう。

その後、実験や調査によって仮説を検証し、その

結果を再び因果モデルへ反映することで、仮説生成と検証を繰り返しながら、因果に関する知識を更新する研究サイクルを回す。

また、今後の重要な課題として、因果構造だけでなく変数定義そのものを探索対象とすることも挙げられる^{21),22)}。現実のデータでは、測定可能な変数はますます細分化される一方で、介入や意思決定に適した変数の粒度は必ずしも自明ではない。例えば、複数の測定項目を一つの概念としてまとめるべきか、逆に一つの変数をより細かく分割すべきかは、分析目的によって異なる。因果構造の探索と変数定義の探索を同時に行うことで、より解釈しやすく、介入に役立つ因果モデルの構築が期待される。

このような自律因果探索は、AIが研究者を置き換えることを目指すものではない。AIが大量の知識やデータを統合し、因果仮説の生成やシミュレーションを担い、人間がその妥当性を評価し、新たな研究課題を設定するという協働を通じて、医学、創薬、材料科学、環境学、社会科学など幅広い分野における科学的発見を加速するだろう。

おわりに

本稿では、AI時代における統計的因果探索の役割と最近の研究動向について概観した。現在のAIは予測を得意とする一方で、「何を変えれば結果がどう変わるか」という因果的な問いに答えることは容易ではない。そのため、データから因果構造を推定する統計的因果探索は、AIを意思決定や科学的発見へ活用するための重要な基盤技術となりつつある。

近年は、医学、環境学、政策科学、金融など幅広い分野で実応用が進むとともに、LLMとの融合や因果デジタルツイン、自律因果探索といった新たな研究も始まっている。

今後、AI for Scienceが発展するにつれて、因果探索はAIが生成する仮説を評価・洗練し、人間とAIが協働して科学的発見を進めるための基盤技術として、ますます重要になると考えられる。

参考文献

- 1) F. H. Messerli: Chocolate Consumption, Cognitive Function, and Nobel Laureates, *New England Journal of Medicine*, Vol.367, No. 16, pp. 1562-1564 (2012)
- 2) P. Spirtes, C. Glymour and R. Scheines: *Causation, Prediction, and Search*, 2nd ed., MIT Press (2000)
- 3) 清水 昌平: 統計的因果探索, 講談社 (2017)
- 4) S. Shimizu: *Statistical Causal Discovery: LiNGAM Approach*, Springer Briefs in Statistics, Springer (2022)
- 5) M. Takayama, T. Okuda, T. Pham, T. Ikenoue, S. Fukuma, S. Shimizu and A. Sannai: Integrating large language models in causal discovery: A statistical causal approach, *Transactions on Machine Learning Research* (2025)
- 6) J. Pearl: *Causality*, Cambridge University Press (2009)
- 7) S. Shimizu, P. O. Hoyer, A. Hyvärinen and A. Kerminen: A linear non-Gaussian acyclic model for causal discovery, *Journal of Machine Learning Research*, Vol.7, pp.2003-2030 (2006)
- 8) P. O. Hoyer, S. Shimizu, A. Kerminen, and M. Palviainen: Estimation of causal effects using linear non-gaussian causal models with hidden variables, *International Journal of Approximate Reasoning*, Vol.49 (2), pp.362-378 (2008)
- 9) S. Salehkaleybar, A. Ghassami, N. Kiyavash, K. Zhang: Learning linear non-Gaussian causal models in the presence of latent variables, *Journal of Machine Learning Research*, Vol.21, pp.1-24 (2020)
- 10) A. Hyvärinen, K. Zhang, S. Shimizu, and P. O. Hoyer: Estimation of a structural vector autoregression model using non-Gaussianity, *Journal of Machine Learning Research*, Vol.11, pp. 1709-1731 (2010)
- 11) P. O. Hoyer, D. Janzing, J. Mooij, J. Peters and B. Schölkopf: Nonlinear causal discovery with additive noise models, In *Advances in Neural Information Processing Systems 21 (NIPS2008)*, pp. 689-696 (2009)
- 12) W. Wei, L. Feng and C. Liu: Mixed Causal Structure Discovery with Application to Prescriptive Pricing, *Proceedings of the Twenty-Seventh International Joint Conference*

- on *Artificial Intelligence (IJCAI2018)*, pp. 5126-5134 (2018)
- 13) Y. Zeng, S. Shimizu, H. Matsui, F. Sun: Causal discovery for linear mixed data, In *Proceedings of the First Conference on Causal Learning and Reasoning (CLearR2022)*, pp. 994-1009 (2022)
 - 14) J. Kotoku, A. Oyama, K. Kitazumi, H. Toki, A. Haga, R. Yamamoto, M. Shinzawa, M. Yamakawa, S. Fukui, K. Yamamoto, T. Moriyama: Causal relations of health indices inferred statistically using the DirectLiNGAM algorithm from big data of Osaka prefecture health checkup, *PLoS ONE*, Vol.15 (12), e0243229 (2020)
 - 15) T. Okuda, S. Shimizu, T. Pham, T. Ikenoue, S. Fukuma: Operationalizing longitudinal causal discovery under real-world workflow constraints, *arXiv:2602.23800* (2026)
 - 16) K. Hiki, T. Pham, M. Yamamoto, T. I. Hayashi, S. Shimizu: Statistical causal discovery in developing and refining adverse outcome pathway (AOP), *Environmental Toxicology and Chemistry*, *vgag067* (2026)
 - 17) 高山正行, 清水昌平: 科学技術・イノベーション政策の立案・評価への統計的因果探索の応用, *研究技術計画*, 40 (3-4), pp.341-355 (2025)
 - 18) Y. Jiang and S. Shimizu: Financial literacy may not directly drive investment participation or retirement planning in Japan, *Frontiers in Behavioral Economics*, 4, 1725333 (2026)
 - 19) S. Shimizu, T. Inazumi, Y. Sogawa, A. Hyvärinen, Y. Kawahara, T. Washio, P. O. Hoyer and K. Bollen: DirectLiNGAM: A direct method for learning a linear non-Gaussian structural equation model, *Journal of Machine Learning Research*, Vol.12, pp.1225-1248 (2011)
 - 20) S. Shimizu: Joint estimation of linear non-Gaussian acyclic models, *Neurocomputing*, Vol.81, pp.104-107 (2012)
 - 21) K. Chalupka, F. Eberhardt, and P. Perona: Causal feature learning: an overview, *Behaviormetrika*, Vol.44 (1), pp.137-164 (2017)
 - 22) G. Kikuchi and S. Shimizu: Structure Learning for Groups of Variables in Nonlinear Time-Series Data with Location-Scale Noise, In *Proceedings of the Causal Analysis Workshop 2023 (CAWS2023)*, PMLF, Vol.223, pp. 20-39 (2023)

