

< 修士論文 >

マーケティング・リサーチにおける
統計的因果探索を用いた因果仮説構築に関する研究

滋賀大学大学院
データサイエンス研究科
データサイエンス専攻

修了年度 : 2020 年度
学籍番号 : 6019106
氏 名 : 小西 伶児
指導教員 : 清水 昌平
提出年月日 : 2021 年 1 月 19 日

目次

1	序論	3
1.1	研究背景	3
1.2	既存手法・研究	4
1.3	研究目的	7
1.4	本論文の構成	8
2	既存モデル	9
2.1	数学的準備	9
2.2	Additive Noise Model の識別可能条件	11
2.3	2次分散関数 (QVF) DAG モデル	13
3	QVF-DAG モデルの識別可能性	15
4	提案モデル	20
4.1	提案モデル	20
4.2	提案モデルの識別可能性	22
5	推定アルゴリズム	27
6	数値実験	30
6.1	設定	30
6.2	DAG の推定精度	31
6.3	閾値による因果順序の推定精度の影響	35
7	結論	37
7.1	本研究の成果	37
7.2	マーケティング・リサーチにおける統計的因果探索の応用法	38
7.3	今後の課題	39
	謝辞	40
	参考文献	43

1 序論

1.1 研究背景

企業は自社の商品やサービスを顧客に提供するために、様々なマーケティング活動を行っている。近年では消費者の嗜好が多様化したり、新型コロナウイルス感染症が流行したりするなど、企業活動を取り囲む環境が日々大きく変化しており、企業はその環境変化に適応する必要がある。それ故、商品・サービスの開発や消費者とのコミュニケーションなどのマーケティング活動を適切に実行するためには、消費者の行動について深く理解することがより一層重要となっている。

アメリカ・マーケティング協会 (American Marketing Association, AMA) によると、マーケティングの定義は「顧客、クライアント、パートナー、社会のための価値の創造、伝達、提供、交換という全体の活動」であり、マーケティング・リサーチは「消費者、顧客、公衆とマーケターが情報を介してつながる機能」であると定義している [1]。また、その具体的な業務として、「必要な情報を特定し、情報収集のための方法を設計し、データ収集プロセスを管理・実施し、結果を分析し、分析結果と結果から得られる示唆を伝えること」としている。つまり、上記の定義を合わせて考えると、マーケティング・リサーチの目的は「マーケティング課題の発見や施策の実行に必要なデータを適切に収集し、得られたデータを分析することで、企業のマーケティング活動を支援すること」と理解することができる。

企業のマーケティング活動は、主に以下の4つのフェーズに分類することが可能で、商品・サービスのカテゴリにも依存するが、約1～数年程度の期間で繰り返されることが一般的である。この繰り返しのことをマーケティング・サイクルと呼ぶ。

- 市場機会の発見
- コンセプト開発
- コミュニケーション内容・販売施策の策定
- 施策後の効果検証

マーケティング・リサーチは、各フェーズにおけるマーケティング担当者に関心事に対して、適切な示唆を与えることが求められている。「市場機会の発見」では、「市場にある商品で満たされていないニーズは何か？」や「この商品を購入している人はどのような特徴があるのか？」といったことがマーケティング担当者に関心事となり、未充足ニーズの探索や、消費者セグメントの整理などがリサーチの役割となる。次に「コンセプト開発」では、「どのような価値を提供すると売れるのか？」や「ターゲットとなる消費者の規模はどのくらいか？」といったことが関心事となり、コンセプトの受容性確認や、消費者セグメントの規模感把握などがリサーチに求められる。また「コミュニケーション

ン内容・販売施策の策定」では、「商品の長をどのように伝えると購買に結びつくのか？」や「商品パッケージや価格はどのようにすればよいか？」といったことが主な関心事となり、広告内容の精査や、商品の改善点抽出などが行われる。最後に「施策後の効果検証」においては、市場浸透度の確認や、広告などの投資に対する売上の費用対効果などが行われる。各フェーズでのマーケティング担当者の関心事を俯瞰すると、多くは「どのようなマーケティング活動(介入)を行うと、消費者がどのように反応するか(結果)」と捉えることができる。つまり、マーケティング・リサーチでは「マーケティング活動と消費者行動の因果関係」を明らかにすることが求められていると言える。

「マーケティング」の他に「ブランディング」も類似の意味を持つ言葉として頻りに用いられるが、それぞれの言葉の意味には異なる部分が存在する。音部(2019)[33]によると、マーケティングは属性の順位を変換して市場を創造することを目指し、結果的にニーズを作り出すことにつながっており、ブランディングはブランドの意味の確立を目指し、結果的にベネフィットを作り出すことにつながっている。つまり、「マーケティング」は消費者行動の因果構造そのものを変化させることによって、自社の商品が有利に購買されるような状況を作り出す活動であることに対し、「ブランディング」は現在の消費者行動の因果構造はそのままに、自社の商品に対する消費者の認識を変化させることによって、他社の商品ではなく自社の商品を購入するように行動を変化させる活動であると捉えることができる。

このように、企業は自社の商品やサービスを顧客に効率的に提供するために、マーケティング・リサーチを通じて消費者に関する情報を収集・分析し、消費者行動の因果関係について仮説を立てたり解釈を行ったりしている。そのため、マーケティング・リサーチにおいて、消費者行動の因果関係に関する情報を得る手段は、非常に重要な役割を担っている。

1.2 既存手法・研究

因果関係に関する考察は、科学の基本的な問いとして因果推論という文脈で研究されてきた。近年では計算機科学や統計科学の発展により、経済学やマーケティングの分野でも注目されている[19]。因果推論は大まかには、(i) 因果構造の同定、と(ii) 因果構造が既知である下での因果関係の大きさの推定、という2つの問題に分類できる。(i) 因果構造の同定は、非常に困難な問題であるとされているが、統計的因果探索と呼ばれる分野で研究されており、いくつかの仮定の下で識別可能なモデルが提案されている[30]。(ii) 因果構造が既知である下での因果関係の大きさの推定は、ランダム化比較試験を中心とした実験研究と、特に実験を行わない観察研究の双方において研究されている。

本節では、マーケティング・リサーチにおいて消費者行動の因果関係に関する情報を得る方法として従来より広く用いられてきた一般的な既存手法について述べた後、統計的因果探索に関する近年の研究について俯瞰する。

1.2.1 マーケティング・リサーチにおける既存手法

マーケティング・リサーチは大きく定性調査と定量調査に分類され、それぞれにおいて消費者行動の因果関係に関する情報の分析が行われている。

定性調査は一般的に、消費者の内部にある意見や態度を理解することで、マーケティング課題の詳細な定義、仮説の設定、定量調査における調査項目の優先順位の決定、消費者独自の考え方や表現の理解、企業のマーケティング担当者の不足している知識の吸収、定量調査における最重要な項目に関する示唆の獲得などの目的で実施される [28]。主に深層面接法 (デプス・インタビュー) や集団面接法 (グループ・インタビュー) といった、インタビュアーが回答者との対話を通じて質問をし回答を得る方法が一般的である。そのため、調査対象者が日常生活であまり気に留めていないことや、誰かに問いかけられて初めて気づくことなどを収集することができ [28]、マーケティング担当者の周辺知識では想定しきれなかった因果関係を発見できる可能性がある。一方で、定性調査は定量調査と比べて一般的に時間や費用が多くかかることや、定量的な評価ができず、得られた意見や行動の一般性・代表性に関する議論ができないことなどのデメリットがある。

定量調査では、主にアンケート調査に代表される意識データや、(ID 付き)POS データ、Web ページ等へのアクセスログなどの行動データが用いられる。定量データを用いて因果関係に関する情報を得る一般的な方法は、ランダム化比較試験を中心とした実験研究である。しかし、実験を行うためにはマーケティング施策を実際に行ってみたりする必要があるため、非常に多くのコストがかかる場合や実験を行うことが難しい場合が多い。そのため、観察データによって消費者行動の因果関係を評価することが一般的である。観察データによって因果関係を評価する手法としては、一般化線形モデル (generalized linear model, GLM) や構造方程式モデル (structural equation model, SEM) が用いられることが多い [26][31]。GLM では、目的変数と説明変数の関係を定式化し、各係数を目的変数に対する説明変数の因果関係の大きさとして解釈を行うことが慣例となっている。しかし、宮川 (2004)[27] で述べられている通り、GLM は説明変数を与えたときの目的変数の条件付き確率分布に関するモデルである。つまり、GLM による分析の目的は、説明変数を観測したときの目的変数の予測であり、説明変数に外的操作を行ったときの目的変数の因果効果の定量化ではない。そのため、推定されたパラメータに対して因果的な解釈を行うことは誤りとなる可能性がある。一方で、SEM はデータの生成過程を記述した統計的因果モデルであり、その係数は単なる相関関係の尺度ではなく、因果的な解釈を行うことができる [27]。ただし、SEM は分析者の事前知識を積極的に利用することで因果構造の仮説を有向グラフで表現した上で、その構造に対してモデリングを行う手法である。つまり、SEM は上述の (ii) 因果構造が既知である下で因果関係の大きさの推定を行う手法であると言える。そのため、分析者側の事前知識の質や量が因果構造の仮説構築に影響し、妥当だと思われるモデルを得るまでに長い時間を要したりしているという現状がある。また、近年の社会の発展により消

費者の行動は複雑化しており、そもそも因果構造に関する仮説を構築すること自体が難しい場合も少なくない。

1.2.2 統計的因果探索

統計的因果探索とは、因果構造が未知である際に、どのような条件の下で観測データから因果構造を復元することが可能であるかを明らかにし、観測データがその条件を満たしているという仮定の下で、因果構造を推定する手法を研究する学問分野である。マーケティング・サイエンスを含む多くの実質科学の分野では、様々な現象の因果関係に関する分析が行われているが、因果仮説を1つに絞りきれない場合や、その分野の背景理論が不足しており因果仮説を立てられない場合がある。そのような場合に統計的因果探索が活用できることが期待されている [30]。

統計的因果探索の分野において、因果関係を復元するための手がかりの1つは、因果構造の特徴を示す統計的関連性 (条件付き独立性) のパターンである [12]。例えば、2つの公平なサイコロを振った時に得られる結果をそれぞれ A, B とし、2つのサイコロの出た目の合計を C とする。この時、 A と C 、 B と C は従属であるが、 A と B は独立であるという3つの統計的関連性が得られる。しかし、例えば $C = 6$ という状況の下では A と B は従属である。なぜなら、 $C = 6$ という関係を満たすためには、 A を大きくすると B を小さくする必要があるためである。このことを直感的にグラフに表現すると、 $A \rightarrow C \leftarrow B$ のように「 C の原因が A と B である」というグラフになる。実際、 $C = A + B$ であるため、 A と B は C の原因である。つまり、統計的関連性を用いることで、因果構造を復元することが可能な場合があると言える。しかし、因果構造が異なる場合でも観測データから同じ条件付き独立関係が得られる場合も多い。例えば、 $X \rightarrow Y \rightarrow Z$ 、 $X \leftarrow Y \rightarrow Z$ 、 $X \leftarrow Y \leftarrow Z$ という3つの異なる因果構造から生成された観測データは、全て「 Y で条件付けると X と Z が独立である ($X \perp\!\!\!\perp Z | Y$)」という条件付き独立関係のみが得られる。つまり、条件付き独立性を用いるだけでは3つの因果構造を識別することができない。この条件付き独立性から区別できない因果構造のことをマルコフ同値類 (観察的同値類) と言う [12]。そのため、一般に観察データから因果構造を一意に復元することは非常に困難であると言える。

そこで、データ生成過程に関する様々な仮定をおくことで、因果構造を一意に復元できる識別可能な因果モデルが複数示されている。観測変数が全て連続である場合は、変数間の関係性を表す関数が線形であり、外生変数の分布が非正規分布であることを仮定した線形非ガウス非巡回有向モデル (linear non-Gaussian acyclic model, LiNGAM)[16]、関数形が非線形であることを仮定した加法誤差モデル (additive noise model, ANM)[5] やポスト非線形因果モデル (post-nonlinear causal model, PNL)[22]、関数形が線形であり誤差変数の分散が全て等しい、または全て既知である正規線形構造方程式モデル [13] などが挙げられる。

次に、観測変数が全て離散である場合は、各変数の条件付き分布がポアソン分布に従うことを仮定

した Poisson DAG モデル [10]、関数形にブール関数などの離散変数を扱う関数を仮定した ANM[14] などが挙げられる。

最後に、連続変数と離散変数が混在する場合の研究について述べる。各変数の条件付き分布の分散が期待値の 2 次式で表現できるという 2 次分散関数 (quadratic variance function, QVF) DAG モデル [11] がある。これは Poisson DAG モデル [10] を拡張することによって識別可能性が示されている。分散が期待値の 2 次式で表現できる分布には、ポアソン分布や二項分布、幾何分布などの離散確率分布だけでなく、指数分布やガンマ分布などの連続確率分布も含まれており、連続変数と離散変数が混在する場合でも適用できる手法である。ただし、各変数の条件付き分布については事前に仮定をおく必要がある。また、離散変数が 2 値 (0,1) であることを仮定したモデルには、混合因果モデル (mixed causal model)[20] やハイブリッド因果モデル (hybrid causal model)[7] などがある。ただし、これらのモデルは一般的な p 変数における識別可能性は示されていない。

1.3 研究目的

本研究の目的は、統計的因果探索の手法を応用し、マーケティング・リサーチにおいて消費者行動の因果構造に関する仮説を構築する手法の開発を行うことである。

マーケティング・リサーチで扱う定量データは、先述のようにアンケート調査データや、購買履歴データ、アクセスログなどが挙げられる。アンケート調査データには、聴取内容に応じて様々な尺度のデータが含まれており、離散変数と連続変数の両方が混在している。例えば、「商品 A の認知」については「知っている/知らない」といった 2 値で扱われることが多い。一方で、「商品 A の購入意向 (買いたい気持ち)」については「買いたい/やや買いたい/どちらとも言えない/あまり買いたくない/買いたくない」といった 5 段階尺度で聴取されることが多い。このような 5 段階などの尺度で聴取されたデータは、一般的に連続値として扱われる。また、ID 付き POS データやアクセスログはトランザクションデータであるため、マーケティング・リサーチで分析を行う際は、商品や Web ページ、ユーザー単位で集計を行う。例えば、「ユーザー X は 1 年間に商品 A を 10 個、商品 B を 5 個買った」などと集計されたデータで分析を行う。このような購買個数などのデータは 0 以上の整数を取るカウント (計数) データであるため、連続値として扱うことはできず、ポアソン分布などの離散確率分布を用いて分析する必要がある。

しかし、既存の統計的因果探索の手法は、連続変数か離散変数のどちらか一方のみに限定されたモデルが中心である。また、連続変数と離散変数が混在するモデルも一部提案されているが、扱える確率分布が限定的であったり、離散変数が 2 値 (0,1) のみであったりする。そのため、従来手法ではマーケティング・リサーチで扱う様々なデータにおける因果構造の探索が難しいという課題が残っている。そこで本論文では、マーケティング・リサーチの分野で活用することを念頭に、離散変数と連

連続変数の両方が混在する構造的因果モデルを提案し、その因果構造の識別可能性について議論する。本研究では、ポアソン分布などのカウントデータを扱うことができる QVF DAG モデル [11] と連続変数を扱う ANM[8] を組み合わせることで、マーケティング・リサーチで扱う定量データにおける因果構造の推定を行う。

1.4 本論文の構成

まず 2 章では、本研究の基礎となる統計的因果探索の従来研究として、連続変数を扱う ANM と離散変数を扱う QVF DAG モデルについて述べる。3 章では、Park and Park(2019)[9] のアイデアを用いて QVF DAG モデルの識別可能性を証明する。4 章では、ANM と QVF DAG モデルを用いることによって、連続変数と離散変数が混在する構造的因果モデルを提案し、その識別可能性を証明する。5 章では、4 章で提案したモデルを推定する手法について述べる。6 章では、数値実験によって、予め設定した因果構造に基づいてデータを発生させ、その因果構造の推定を行う。数値実験の結果、従来手法と比較して提案手法が有効であることを示す。最後に 7 章では、本論文のまとめと今後の課題について述べる。

2 既存モデル

本章ではまず、本論文で用いる数学記号を導入し、非巡回有向グラフ (directed acyclic graph, DAG) モデルとその識別可能性を定義する。その後、本論文の提案モデルを構成する2つの既存モデルについて概説する。既存モデルの1つ目は、連続変数を扱う DAG モデルとして広く用いられている加法誤差モデル (additive noise model, ANM) [16] [5] [13] [15] [8] である。2つ目は、主に離散変数を扱う2次分散関数 (quadratic variance function, QVF) DAG モデル [11] である。

2.1 数学的準備

グラフは頂点 (node) の集合 $V = \{1, 2, \dots, p\}$ と、頂点同士をつなぐ辺 (edge) の集合 $E \subset V \times V$ によって、 $G = (V, E)$ と表現される。グラフの辺は有向辺 (矢線) と無向辺 (双方向矢線) に分けることができ、2つの頂点 $j, k \in V$ において、 $(j, k) \in E$ かつ $(k, j) \notin E$ のとき、 j から k への矢線があるという。これを $j \rightarrow k$ と表現することもある。一方で、 $(j, k) \in E$ かつ $(k, j) \in E$ のとき、 j と k の間に双方向矢線があるという。すべての辺が有向辺であるグラフを有向グラフ (directed graph) という。本論文では、特に断りのない限り、頂点 j から k への矢線がある場合、 j が k の原因であるといった因果関係があることを表す。つまり、本論文で扱うグラフにおける矢線の有無は因果関係の有無を表しており、矢線の始点が原因で、矢線の終点が結果である。このような定性的な因果関係を表すグラフを因果グラフ (causal graph) という。また、グラフ G からすべての矢印を取り除くことによって得られる無向グラフを G のスケルトンという。

頂点の系列 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n+1}$ について、すべての $i = 1, 2, \dots, n$ で、 $\alpha_i \rightarrow \alpha_{i+1}$ 、または $\alpha_{i+1} \rightarrow \alpha_i$ となる矢線がある時、長さ n の道 (path) という。特に、すべての $i = 1, 2, \dots, n$ で、 $\alpha_i \rightarrow \alpha_{i+1}$ となる矢線がある時、長さ n の有向道 (directed path) という。また、長さ n の有向道で、 $\alpha_1 = \alpha_{n+1}$ となるものを巡回閉路 (cycle) という。一方で、巡回閉路のない有向グラフは非巡回的 (acyclic) であるという。本論文では、非巡回有向グラフ (DAG) のみを扱う。

頂点 j から k への矢線がある時、 j を k の親 (parent) といい、 k を j の子 (child) という。また、 $(j, k) \in E$ であるすべての頂点 j からなる集合を $Pa(k)$ と表記する。頂点 j から k への有向道がある時、 j を k の祖先 (ancestor)、 k を j の子孫 (descendant) という。頂点 k のすべての祖先からなる集合を $An(k)$ 、すべての子孫からなる集合を $De(k)$ と表記する。また、すべての頂点から k と k の子孫を除いたものを、 k の非子孫 (non-descendant) といい、その集合を $Nd(k) \equiv V \setminus (\{k\} \cup De(k))$ と表記する。さらに、因果順序 (causal ordering) について定義する。因果順序とは、その順序に従って変数を並び替えると、すべての矢線 $(j, k) \in E$ について、 k が j の原因になることがない順序のことであり、 $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_p)$ と表記する。DAG で表現される因果グラフには、このような順序

が(一意とは限らないが)存在するという特徴がある。つまり、因果グラフを同定することは、因果順序を同定することとスケルトンを同定することという2つの工程に分解することができる。

DAG G における頂点上の標本空間 \mathcal{X}_V の確率分布に従う確率変数の集合 $X \equiv (X_j)_{j \in V}$ について考える。ここで、確率変数ベクトル X は、同時確率密度関数 $f_G(X) = f_G(X_1, X_2, \dots, X_p)$ で与えられていると仮定する。 V の任意の部分集合 S について、 $X_S \equiv \{X_j : j \in S \subset V\}$ と $\mathcal{X}_S \equiv \times_{j \in S} \mathcal{X}_j$ を定義する。ただし、 \mathcal{X}_j は X_j の確率空間である。また、任意の頂点 $j \in V$ について、確率変数ベクトル X_S を与えたときの変数 X_j の条件付き確率を $f_j(X_j|X_S)$ と表記する。すると、DAG G によるモデルは因果マルコフ条件により以下のように因数分解することができる [12]。

$$f_G(X) = f_G(X_1, X_2, \dots, X_p) = \prod_{j=1}^p f_j(X_j|X_{Pa(j)}) \quad (1)$$

ここで、 $f_j(X_j|X_{Pa(j)})$ は、 X_j の親変数 $X_{Pa(j)} \equiv \{X_k : k \in Pa(j) \subset V\}$ を与えた条件付き確率である。

また、本論文で扱う因果モデルには、因果極小性 (causal minimality) を仮定する。因果極小性とは、DAG G で表現される因果構造に従って生成された分布 $f_G(X)$ は、 G の部分グラフ (subgraph) *¹においては因果マルコフ条件を満たさないことを言う [21]。つまり、全ての頂点 $j \in V$ とその親の1つ $k \in Pa(j)$ について、以下が成り立つ。

$$\forall Pa(j) \setminus \{k\} \subset S \subset Nd(j) \setminus \{k\}, \quad X_j \not\perp X_k | X_S \quad (2)$$

因果極小性を仮定することによって、「変数 X と Y は因果グラフにおいて親子関係があるにもかかわらず、 X と Y の分布が独立である」といった特殊な場合を排除することができる。

最後に、本論文では観察データから因果グラフを同定するという問題を扱うため、因果グラフの識別可能性について定義する。識別可能性を直感的に説明すると、条件付き確率分布 $f_j(X_j|X_{Pa(j)})$ に対してある仮定を置くと、同時確率密度関数 $f_G(X)$ を与えた DAG G の構造を一意に決定付けることができるということである。

識別可能性について詳細に定義するために、すべての $j \in V$ に関する条件付き確率分布 $f_j(X_j|X_{Pa(j)})$ の集合を \mathcal{P} と表記する。また、DAG $G = (V, E)$ について、DAG G に関する同時分布のクラスと、分布 \mathcal{P} のクラスを以下で定義する。

$$\mathcal{F}(G; \mathcal{P}) \equiv \{f_G(X) = \prod_{j \in V} f_j(X_j|X_{Pa(j)}); \text{ここで、} f_j(X_j|X_{Pa(j)}) \in \mathcal{P} \quad \forall j \in V\} \quad (3)$$

続いて、 p 個の変数からなる DAG の集合を \mathcal{G}_p と表記する。そこで、DAG \mathcal{G}_p の空間上の確率分布のクラス \mathcal{P} における識別可能性を以下のように定義する。

*¹ 2つの異なる DAG G と G' が与えられたとき、 G と G' の頂点が同じであり、 G' における矢線の集合が G の矢線の集合の部分集合であるならば、 G' を G の部分グラフと言う [21]。

定義 2.1 (識別可能性). 条件付き分布のクラス \mathcal{P} が \mathcal{G}_p において識別可能であるとは、 $G, G' \in \mathcal{G}_p$ において $G \neq G'$ であるならば、 $f_G = f_{G'}$ を満たすような $f_G \in \mathcal{F}(G; \mathcal{P})$ と $f_{G'} \in \mathcal{F}(G'; \mathcal{P})$ が存在しないことである。

2.2 Additive Noise Model の識別可能条件

本節では、連続変数データを扱う DAG モデルとして、広く用いられている ANM [16] [5] [13] [15] [8] とその識別可能性について概説する。

ANM は、観測変数の同時分布が、以下の構造方程式と誤差から生成される DAG モデルである。

$$X_j = f_j(X_{Pa(j)}) + e_j \quad (4)$$

f_j は任意の関数であり、 e_j は平均 0、分散 σ_j^2 である互いに独立な連続確率変数である。ここで、 e_j の分布の形は任意である。つまり正規分布など特定の分布であるとは限らない。

また、ANM の特殊形として、 f_j が全て線形な関数で記述されるモデルを線形構造方程式モデル (structural equation model, SEM) という。つまり、観測変数の同時分布が以下の線形方程式で定義される DAG モデルである。

$$X_j = \theta_j + \sum_{k \in Pa(j)} \theta_{jk} X_k + e_j \quad (5)$$

ここで、それぞれの係数 θ_{jk} は、DAG G における頂点 k から頂点 j の直接的な因果効果の大きさを表す。つまり、頂点 k が頂点 j の親であるときは $\theta_{jk} \neq 0$ であり、それ以外のときは $\theta_{jk} = 0$ である。

これらの DAG モデルは、関数形や誤差変数の分布についていくつかの仮定を満たすと識別可能であることが証明されている。識別可能性が示されている代表的な ANM を以下に簡単にまとめる。

- 全ての関数 f_j が非線形である非線形 ANM[5]
- 全ての関数 f_j が線形であり、観測変数 X_j または誤差変数 e_j のいずれかの確率分布が、非正規分布に従う LiNGAM[16]
- 全ての関数 f_j が線形であり、誤差変数 e_j の分散が全て等しいまたは全て既知である正規線形構造方程式モデル [13]

このように関数形や誤差分布に関する仮定を置くことで、様々な ANM の識別可能性が示されてきた。一方で、全ての関数形が非線形であることや、誤差変数が非正規分布に従うこと、誤差変数の分散が全て等しいことなどの仮定はあまり現実的でないといった批判もある。そこで、誤差変数の分散

の大きさだけでなく、誤差変数に対する親変数の影響の大きさも加味することで、関数形や誤差変数の分布の制約を受けない以下のような識別可能条件が示されている [8]。

定理 2.2 (ANM の識別可能条件 [8]). 同時確率 $f(X)$ が DAG G の ANM(4) から生成されているとする。このとき、任意の頂点 $j = \pi_m \in V, k \in De(j), \ell \in An(j)$ に関して、以下の 2 つの条件のいずれかが満たされているならば、DAG G は一意に識別可能である。ここで π は DAG G における因果順序を表す。

$$(A) \quad \sigma_j^2 < \sigma_k^2 + E(\text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)})|X_{\pi_1}, \dots, X_{\pi_{m-1}}))$$

$$(B) \quad \sigma_j^2 > \sigma_\ell^2 - E(\text{Var}(E(X_\ell|X_{\pi_1}, \dots, X_{\pi_m} \setminus X_\ell)|X_{Pa(\ell)}))$$

条件 (A) は、頂点 j の条件付き分散が、非子孫 $Nd(j)$ で条件づけたときの $De(j)$ の条件付き分散より小さいときに、DAG G が識別可能であることを表現している。一方、条件 (B) は、頂点 j の条件付き分散が、祖先 $An(j)$ の親と子孫の和集合で条件づけたときの $An(j)$ の条件付き分散より大きいときに、DAG G が識別可能であることを表現している。また、条件 (A)(B) より、各頂点の誤差変数の分散が全て同じ、または因果順序に従って単調増加である時、DAG G は一意に識別可能であると言える。

ここでは条件 (A) について直感的な理解を得るために、図 1 の DAG で表される 2 変数の正規線形構造方程式モデルを用いて、その識別可能性を証明する。

- $G_1: X_1 = e_1, \quad X_2 = \theta_1 X_1 + e_2$
- $G_2: X_1 = \theta_2 X_2 + e_1, \quad X_2 = e_2$
- ただし、全ての $j \in \{1, 2\}$ について、 $e_j \sim N(0, \sigma_j^2)$ である。



図 1 2 変数の正規線形構造方程式モデル

G_1 において、もし誤差変数の分散について条件 (A) $\sigma_1^2 < \sigma_2^2 + \theta_1^2 \sigma_1^2$ が成立しているならば、全分散の公式より X_1 と X_2 の分散について以下の関係が導かれる。

$$\begin{aligned} \text{Var}(X_2) &= E(\text{Var}(X_2|X_1)) + \text{Var}(E(X_2|X_1)) \\ &= \sigma_2^2 + \theta_1^2 \sigma_1^2 \\ &> \sigma_1^2 \\ &= \text{Var}(X_1) \end{aligned}$$

この関係について直感的に述べると、 X_1 における確率変動は e_1 のみによって起こるが、 X_2 における確率変動は X_1 と e_2 によって起こるため、 X_2 の不確実性 (分散) のほうが X_1 の不確実性より大きくなると理解することができる。よって、条件 (A) $\sigma_1^2 < \sigma_2^2 + \theta_1^2 \sigma_1^2$ が成立しているならば、 G_1 における真の因果順序が $\pi = (1, 2)$ という順であることを観測変数より特定することができる。 G_2 についても同様に因果順序を特定することができる。

さらに誤差変数の分散に関する条件 (A) $\sigma_1^2 < \sigma_2^2 + \theta_1^2 \sigma_1^2$ の性質について述べる。まず条件 (A) は、 $\sigma_2^2 / \sigma_1^2 > (1 - \theta_1^2)$ と変形できる。つまり、条件 (A) は X_1, X_2 のデータ生成過程における誤差変数の分散の比に関する条件である。ここで、係数 θ_1 と誤差変数の分散の比 σ_2^2 / σ_1^2 の関係を図示すると図 2 のようになる。 $\sigma_j^2 > 0$ のため、常に $\sigma_2^2 / \sigma_1^2 > 0$ が成り立つ。そのため $\theta_1 \leq -1, 1 \leq \theta_1$ である場合は、常に識別可能である。また、 $\theta_1 \neq 0$ のため、 $\sigma_2^2 \geq \sigma_1^2$ である場合は、常に識別可能である。

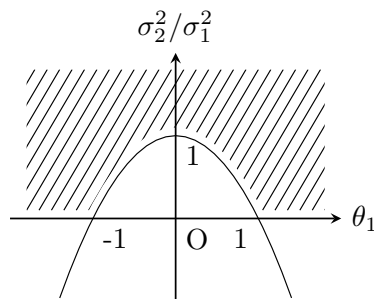


図 2 2 変数の正規線形構造方程式モデルが条件 (A) を満たす領域 (境界は含まない)

2.3 2 次分散関数 (QVF) DAG モデル

本節では、主に離散変数を扱う DAG モデルとして、Park and Raskutti(2017)[11] によって提案された 2 次分散関数 (QVF) DAG モデルについて概説する。QVF DAG モデルは、各頂点の親による条件付き分布 \mathcal{P} の分散が、期待値の 2 次式で与えられているというモデルであり、以下のように定義される。

定義 2.3 (QVF DAG モデル [11]). 2 次分散関数 (quadratic variance function, QVF) DAG モデルは、各頂点の親による条件付き確率分布が、以下で表現される 2 次分散関数性 (quadratic variance function property) を満たすような DAG モデルである。

すべての $j \in V$ について、以下を満たすような $\beta_{j0}, \beta_{j1} \in \mathbb{R}$ が存在する。

$$\text{Var}(X_j | X_{Pa(j)}) = \beta_{j0} E(X_j | X_{Pa(j)}) + \beta_{j1} E(X_j | X_{Pa(j)})^2 \quad (6)$$

2 次分散関数性を満たす確率分布のクラスには、ポアソン分布、二項分布、負の二項分布、ガンマ分布などが含まれることが知られている。これらの確率分布における β_0, β_1 を表 1 に示す。

表 1 2次分散関数性を満たす確率分布における β_0, β_1 の例

確率分布	\mathcal{P}	β_0	β_1
ポアソン分布	Poisson(λ)	1	0
二項分布	Binomial(N, p)	1	$-\frac{1}{N}$
負の二項分布	NegativeBinomial(R, p)	1	$\frac{1}{R}$
ガンマ分布	Gamma(α, β)	0	$\frac{1}{\alpha}$

また、QVF DAG モデルの各頂点の分布はその頂点の親変数からの因果的な影響を受けており、各頂点の条件付き期待値は、任意の単調で微分可能なリンク関数 $g_j: \mathcal{X}_{Pa(j)} \rightarrow \mathbb{R}^+$ によって、 $E(X_j|X_{Pa(j)}) = g_j(X_{Pa(j)})$ で表現される。本論文の後半では、各頂点間の関係について線形性を仮定するため、リンク関数 g_j がパラメータに関して線形であることを仮定した QVF 構造方程式モデル (structural equation model, SEM) を導入する。

$$g_j(X_{Pa(j)}) = g_j \left(\theta_j + \sum_{k \in Pa(j)} \theta_{jk} X_k \right) \quad (7)$$

ここで、 $(\theta_{jk})_{k \in Pa(j)}$ は親変数の重み付け係数である。例えば、ある頂点の条件付き確率分布がポアソン分布の場合、 $g_j(X_{Pa(j)}) = \exp(\theta_j + \sum_{k \in Pa(j)} \theta_{jk} X_k)$ となる。

より一般的には、指数分布族の定義を用いて、以下のように表現することができる。

$$P(X_j|X_{Pa(j)}) = \exp \left(\theta_j X_j + \sum_{(k,j) \in E} \theta_{jk} X_k X_j - B_j(X_j) - A_j \left(\theta_j + \sum_{(k,j) \in E} \theta_{jk} X_k \right) \right) \quad (8)$$

ここで、 $A_j(\cdot)$ は対数分配関数 (log-partition function)、 $B_j(\cdot)$ は指数分布族によって決まる関数、 $\theta_{jk} \in \mathbb{R}$ は頂点 j に対応するパラメータである。DAG モデルの因数分解 (1) により、QVF SEM の同時確率分布は、以下のように記述することができる。

$$P(X) = \exp \left(\sum_{j \in V} \theta_j X_j + \sum_{(k,j) \in E} \theta_{jk} X_k X_j - \sum_{j \in V} B_j(X_j) - \sum_{j \in V} A_j \left(\theta_j + \sum_{(k,j) \in E} \theta_{jk} X_k \right) \right) \quad (9)$$

このモデルは、関数 $A_j(\cdot)$ や $B_j(\cdot)$ が頂点 j によって異なることを許容するため、各頂点の条件付き分布がそれぞれ異なる分布に従っているような混合 DAG モデルを表現することも可能である。また、各頂点の分布 \mathcal{P} が式 (6) で定義される 2 次分散関数性を満たす場合、非線形モデルやノンパラメトリックモデルに拡張することも可能である。

3 QVF-DAG モデルの識別可能性

本章では、前章で導入した QVF DAG モデル [11] が識別可能であることを証明する。QVF DAG モデルの識別可能性は Park and Raskutti(2017)[11] によって過分散スコア (OverDispersion Score, ODS) を用いて初めて証明された。

過分散とは、ポアソン分布などの分散が期待値に依存する確率分布において、期待される分散より標本分散の方が大きくなることである。過分散が生じる原因の 1 つとして、サンプルの個体差などが挙げられる。このような個体差などの効果を組み込んだ統計モデルに一般化線形混合モデル (generalized linear mixed model; GLMM) がある [24]。

統計的因果探索の文脈において最初に過分散を利用した例は、Park and Raskutti(2015)[10] の Poisson DAG モデルである。Park and Raskutti(2015)[10] では Poisson DAG モデルの各頂点の条件付き分散が過分散であるかどうかを検定することによって識別可能性を証明している。Park and Raskutti(2017)[11] では、Poisson DAG モデルにおける過分散が、QVF DAG モデルでも成立することを利用し、QVF DAG モデルの識別可能性を証明している。つまり、Park and Raskutti(2017)[11] による過分散スコアを用いた QVF DAG モデルの識別可能性の証明は、Park and Raskutti(2015)[10] による Poisson DAG モデルの識別可能性の証明の自然な拡張であると言える。

Poisson DAG モデルの識別可能性は、Park and Park(2019)[9] によるモーメント比スコア (Moment Ratio Score, MRS) を用いた証明も行われている。モーメント比スコアを用いることによって識別可能条件が緩和され、DAG の推定精度や sample complexity も改善することが示されている [9]。

そこで本論文では、Park and Park(2019)[9] による Poisson DAG モデルのモーメント比スコアを拡張することで、QVF DAG モデルの識別可能性を証明する。そうすることで、従来の識別可能条件 [11] を緩和することや、DAG の推定精度が向上することが期待される。

まず初めに、QVF DAG モデルにおけるモーメント (積率) について以下のような関係性が成立していることを示し、識別可能性の証明に利用する。

命題 3.1. リンク関数 $(g_j(X_{Pa(j)}))_{j \in V}$ が非退化である QVF DAG モデル (6) において、任意の頂点 $j \in V$ 、任意の集合 $S_j \subset Nd(j)$ に関して、以下のモーメント関係が成立する。

$$\frac{E(X_j^2)}{E[\beta_0 E(X_j|X_{S_j}) + (\beta_1 + 1)E(X_j|X_{S_j})^2]} \geq 1 \quad (10)$$

同様に、

$$E(\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)}|X_{S_j})) \geq 0 \quad (11)$$

等号成立は、 S_j が頂点 j の親変数すべてを含むとき ($Pa(j) \subset S_j$) である。

証明. 分散とモーメントの関係性と、2次分散関数性の定義を利用すると、2次分散関数性を満たす確率変数 X のモーメントについて、以下の関係性が成り立つ。

$$\begin{aligned}\text{Var}(X) &= E(X^2) - E(X)^2 && \text{分散の公式より} \\ &= \beta_0 E(X) + \beta_1 E(X)^2 && \text{2次分散関数性の定義より}\end{aligned}$$

よって、

$$E(X^2) = \beta_0 E(X) + (\beta_1 + 1)E(X)^2$$

ここで、記号の簡単のために、関数 $f(\mu) = \beta_0\mu + (\beta_1 + 1)\mu^2$ を定義する。すると、任意の頂点 $j \in V$ 、任意の空でない集合 $S_j \subset Nd(j)$ について、以下のように書ける。

$$\begin{aligned}E(X_j^2|S_j) &= E(E(X_j^2|X_{Pa(j)})|S_j) \\ &= E(f(E(X_j|X_{Pa(j)}))|S_j)\end{aligned}\tag{12}$$

イェンセンの不等式と関数 $f(\cdot)$ が凸であることを利用すると、以下が導ける。

$$\begin{aligned}E(f(E(X_j|X_{Pa(j)}))|S_j) &\geq f(E(E(X_j|X_{Pa(j)})|S_j)) \\ &= f(E(X_j|S_j))\end{aligned}\tag{13}$$

ここで、モデルの定義より、 $E(X_j|X_{Pa(j)}) = g_j(X_{Pa(j)})$ であり、関数 $g_j(\cdot)$ は非退化であることを利用すると、等号は S_j が頂点 j の親変数すべてを含むとき ($Pa(j) \subset S_j \subset Nd(j)$) のみ成立する。

式 (12) と式 (13) を整理すると、

$$\begin{aligned}E(X_j^2|S_j) - f(E(X_j|S_j)) &\geq 0 \\ E(X_j^2|S_j) - (\beta_0 E(X_j|S_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j|S_j)^2) &\geq 0\end{aligned}$$

となり、さらに期待値を取ることで、

$$E(X_j^2) - E(\beta_0 E(X_j|S_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j|S_j)^2) \geq 0\tag{14}$$

が得られる。よって、以下が成り立つ。

$$\frac{E(X_j^2)}{E(\beta_0 E(X_j|S_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j|S_j)^2)} \geq 1\tag{15}$$

ここからは、 $E(X_j^2) \geq E(\beta_0 E(X_j|S_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j|S_j)^2)$ が、 $E(\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)})|X_{S_j})) \geq 0$ と同値であることを証明する。まず、分散の公式より以下のように書ける。

$$E(\text{Var}(X_j|S_j)) = E(E(\text{Var}(X_j|X_{Pa(j)})|S_j)) + E(\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)})|S_j))\tag{16}$$

ここで、式 (16) の右辺の第1項目は、モデルの定義 (6) を利用すると、以下のように展開できる。

$$\begin{aligned}E(E(\text{Var}(X_j|X_{Pa(j)})|S_j)) &= E(E(\beta_0 E(X_j|X_{Pa(j)}) + \beta_1 E(X_j|X_{Pa(j)})^2|S_j)) \\ &= E(E(\beta_0 E(X_j|X_{Pa(j)})|S_j)) + E(E(\beta_1 E(X_j|X_{Pa(j)})^2|S_j)) \\ &= \beta_0 E(X_j) + \beta_1 E(X_j)^2\end{aligned}\tag{17}$$

さらに、式 (17) を用いて式 (16) を整理すると、以下のように書ける。

$$E(\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)}|S_j))) = E(\text{Var}(X_j|S_j)) - \beta_0 E(X_j) - \beta_1 E(X_j)^2 \quad (18)$$

ここから式 (18) の右辺を整理すると、以下のように書ける。ここで、最後の不等号は式 (14) より成立する。

$$\begin{aligned} & E(\text{Var}(X_j|S_j)) - \beta_0 E(X_j) - \beta_1 E(X_j)^2 \\ &= E(E(X_j^2|S_j) - E(X_j|S_j)^2) - \beta_0 E(X_j) - \beta_1 E(X_j)^2 \\ &= E(E(X_j^2|S_j)) - E(E(X_j|S_j)^2) - E(\beta_0 E(X_j|S_j)) - E(\beta_1 E(X_j|S_j)^2) \\ &= E(X_j^2) - E(\beta_0 E(X_j|S_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j|S_j)^2) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

よって、式 (10) は、 $E(\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)}|X_{S_j}))) \geq 0$ と同値である。 \square

ここからは、命題 3.1 が QVF DAG モデルの識別可能性に利用できることを直感的に理解するために、各頂点の親変数による条件付き確率分布がポアソン分布である 2 変数 DAG モデルを例にその識別可能性を証明する。そこで、図 3 のような DAG モデルを考える。

- $G_1: X_1 \sim \text{Poisson}(\lambda_1), \quad X_2 \sim \text{Poisson}(\lambda_2)$ ただし、 X_1 と X_2 は独立
- $G_2: X_1 \sim \text{Poisson}(\lambda_1), \quad X_2|X_1 \sim \text{Poisson}(g_2(X_1))$
- $G_3: X_2 \sim \text{Poisson}(\lambda_2), \quad X_1|X_2 \sim \text{Poisson}(g_1(X_2))$

ただし、 g_1 と g_2 は非退化な任意の関数である。 $(g_1, g_2: \mathbb{N} \cup \{0\} \rightarrow \mathbb{R}^+)$

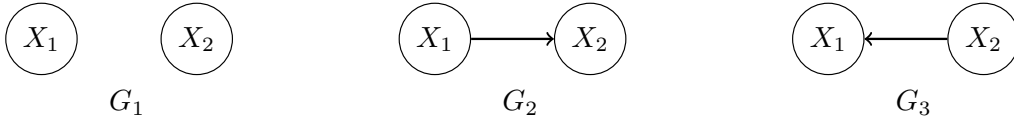


図 3 2 変数の Poisson DAG モデル

命題 3.1 より、 G_1 におけるすべての頂点 $j \in \{1, 2\}$ について、 $E(X_j^2) = E(X_j) + E(X_j)^2$ である。 G_2 においては、以下が成り立つ。

$$E(X_1^2) = E(X_1) + E(X_1)^2, \quad \text{かつ} \quad E(X_2^2) > E(X_2) + E(X_2)^2$$

同様に、 G_3 においては、以下が成り立つ。

$$E(X_1^2) > E(X_1) + E(X_1)^2, \quad \text{かつ} \quad E(X_2^2) = E(X_2) + E(X_2)^2$$

つまり、モーメント比 $E(X_j^2)/(E(X_j) + E(X_j)^2)$ によって、真のグラフ構造を同定することが可能である。

命題 3.1 のモーメント比を用いる方法は、一般的な p 変数の QVF DAG モデルにも適用することが可能であり、モーメント比 (10) が 1 か 1 以上かを確認することで識別可能性を証明することができる。

定理 3.2 (QVF DAG モデルの識別可能性). 2 次分散関数性を満たす係数 $(\beta_{j0}, \beta_{j1})_{j \in V}$ が存在し、QVF DAG モデルのクラス (1) について考える。任意の頂点 $j \in V$ について、 $\beta_{j1} > -1$ であり、リンク関数 $g_j(\cdot)$ が非退化であるならば、QVF DAG モデルは識別可能である。

証明. 一般性を失わずに、真の因果順序が一意であり、 $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_p)$ であると仮定する。また、簡単のために、 $X_{1:j} = (X_{\pi_1}, X_{\pi_2}, \dots, X_{\pi_j})$ 、 $X_{1:0} = \emptyset$ と定義する。加えて、モーメント関連関数 $f(\mu) = \beta_0 \mu + (\beta_1 + 1)\mu^2$ を定義する。ここから数学的帰納法を用いて QVF DAG モデルの識別可能性を証明する。

Step(1)

因果順序が最初である π_1 について、命題 3.1 を用いると、 $E(X_{\pi_1}^2) = E(f(E(X_{\pi_1})))$ であるのに対し、任意の頂点 $j \in V \setminus \{\pi_1\}$ については、 $E(X_j^2) > E(f(E(X_j)))$ である。よって、因果順序が 1 番目の要素 π_1 を特定することができる。

Step(m-1)

因果順序が $(m-1)$ 番目の要素について、因果順序が先の $(m-1)$ 個の要素とその親が正しく推定されていると仮定する。つまり、因果順序が $(m-1)$ 番目の要素については、 $E(X_{\pi_{m-1}}^2) = E(f(E(X_{\pi_{m-1}} | X_{1:(m-2)})))$ が成立していると仮定する。一方で、任意の頂点 $j \in \{\pi_m, \dots, \pi_p\}$ については以下が成立していると仮定する。

$$E(X_j^2) > E(f(E(X_j | X_{1:(m-2)})))$$

Step(m)

因果順序が m 番目の要素とその親について考える。帰納法の仮定より、 π_m は、 $E(X_{\pi_m}^2) = E(f(E(X_{\pi_m} | X_{1:(m-1)})))$ である。一方で、 $j \in \{\pi_{m+1}, \dots, \pi_p\}$ については、 $E(X_j^2) > E(f(E(X_j | X_{1:(m-1)})))$ である。よって、因果順序が m 番目の要素 π_m を特定することができる。

親変数に関しては、 $P(G)$ の因数分解 (1) による以下の条件付き独立関係より導くことができる。

$$\begin{aligned} E(X_{\pi_m}^2) &= E(f(E(X_{\pi_m} | X_{1:(m-1)}))) \\ &= E(f(E(X_{\pi_m} | X_{Pa(\pi_m)}))) \end{aligned}$$

つまり、上記の関係が成立するような最小の集合を $X_{1:(m-1)}$ の中から π_m の親として選択す

ることができる。

□

Park and Raskutti(2017)[11] によって証明された QVF DAG モデルの識別可能条件には、 $Pa(j) \not\subseteq S_j$ のとき、すべての $x \in \mathcal{X}_{S_j}$ について、 $\text{Var}(E(X_j|X_{Pa(j)})|X_{S_j} = x) > 0$ という仮定が含まれていた。しかし、本論文における識別可能条件にはそのような仮定は含まれていない。なぜなら、2次分散関数性の定義とイェンセンの不等式を利用することで、式 (10) や式 (11) が成立するためである。つまり、QVF DAG モデルの従来の識別可能条件 [11] を緩和している。このことによつて、Park and Park(2019)[9] の 3.2 節における議論と同様に QVF SEM の学習コストを低下させることが期待される。ただし、本研究の目的から外れるため、学習コストに関する理論的な証明は行わない。

4 提案モデル

本章では前章で俯瞰した ANM[8] と QVF DAG モデル [11] を用いることによって、連続変数と離散変数が混在する構造的因果モデルを提案し、その識別可能性を証明する。

4.1 提案モデル

提案モデルにおける変数は、離散変数と連続変数に分けられ、離散変数は 0 以上の整数を取る確率変数であると仮定する。そこで提案モデルを以下のように定義する。

定義 4.1 (提案モデル). p 個の観測変数 $X = \{X_1, \dots, X_p\}$ は DAG G によって表現されるデータ生成過程から生成されており、各変数の親変数がその変数の直接的な原因である。また、 p 個の観測変数 $X = \{X_1, \dots, X_p\}$ は、連続変数 ($X_j \in \mathbb{R}$) か離散変数 ($X_j \in \{0\} \cup \mathbb{N}$) のいずれかに割り当てられ、それぞれ以下のデータ生成過程により生成されている。

1. 連続変数に割り当てられた変数 $X_j (j \in C)$ は、その親変数 $Pa(j)$ と誤差変数 e_j の線形和である。

$$X_j = \theta_j + \sum_{k \in Pa(j)} \theta_{jk} X_k + e_j \quad (19)$$

それぞれの係数 θ_{jk} は、DAG G における変数 X_k から変数 X_j への直接的な因果効果の大きさを表す。つまり、頂点 k が頂点 j の親であるときは $\theta_{jk} \neq 0$ であり、それ以外のときは $\theta_{jk} = 0$ である。また、誤差変数 e_j は平均 0、分散 σ_j^2 に従う互いに独立な連続確率変数である。

2. 離散変数に割り当てられた変数 $X_j (j \in D)$ は、その親変数 $Pa(j)$ による条件付き確率が、2 次分散関数性を満たす。つまり、以下を満たすような $\beta_{j0}, \beta_{j1} \in \mathbb{R}$ が存在する。

$$\text{Var}(X_j | X_{Pa(j)}) = \beta_{j0} E(X_j | X_{Pa(j)}) + \beta_{j1} (E(X_j | X_{Pa(j)}))^2 \quad (20)$$

また、各変数の条件付き期待値は、その変数の親変数 $Pa(j)$ と任意の単調で微分可能なリンク関数 $g_j: \mathcal{X}_{Pa(j)} \rightarrow \mathbb{R}^+$ によって以下のように記述される。ここで、それぞれの係数 θ_{jk} は、DAG G における変数 X_k から変数 X_j への直接的な関係性の強さを表す。つまり、頂点 k が頂点 j の親であるときは $\theta_{jk} \neq 0$ であり、それ以外のときは $\theta_{jk} = 0$ である。

$$E(X_j | X_{Pa(j)}) = g_j(X_{Pa(j)}) = g_j \left(\theta_j + \sum_{k \in Pa(j)} \theta_{jk} X_k \right)$$

本モデルは解釈性が重視されるマーケティング・リサーチで用いることを想定しているため、連続変数のデータ生成過程や、離散変数のデータ生成過程におけるリンク関数 g_i は、パラメータ θ に関して線形な関数であることを仮定しているが、次節の識別可能性の議論においてはそのような仮定は必要ではない。そのため、この提案モデルは非線形モデルへと簡単に拡張することが可能である。

マーケティング・リサーチの文脈において、上記のような因果モデルが有用であると考えられるかについて述べる。まず第一に、消費者行動の研究のうち、「消費者の知覚、選好および選択」を扱った分野との親和性である。消費者の知覚・選好・選択モデルは、消費者がどのようにブランドを理解し、そのブランドに対してどのような態度形成を経て購買に至るかをモデル化したものであり、具体的には「選好回帰分析」や「コンジョイント分析」といった手法によって分析が行われる [32]。これらの分析の基礎的な考え方に「多属性態度モデル」が採用されており、それは以下のように表される。

$$U_j = a_1 z_{1j} + a_2 z_{2j} + \cdots + a_l z_{lj}$$

ここで、 U_j は対象 j に対する態度、 z_{ij} は対象 j の第 i 属性の水準、 a_i は第 i 属性に対する消費者の重視度である。例えば、ペットボトル入りの緑茶飲料に対する購入意向 (態度) を、苦み・渋み・甘みなどの消費者が感じる味覚の良し悪し (属性の水準) と、各属性に対する消費者の重視度の線形加重和で表そうとするモデルである。本論文の提案モデルにおける連続変数のデータ生成過程の定義である式 (19) は、選好回帰分析やコンジョイント分析が前提としている考え方を表現していると言える。通常、 U_j や z_{ij} のデータは、2~7 段階尺度 (「あてはまる」~「あてはまらない」など) で評価したデータが用いられる [32][28]。これらのデータは本来連続量である態度や評価を便宜的にいくつかの段階に分割した順序付きカテゴリカルデータであり、通常、各カテゴリに等間隔の数値を割り当て、割り当てられた値自体をデータとして回帰分析や因子分析を行うことが多い。この方法には批判もあるが、相関係数の推定精度の観点などから、5 段階以上の尺度であれば連続変数と同様に扱っても大きな問題とはならないという結果も見られる [25]。そのため、本論文では本来連続量である態度や評価を 5 段階以上の尺度で取得したデータは連続変数として扱う。

第二に、カウント (計数) データを扱うことである。マーケティング・リサーチにおいては、商品の購買回数や Web ページへの訪問回数、インターネット広告への接触回数など、ある事象が発生した回数を記録したカウントデータを扱うことが多い。これらのデータに対しては、ポアソン回帰モデルを用いた分析などが用いられる。例えば、ある商品の販売点数を目的変数とし、その商品価格や小売店における山積み陳列実施の有無などを説明変数としたモデルによって市場反応分析を行うことなどが挙げられる [26]。また、非耐久消費財の購入に関するデータは負の二項分布を用いてモデル化することができることが示されており [3]、負の二項分布モデルを拡張したディリクレモデルを用いてブランドの購入率や購入回数を分析したりする事例も見られる [29]。本論文の提案モデルにおける離散変数のデータ生成過程の性質を満たす分布には、ポアソン分布や二項分布、負の二項分布などが

含まれており、マーケティング・リサーチの分野において活用しやすいと考えられる。

4.2 提案モデルの識別可能性

本節では、前節で定義した DAG モデルの識別可能性を証明する。提案モデルは、連続変数と離散変数が混在することを許容する DAG モデルであるため、その特殊形として、全てが連続変数であるモデルや全てが離散変数であるモデルを考えることも可能である。全てが連続変数である場合は ANM となり、モデルの識別可能条件が複数証明されている [16] [5] [13] [15] [8]。また、全てが離散変数である場合は QVF DAG モデル [11] となり、3 章でその識別可能性を証明した。そこで以下では、観測変数の集合に連続変数と離散変数の両方が含まれる場合に関する識別可能条件について議論する。まず、証明の方針について直感的な理解を得るために、図 4 のような 3 変数モデルを用いてその識別可能性を示す。ここで X, Z は連続変数、 Y は離散変数であるとする。図 4 の 3 つの因果グラフから生成される分布は、いずれも $X \perp\!\!\!\perp Z | Y$ という条件付き独立関係のみが成立しており、因果マルコフ条件のみでは識別できない例である。しかし、以下で示すように、提案モデルの特徴を利用すると識別することが可能である。

$$\begin{aligned} G_1: X &= \theta_X + e_X, & e_X &\sim N(0, \sigma_X^2) \\ Y|X &\sim \text{Poisson}(\lambda), & \log(\lambda) &= \theta_Y + \theta_{YX}X \\ Z &= \theta_Z + \theta_{ZY}Y + e_Z, & e_Z &\sim N(0, \sigma_Z^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_2: X &= \theta_X + \theta_{XY}Y + e_X, & e_X &\sim N(0, \sigma_X^2) \\ Y|Z &\sim \text{Poisson}(\lambda), & \log(\lambda) &= \theta_Y + \theta_{YZ}Z \\ Z &= \theta_Z + e_Z, & e_Z &\sim N(0, \sigma_Z^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_3: X &= \theta_X + \theta_{XY}Y + e_X, & e_X &\sim N(0, \sigma_X^2) \\ Y &\sim \text{Poisson}(\lambda) \\ Z &= \theta_Z + e_Z, & e_Z &\sim N(0, \sigma_Z^2) \end{aligned}$$

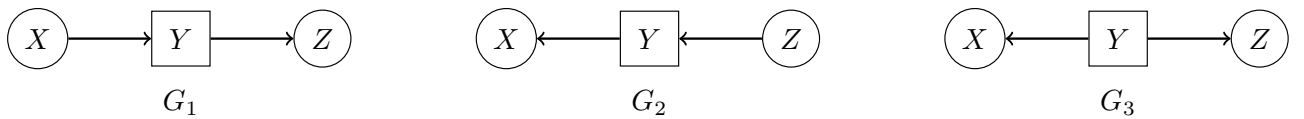


図 4 3 変数の DAG モデル

命題 3.1 より、 G_1, G_2 においては

$$E(Y^2) > E(Y) + E(Y)^2$$

である一方で、 G_3 においては

$$E(Y^2) = E(Y) + E(Y)^2$$

となる。よって、離散変数のモーメント比 (10) が 1 か 1 以上かを確かめることで G_1, G_2 と G_3 は識別可能である。

次に G_1 について、もし連続変数 X, Z の誤差変数の分散が $\sigma_X^2 < \sigma_Z^2 + \text{Var}(E(Z|Y))$ を満たすならば、全分散の公式を用いて以下が成り立つ。

$$\begin{aligned} \text{Var}(Z) &= E(\text{Var}(Z|Y)) + \text{Var}(E(Z|Y)) \\ &= \sigma_Z^2 + \text{Var}(E(Z|Y)) \\ &> \sigma_X^2 \\ &= \text{Var}(X) \end{aligned}$$

よって、 X のほうが因果順序が早いことが分かる。つまり、誤差変数の分散が $\sigma_X^2 < \sigma_Z^2 + \text{Var}(E(Z|Y))$ を満たすならば、 G_1 の因果順序を特定することが可能である。

G_2 についても同様に、連続変数 X, Z の誤差変数の分散が、 $\sigma_Z^2 < \sigma_X^2 + \text{Var}(E(X|Y))$ を満たすならば、真の因果順序 $\pi = (Z, Y, X)$ を特定することが可能である。

ここからは、上記の 3 変数モデルでの証明の方針を拡張し、提案モデルが一般的な p 変数の場合においても識別可能であることを証明する。まず初めに、提案モデルにおける離散変数に関して、命題 3.1 と同様の関係が成立していることを示す。

補題 4.2. 提案モデルにおいて、離散変数が割り当てられた任意の頂点 $j \in D$ 、任意の集合 $S_j \subset Nd(j)$ に関して、以下のモーメント関係が成立している。

$$\frac{E(X_j^2)}{E[\beta_0 E(X_j|X_{S_j}) + (\beta_1 + 1)E(X_j|X_{S_j})^2]} \geq 1 \quad (21)$$

等号成立は、 S_j が頂点 $j \in D$ の親変数全てを含むとき ($Pa(j) \subset S_j$) である。

証明. 提案モデルにおいて、離散変数が割り当てられた頂点は、式 (20) を満たすため、任意の変数 $X_j \in X_D$ の 2 次モーメントは以下のように表現できる。

$$E(X_j^2) = \beta_0 E(X_j) + (\beta_1 + 1)E(X_j)^2$$

ここで、記号の簡単な簡単のために、関数 $f(\mu) = \beta_0 \mu + (\beta_1 + 1)\mu^2$ を定義する。すると、任意の頂点 $j \in D$ 、任意の空でない集合 $S_j \subset Nd(j)$ について、以下のように書ける。

$$\begin{aligned} E(X_j^2|S_j) &= E(E(X_j^2|X_{Pa(j)})|S_j) \\ &= E(f(E(X_j|X_{Pa(j)}))|S_j) \end{aligned} \quad (22)$$

提案モデルにおいては連続変数と離散変数が混在するモデルを考えているため、離散変数が割り当てられた頂点 $j \in D$ の非子孫の集合 $Nd(j)$ には、連続変数と離散変数の両方が含まれている可能性がある。つまり、式 (22) は S_j に連続変数と離散変数のどちらが含まれていても成立する。

以降の証明は、命題 3.1 の証明と同様である。

□

補題 4.2 で証明したモーメント関係は p 変数の提案モデルでも利用することができる。つまり、式 (21) が 1 に等しくなる $X_j \in X_D$ が存在するかどうかを確認することによって、因果順序の 1 番目の変数が離散変数か否かを判断することができ、離散変数の場合はその変数を特定することができる。

定理 4.3 (提案モデルの識別可能性). 定義 4.1 によって定義される DAG モデルは、以下の仮定を満たすとき識別可能である。ここで、 π は DAG G における因果順序を表す。

- (A) 連続変数が割り当てられた任意の頂点 $j = \pi_m \in C, k \in De(j) \subset C$ のデータ生成過程における誤差変数の分散について、以下が満たされている。

$$\sigma_j^2 < \sigma_k^2 + E(\text{Var}(E(X_k | X_{Pa(k)}) | X_{\pi_1}, \dots, X_{\pi_{m-1}}))$$

- (B) 離散変数が割り当てられた任意の頂点 $j \in D$ について、 $\beta_{j1} > -1$ が満たされている。

仮定 (B) は、ベルヌーイ分布や多項分布による DAG モデルを除外するための仮定である。なぜなら、ベルヌーイ分布や多項分布による DAG モデルは識別不能であることが知られているためである [4]。以下では、定理 4.3 を証明する。

証明. 一般性を失わずに、DAG G における因果順序が一意であり、 $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_p)$ であると仮定する。また、簡単のために、 $X_{1:j} = (X_{\pi_1}, X_{\pi_2}, \dots, X_{\pi_j})$ 、 $X_{1:0} = \emptyset$ と定義する。DAG G において、連続変数に割り当てられた変数からなる頂点の集合を C 、離散変数に割り当てられた変数からなる頂点の集合を D とする。加えて、モーメント関連関数 $f(\mu) = \beta_0 \mu + (\beta_1 + 1) \mu^2$ を定義する。ここから数学的帰納法を用いて提案モデルの識別可能性を証明する。

Step(1)

- (i) $\pi_1 = j \in D$ の場合

補題 4.2 より、 $E(X_{\pi_1}^2) = E(f(E(X_{\pi_1})))$ が成立する。一方で、頂点 $j \in D \setminus \{\pi_1\}$ では、 $E(X_j^2) > E(f(E(X_j)))$ となる。そのため、因果順序が 1 番目の要素 π_1 は、 $E(X_j^2) = E(f(E(X_j)))$ となるような $j \in D$ である。もし、そのような変数が存在しなければ、 X_{π_1} は連続変数である。

(ii) $\pi_1 = j \in C$ の場合

定理 4.3 の仮定 (A) より、任意の頂点 $k \in C \setminus \{\pi_1\}$ について、以下が成立する。

$$\begin{aligned} \text{Var}(X_{\pi_1}) &= \sigma_{\pi_1}^2 \\ &< \sigma_k^2 + \text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)})) \\ &= E(\text{Var}(X_k|X_{Pa(k)})) + \text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)})) \\ &= \text{Var}(X_k) \end{aligned}$$

よって、因果順序が 1 番目の要素 π_1 を特定することができる。

Step(m-1)

因果順序が $(m-1)$ 番目の要素について、因果順序が早い $(m-1)$ 個の要素とその親が正しく推定されていると仮定する。つまり、以下の 2 つの関係が成立していると仮定する。

- 因果順序が $(m-1)$ 番目の要素については、 $E(X_{\pi_{m-1}}^2) = E(f(E(X_{\pi_{m-1}}|X_{1:(m-2)})))$ が成立している。一方で、任意の頂点 $k \in \{\pi_m, \dots, \pi_p\} \cap D$ については以下が成立している。

$$E(X_j^2) > E(f(E(X_j|X_{1:(m-2)})))$$

- 任意の頂点 $k \in \{\pi_m, \dots, \pi_p\} \cap C$ のデータ生成過程における誤差変数の分散について、以下が成立している。

$$\sigma_{\pi_{m-1}}^2 < \sigma_k^2 + E(\text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)}|X_{1:(m-2)})))$$

Step(m)

因果順序が m 番目の要素とその親について考える。

(i) $\pi_m = j \in D$ の場合

帰納法の仮定より、 $E(X_{\pi_m}^2) = E(f(E(X_{\pi_m}|X_{1:(m-1)})))$ が成立する。一方で、頂点 $j \in \{\pi_{m+1}, \dots, \pi_p\} \cap D$ では、 $E(X_j^2) > E(f(E(X_j|X_{1:(m-1)})))$ となる。そのため、因果順序が m 番目の要素 π_m は、 $E(X_j^2) = E(f(E(X_j|X_{1:(m-1)})))$ となるような $j \in D$ である。もし、そのような変数が存在しなければ、 X_{π_m} は連続変数である。

(ii) $\pi_m = j \in C$ の場合

帰納法の仮定より、任意の頂点 $k \in \{\pi_{m+1}, \dots, \pi_p\} \cap C$ について、以下が成立する。

$$\begin{aligned} E(\text{Var}(X_{\pi_m}|X_{1:(m-1)})) &= \sigma_{\pi_m}^2 \\ &< \sigma_k^2 + E(\text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)}|X_{1:(m-1)}))) \\ &= E(E(\text{Var}(X_k|X_{Pa(k)}|X_{1:(m-1)}))) + E(\text{Var}(E(X_k|X_{Pa(k)}|X_{1:(m-1)}))) \\ &= E(\text{Var}(X_k|X_{1:(m-1)})) \end{aligned}$$

よって、因果順序が m 番目の要素 π_m を特定することができる。

各頂点の親に関しては、因果マルコフ条件に基づく $P(G)$ の因数分解(1) によって表現される条件付き独立関係と、因果極小性 (2) により導くことができる。つまり、以下を満たす頂点 k を π_m の親として特定することができる。

$$Pa(k) \equiv \{k \in \{\pi_1, \dots, \pi_{m-1}\} \mid X_k \not\perp\!\!\!\perp X_{\pi_m} \mid X_{1:(m-1)} \setminus X_k\}$$

よって、数学的帰納法により定理 4.3 の証明を完了する。

□

5 推定アルゴリズム

本章では、定義 4.1 による提案モデルが定理 4.3 の識別可能条件を満たす時に、因果順序と DAG における変数間の関係性の強さを推定するアルゴリズムを提案する。推定アルゴリズムは、(i) 各変数の因果順序を推定するステップ、と (ii) 各変数の親変数との関係性の強さを推定するステップ、という 2 つのステップによって構成される。提案モデルには異なるデータ生成過程に従う連続変数と離散変数が混在しているため、(i) 因果順序を推定するステップは、連続変数と離散変数を分けて逐次的に求める。以下では、連続変数と離散変数の因果順序の推定法についてそれぞれ述べる。

まず、離散変数の因果順序の推定法について述べる。離散変数の因果順序は、以下で定義される各頂点のモーメント比スコアを比較することで推定する。

$$\hat{S}(1, j) \equiv \frac{\hat{E}(X_j^2)}{\beta_0 \hat{E}(X_j) + (\beta_1 + 1) \hat{E}(X_j)^2} \quad (23)$$

$$\hat{S}(m, j) \equiv \frac{\hat{E}(X_j^2)}{\hat{E}(\beta_0 \hat{E}(X_j | X_{\hat{\pi}_{1:(m-1)}}) + (\beta_1 + 1) \hat{E}(X_j | X_{\hat{\pi}_{1:(m-1)}})^2)}$$

ここで、各推定量は以下のように求める。

$$\begin{aligned} \hat{E}(X_j) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_j^{(i)} \\ \hat{E}(\hat{E}(X_j | X_S)) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_j(\hat{\theta}_j^S + \sum_{k \in S} \hat{\theta}_{jk}^S X_k^{(i)}) \\ \hat{E}(\hat{E}(X_j | X_S)^2) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{g_j(\hat{\theta}_j^S + \sum_{k \in S} \hat{\theta}_{jk}^S X_k^{(i)})\}^2 \end{aligned}$$

ここで $(\hat{\theta}_j^S, \hat{\theta}_{jk}^S)$ は、 X_j を目的変数、 X_S を説明変数にとった一般化線形モデルのパラメータを最尤推定した値である。つまり、離散変数の因果順序を推定する際は、事前に各離散変数の条件付き確率分布を仮定する必要がある。

式 (23) によるモーメント比スコアは、式 (21) の推定量であるため、正しい因果順序の要素のスコアは 1 に等しくなり、それ以外の場合は 1 より大きくなる。つまり、モーメント比スコアが最小となる頂点のスコアが 1 に等しい場合は、因果順序が m 番目の要素は離散変数であり、その変数を特定することができる。一方で、全てのモーメント比スコアが 1 より大きい場合は、因果順序が m 番目の要素は連続変数であることが分かる。ただし、推定誤差があるためモーメント比スコアが厳密に 1 となることはない。そのため、本論文では閾値を設定することでモーメント比スコアが 1 に等しいかどうかを判断する。

次に、連続変数の因果順序の推定法について述べる。因果順序 m 番目の頂点が連続変数である場合、定理 4.3 の条件 (A) により、因果順序 m 番目の要素の条件付き分散は、連続変数が割り当てられた他のどの頂点の条件付き分散よりも厳密に小さい。つまり、因果順序 m 番目の要素が連続変数

である場合は、 $S = \{\hat{\pi}_1, \dots, \hat{\pi}_{m-1}\}$ を与えたときの各頂点の条件付き分散 $\hat{\sigma}_{j|S}$ が最小となる頂点 $j \in C$ が因果順序 m 番目の要素であると推定できる。条件付き分散の一致推定量は、一般化線形モデルや一般化加法モデルなどの回帰モデルによって得ることができる。提案モデルにおける連続変数のデータ生成過程が親変数と誤差変数との線形和であるため、本論文では、 X_j を目的変数に、 X_S を説明変数にとり、最小二乗法を用いて線形回帰分析を行ったときの残差の分散で条件付き分散 $\text{Var}(X_j|X_S)$ を推定する。

続いて、(ii) 各変数の親変数との関係性の強さを推定するステップについて述べる。上述の方法により因果順序 $\hat{\pi}$ を推定すると、因果順序に従って回帰分析を行うことにより、変数間の関係性の強さを表すパラメータ θ_{jk} を推定する。具体的には、 X_{π_j} を目的変数に、 $X_S = \{X_{\hat{\pi}_1}, \dots, X_{\hat{\pi}_{j-1}}\}$ を説明変数にとった一般化線形モデルのパラメータを最尤法によって推定する。ただし、パラメータ θ_{jk} の値が実際には0であっても、最尤法による推定値は厳密には0にならず、本来は存在しない冗長な有向辺が残ってしまう。そこで、Shimizu *et al.*(2011)[17] のように adaptive Lasso[23] を用いることで冗長な有向辺を削除する。adaptive Lasso ではサンプルサイズが十分大きければ、親変数候補 $X_S = \{X_{\hat{\pi}_1}, \dots, X_{\hat{\pi}_{j-1}}\}$ の中から正しい親変数を選択することができる。つまり、 $\theta_{jk} \neq 0$ となるような変数の集合 $X_K \subset X_S$ を見つけることができる。

提案モデルには連続変数と離散変数が混在している。そのため、adaptive Lasso による推定値は、それぞれ以下の目的関数を最小化することによって求める。

- 連続変数

$$\left\| X_j - \sum_{k \in S} \theta_{jk} X_k \right\|^2 + \lambda \sum_{k \in S} \frac{|\theta_{jk}|}{|\hat{\theta}_{jk}|^\gamma} \quad (24)$$

- 離散変数

$$\sum_{i=1}^n \left(-X_j^{(i)} \left(\theta_j + \sum_{k \in S} \theta_{jk} X_k^{(i)} \right) + g_j \left(\theta_j + \sum_{k \in S} \theta_{jk} X_k^{(i)} \right) \right) + \lambda \sum_{k \in S} \frac{|\theta_{jk}|}{|\hat{\theta}_{jk}|^\gamma} \quad (25)$$

ここで λ と γ は調整パラメータであり、 $\hat{\theta}_{jk}$ は θ_{jk} の一致推定量による推定値である。Zou(2006)[23] では、調整パラメータは5分割交差検証 (5-fold cross-validation) によって選択し、 $\hat{\theta}_{jk}$ は最小二乗法または最尤法によって推定することが提案されている。

提案アルゴリズム 1 提案モデルの推定アルゴリズム

Input: 提案モデルから生成された n 個の i.i.d 標本 $X^{1:n}$ 、各離散変数の条件付き確率分布の仮定

Output: 因果順序 $\hat{\pi} = (\hat{\pi}_1, \dots, \hat{\pi}_p)$ 、グラフ構造 $\hat{E} \in \{0, 1\}^{p \times p}$ 、頂点間の関係性の強さ $\hat{\theta} \in \mathbb{R}^{p \times p}$

Step1: 因果順序の推定

初期化 $\hat{\pi}_0 = \emptyset$

for $m = \{1, 2, \dots, p\}$ **do**

$S = \{\hat{\pi}_0, \dots, \hat{\pi}_{m-1}\}$

for $j \in (V \setminus S) \cap D$ **do**

式 (23) を用いて $\hat{S}(m, j)$ を計算する

end for

if $\min \hat{S}(m, j) < \text{閾値}$ **then**

因果順序 m 番目の要素を推定 $\hat{\pi}_m = \arg \min_j \hat{S}(m, j)$

else

for $j \in (V \setminus S) \cap C$ **do**

X_S による X_j の条件付き分散 $\hat{\sigma}_{j|S}^2$ を計算する

end for

因果順序 m 番目の要素を推定 $\hat{\pi}_m = \arg \min_j \hat{\sigma}_{j|S}^2$

end if

end for

Step2: 変数間の関係性の強さの推定

for $m = \{2, 3, \dots, p\}$ **do**

$K = \{\hat{\pi}_1, \dots, \hat{\pi}_{m-1}\}$

目的変数 $X_{\hat{\pi}_m}$ 、説明変数 X_K とし、adaptive Lasso(24)(25) を用いて $\hat{\theta}_{mk}$ を求める

因果順序 m 番目の要素の親変数を推定 $\hat{Pa}(\hat{\pi}_m) = \{k \in K \mid \hat{\theta}_{mk} \neq 0\}$

end for

グラフ構造を推定 $\hat{E} = \bigcup_{m \in V} \{(k, \hat{\pi}_m) \mid k \in \hat{Pa}(\hat{\pi}_m)\}$

6 数値実験

本章では数値実験を行い、定義 4.1 による提案モデルが前章の提案アルゴリズムによって推定可能であることを示す。また、提案アルゴリズムによる提案モデルの推定精度が、既存の DAG 推定アルゴリズムより高いことを示す。最後に、離散変数の因果順序を推定する際の閾値の設定についても考察する。

6.1 設定

本論文では、サンプルサイズ $n = \{100, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 2500\}$ 、頂点数 $p = \{5, 10\}$ 、連続変数の誤差変数の分布 {正規分布, 一様分布} であるデータセットを、提案モデルに従ってそれぞれ 100 個ずつ生成した。データ生成や推定における設定の詳細は以下とした。

1. p 個の変数をランダムに連続変数と離散変数に割り当てた。連続変数に割り当てられる確率は 0.6、離散変数に割り当てられる確率は 0.4 とした。また、離散変数はポアソン分布と二項分布のいずれかに確率 0.5 で割り当てた。ただし、二項分布のパラメータは Park and Raskutti(2017)[11] と同様に $N_j = 4$ に固定した。
2. グラフの構造をランダムに生成するために、まず全ての要素が 0 である $p \times p$ 隣接行列を生成した。次に、Kalisch and Bühlmann(2007)[6] と同様に、成功確率 s に従う独立なベルヌーイ試行に基づいて隣接行列の下三角成分を 1 に置き換えた。成功確率 s は、各変数と隣接する変数の個数の期待値が 2 または 5 になるようにランダムに設定した*²。隣接行列のゼロ・非ゼロパターンは、提案モデルにおける変数間の関係性の強さを表すパラメータ θ_{jk} のゼロ・非ゼロパターンと同じである。
3. 提案モデルにおける非ゼロのパラメータ $\theta_{jk} \in \mathbb{R}$ は、範囲 $\theta_{jk} \in [-0.5, -0.2] \cup [0.2, 0.5]$ の一様分布から選択した。また、定数項 θ_j は、範囲 $\theta_j \in [-0.5, 0.5]$ の一様分布から選択した。
4. 連続変数のデータ生成過程における誤差変数の分散 σ_j^2 は、範囲 $\sigma_j^2 \in [0.7, 0.8]$ の一様分布から選択した。
5. 離散変数の因果順序を推定する際の閾値は 1.01 とした。
6. 各変数の親変数との関係性の強さを推定する際の adaptive Lasso の調整パラメータについて、 λ は 10 分割交差検証によって選択した。具体的には、「最小の逸脱度 (deviance) + 標準誤差」

*² 各変数と隣接する変数の個数の期待値は $s(p-1)$ である [6]

を超えない最大の λ を選択した。また、 γ は 1 に固定した。

既存の DAG 推定アルゴリズムには、Greedy Equivalent Search (GES)[2]、Max-Min Hill-Climbing (MMHC)[18]、DirectLiNGAM[17] を用いた。DAG を推定するアルゴリズムは、制約に基づくアプローチ (constraint-based approach) とスコアに基づくアプローチ (score-based approach) に大別される。GES はスコアに基づくアプローチであり、ベイズ情報量規準 (Bayesian information criterion, BIC) を用いてモデルの当てはまりが最も良いマルコフ同値類を推定する方法である。MMHC は制約に基づくアプローチとスコアに基づくアプローチの両方を組み合わせたハイブリッドなアルゴリズムである。具体的には、まず制約に基づくアプローチによって各変数の親候補と子候補を求め、次にスコアに基づくアプローチによってモデルの当てはまりが最も良いマルコフ同値類を推定する。1 段階目として制約に基づくアプローチによって親候補と子候補を求めることによって、2 段階目のスコアに基づくアプローチの際の探索空間を小さくしていることが特徴である。DirectLiNGAM は LiNGAM[16] に特化したアルゴリズムであり、回帰分析と独立性の評価を繰り返すことによって因果順序を推定する。

DAG の推定精度は、適合率 (precision) と再現率 (recall) によって測定した。それぞれの算出方法は以下の通りである。

- 適合率 (precision)

$$\frac{\text{正しく推定された辺の個数}}{\text{推定された DAG における辺の個数}}$$

- 再現率 (recall)

$$\frac{\text{正しく推定された辺の個数}}{\text{真の DAG における辺の個数}}$$

ただし、GES と MMHC はマルコフ同値類を推定するアルゴリズムであるため、推定されたグラフの一部の辺は無向辺のままである。そのため、本論文では Park and Park(2019)[9] と同様に、推定されたマルコフ同値類すべてにおける適合率と再現率の平均値で評価する。

6.2 DAG の推定精度

各アルゴリズムの DAG の推定精度を図 5 と図 6 に示す。図 5 は連続変数の誤差変数が正規分布に従うように生成したデータにおける推定精度を、図 6 は一様分布に従うように生成したデータにおける推定精度を示す。また、生成されたデータの都合上、稀に一般化線形モデルや adaptive Lasso の推定が収束しない場合があった。その際は推定結果を欠測とし、精度指標の算出時に除外した。

実験結果より、提案アルゴリズムは既存アルゴリズムと比較して適合率も再現率も高いことが分かる。また、提案アルゴリズムは他のアルゴリズムと比較して、サンプルサイズが大きくなるほど有向辺の向きを正しく推定しており、特に再現率においては既存アルゴリズムとの差が大きくなる傾向が

見られる。このことから、提案モデルは識別可能であり、本論文による提案アルゴリズムによって推定可能であると言える。一方、DirectLiNGAM の推定精度は、正規分布の場合は適合率も再現率も 0.5 を下回るのに対し、一様分布の場合は GES や MMHC の精度と同程度またはそれ以上である。これは、LiNGAM[17] が誤差変数に対して非正規性を仮定していることが影響しているためであると考えられる。

提案アルゴリズムにおける適合率と再現率を比較すると、サンプルサイズが 1000 を超えると再現率のほうが高いことが読み取れる。つまり、サンプルサイズが大きい時、実際には直接的な因果関係があるにもかかわらず因果関係が無いと推定してしまうという偽陰性が少ないことを示している。因果関係に関する仮説を得ようとする際に偽陰性が多いと、重要な因果関係を見過ごしてしまう可能性が高まる。そのため、因果関係の仮説を構築する上で、提案アルゴリズムの再現率が高いことは望ましいと言える。

● 提案アルゴリズム ▲ GES ■ MMHC + DirectLiNGAM

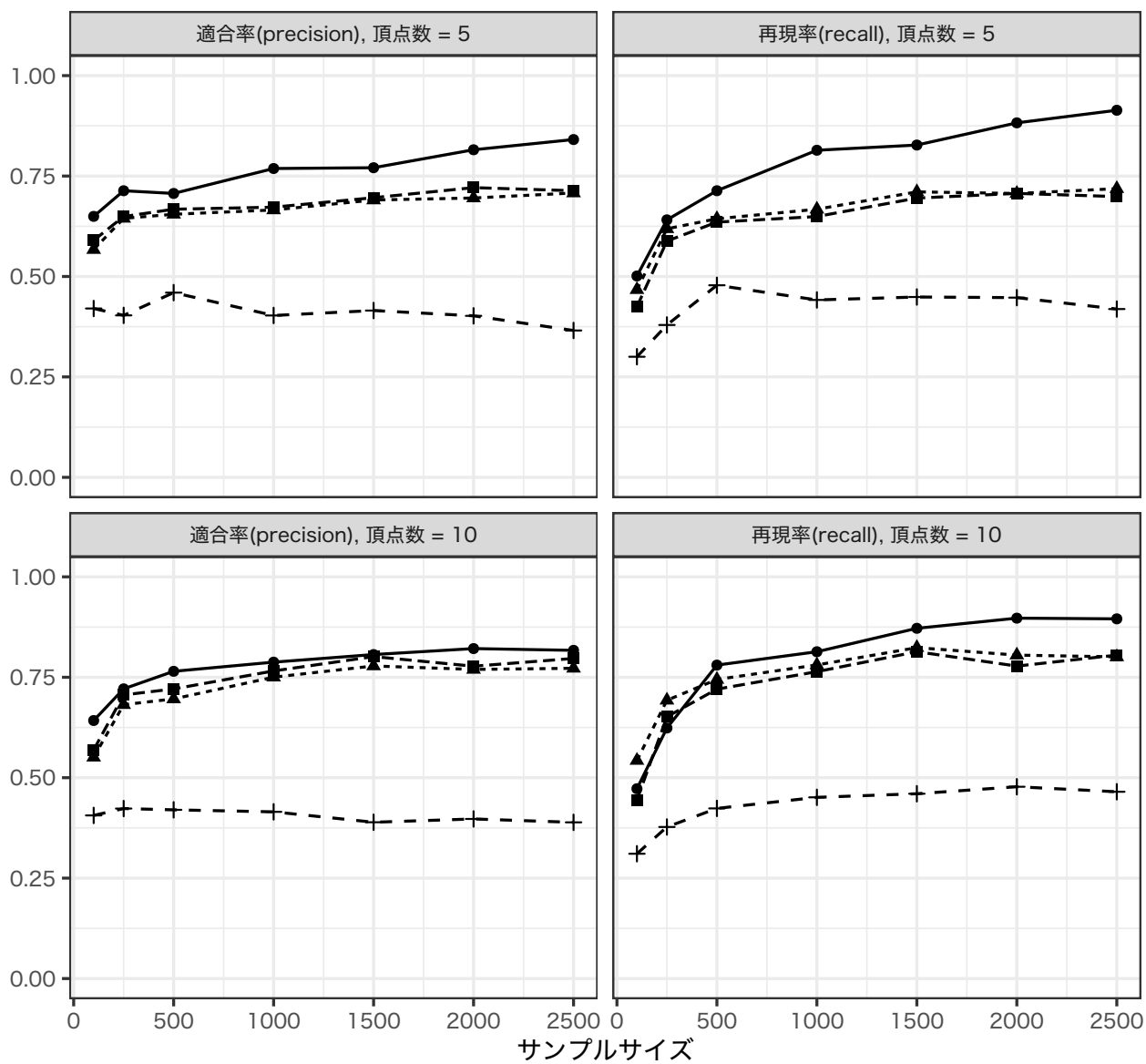


図5 連続変数の誤差変数が正規分布に従う提案モデルにおける各アルゴリズムの精度比較

● 提案アルゴリズム ▲ · GES ■ · MMHC + DirectLiNGAM

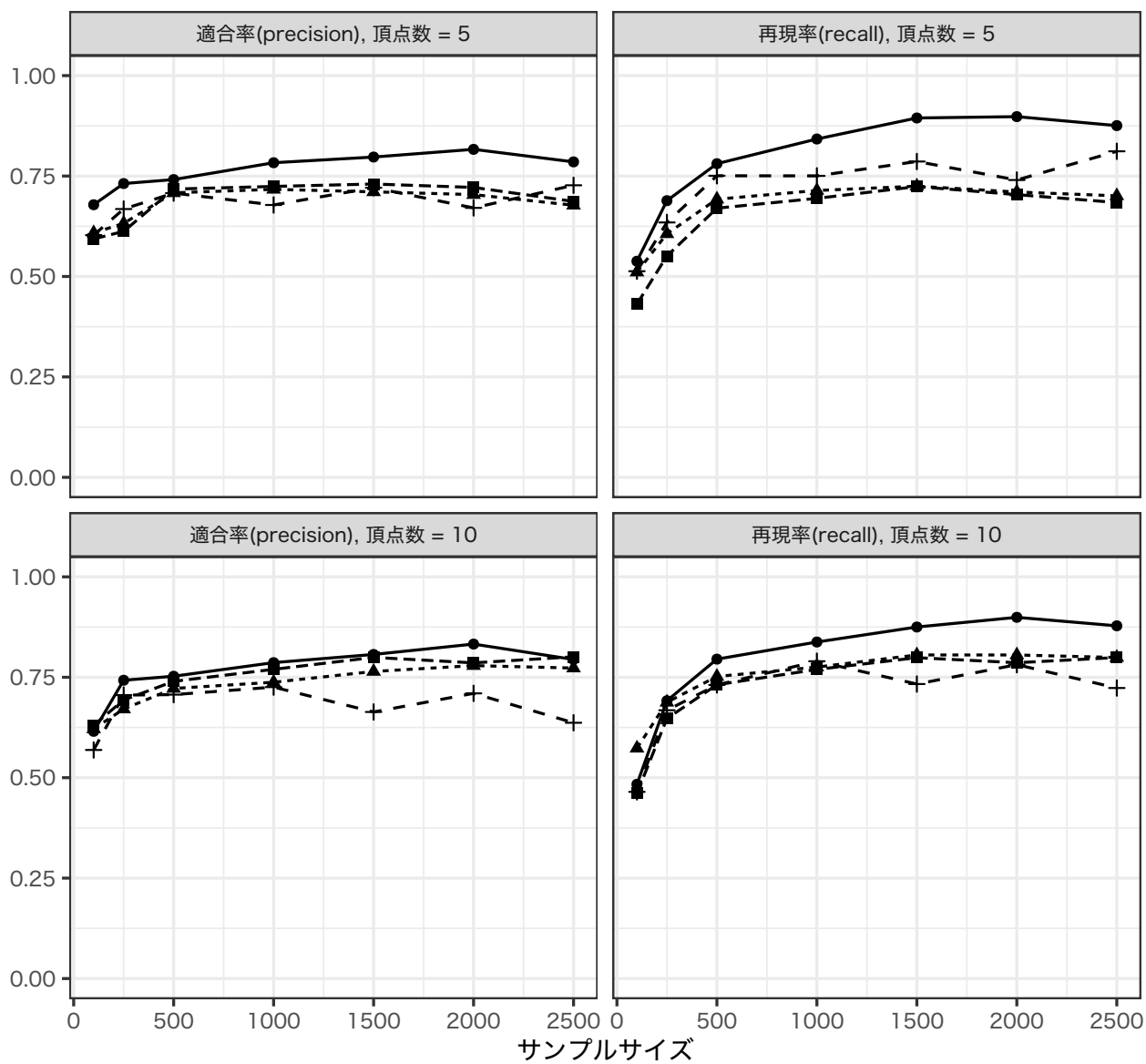


図6 連続変数の誤差変数が一様分布に従う提案モデルにおける各アルゴリズムの精度比較

6.3 閾値による因果順序の推定精度の影響

提案アルゴリズムは、式 (23) によるモーメント比スコア $\hat{S}(m, j)$ が閾値より小さいかどうかによって離散変数と連続変数の因果順序を推定している。そのため、閾値の設定が因果順序の推定精度に影響を与える。そこで本節では、以下の数値実験を行うことで、モーメント比スコアの閾値の設定によって因果順序の推定精度がどのように変化するかを示す。

本節の数値実験では、頂点数を $p = 5$ 、連続変数の誤差変数の分布を一様分布に固定し、分散は $\sigma_j^2 = 0.75$ とした。また、因果順序が一意に定まるように、データ生成過程のグラフ構造は図 7 とした。四角形で表した頂点 X_1, X_3, X_5 に離散変数を割り当て、各変数の条件付き分布はポアソン分布に従うこととした。真の因果順序において、離散変数と連続変数が交互に現れるため、閾値の設定が因果順序の推定精度に最も影響を与えられと考えられる。なお、サンプルサイズや各頂点間の関係性の強さのパラメータ θ_{jk} 、定数項 θ_j は、6.1 節に記載の内容と同じとした。

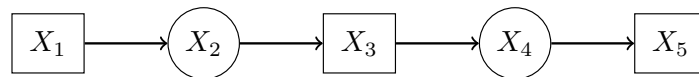


図 7 閾値による因果順序の推定精度を測定する数値実験におけるグラフ構造

閾値は $\{1.000, 1.002, \dots, 1.050\}$ とし、それぞれ 100 回ずつデータ生成と因果順序の推定を繰り返した。因果順序の推定精度は、正解率 (Accuracy) によって測定した。正解率の算出方法は以下の通りである。

- 正解率 (Accuracy)

$$\frac{\text{因果順序が正しく推定された回数}}{\text{繰り返し回数}}$$

数値実験の結果を図 8 に示す。ここで折れ線の周囲の網掛けは正解率の 95% 信頼区間を表す。サンプルサイズ $\{100, 200\}$ ではどの閾値でも正解率が 0.25 以下で、閾値による因果順序の推定精度への影響は見られなかった。一方、サンプルサイズ 500 以上では、閾値の範囲 $[1.01, 1.02]$ において正解率が高い。つまり、離散変数と連続変数の因果順序を推定する際の閾値は、範囲 $[1.01, 1.02]$ で設定することが望ましいと言える。

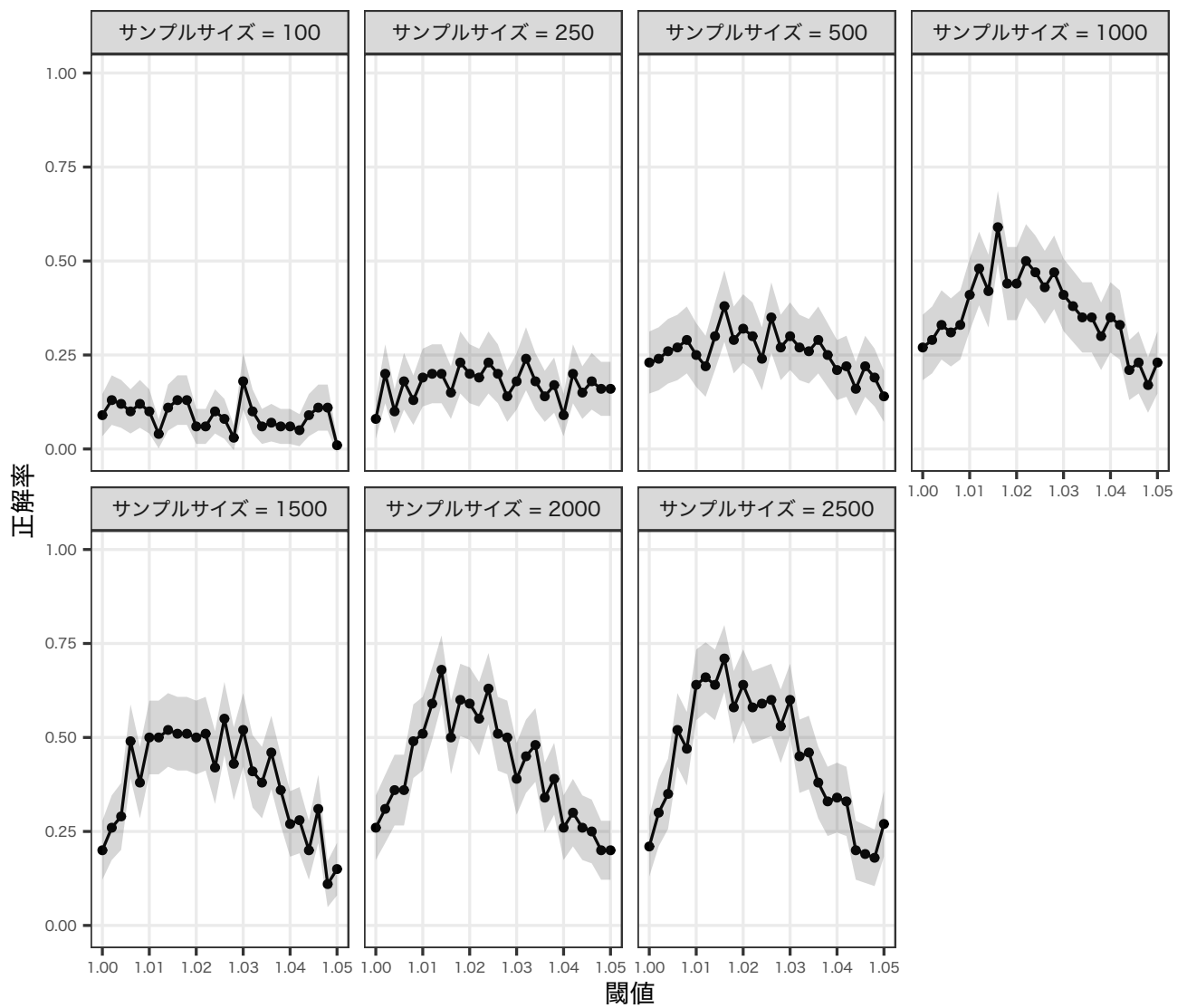


図8 閾値の設定と因果順序の推定精度の関係

7 結論

マーケティング・リサーチでは消費者行動の因果関係に関する情報を得るために、定性調査や定量調査などが行われ、様々な分析手法が用いられてきた。通常、因果関係を評価するためにはランダム化比較試験を中心とした実験研究が必要であるが、実験を行うことが難しい場合や非常に多くのコストがかかる場合が多い。そのため、観察研究によって因果関係を評価する必要があるが、観察データでは相関関係しか得られないため、因果効果の大きさの推定や因果構造の復元は困難である。しかし、統計的因果探索の分野の研究成果により、観察データから因果構造を復元できる条件や方法が明らかとなっている。

7.1 本研究の成果

本研究では、従来から提案されている統計的因果探索のモデル・手法を基礎に、マーケティング・リサーチで扱う離散変数と連続変数の両方が混在するモデルを提案し、その識別可能条件と推定アルゴリズムを示した。具体的には、連続変数のデータ生成過程を親変数と誤差変数の線形和で表現し、離散変数のデータ生成過程を一般化線形モデル (GLM) で表現した。ただし、離散変数の生成過程は、2次分散関数性を満たす確率分布 (分散が期待値の2次式で表せる分布) に従うものとした。2次分散関数性を満たす確率分布には、二項分布やポアソン分布、負の二項分布などが含まれており、商品の購買回数や購入回数などマーケティング・リサーチで扱うカウントデータを扱うことが可能である。また、連続変数が割り当てられた任意の頂点とその子孫のうち連続変数が割り当てられた頂点のデータ生成過程における誤差変数の分散について、定理 4.3 の仮定 (A) の大小関係が成立する場合、提案モデルは識別可能であることを証明した。更に、提案モデルが識別可能条件を満たす時に、因果順序や DAG の構造、モデルのパラメータを推定するアルゴリズムを提案した。

数値実験では、識別可能な提案モデルに従ってデータを生成し、提案アルゴリズムと既存アルゴリズムの推定精度の比較を行った。その結果、提案モデルは経験的にも識別可能であり、提案アルゴリズムは既存アルゴリズムよりも推定精度が高いことを示した。

提案アルゴリズムには、離散変数と連続変数の因果順序を求める際の閾値に関する調整パラメータが存在する。そのため、閾値の設定によっては因果順序や DAG の推定精度に影響を与えることが考えられる。そこで数値実験を行うことで、範囲 $[1.01, 1.02]$ で閾値を設定すると因果順序の推定精度が高くなることを示した。

7.2 マーケティング・リサーチにおける統計的因果探索の応用法

本節では、マーケティング・リサーチにおいて本論文で提案したモデルを含む統計的因果探索を活用する方法について述べる。マーケティング・リサーチでは、企業のマーケティング課題に合わせて調査課題を設定し、リサーチの設計、データの収集・分析が行われる。「データ分析」の主な目的は、「調査課題の設定」の際に立てた仮説を検証することであるが、消費者行動に関する因果構造は複雑であるため、仮説が明確になっていないことや仮説を絞りきれていないことが多い。そのため、仮説検証型の分析だけでなく仮説探索型の分析も行う必要がある。仮説探索型の分析では、データにおける相関関係などを確認しながら、分析者の経験や事前知識によって「検証すべき因果仮説」を構築していく。しかし、分析者の事前知識が不十分である場合や疑似相関が多く含まれる場合など、分析に非常に長い時間がかかる。そこで、本論文で提案したモデルを含む統計的因果探索を用いると、観測データにおける因果構造が DAG として推定されるため、推定された DAG を元に効率的に因果仮説を構築することが可能になると考えられる。また、DAG は多変量のデータの関係性を直感的に表現できるため、分析において仮定している因果構造の認識をリサーチに関わるメンバー間で共有することが容易になると考えられる。

しかし、マーケティング・リサーチにおいて統計的因果探索を利用することには注意すべき点もある。1つ目は、本論文の提案モデルを含む多くの統計的因果探索の手法では、未観測共通原因がないことを仮定していることである。つまり、捉えようとしている因果構造に関係する変数を網羅的に観測している必要がある。そのため、「リサーチの設計」の際にリサーチに関わるメンバー同士で、どのようなデータを聴取・収集する必要があるかを十分に議論する必要があると言える。2つ目は、統計的因果探索が必ず真の因果構造を推定できるとは限らないことである。例えば、実際のデータを統計的因果探索を用いて分析すると、マーケティングの背景理論と合致しない DAG が推定される可能性がある。先述の通り統計的因果探索は、データ生成過程に対する条件が成立しているという仮定の下で、元の因果構造を推測する手法である。そのため、データ生成過程に対する条件が成立していなければ、因果構造を復元することは保証されていない。そういった問題を解決するための手段の1つとして、因果構造を推定する際に背景知識を取り入れて推定を行うことが挙げられる。「変数 X は変数 Y の直接的な原因にはならない」などの背景知識を取り入れて因果順序を推定することなどが提案されている [17]。また、背景理論と合致しない場合、どの部分が合致していないのか、なぜ合致していないのかなどを推定された DAG を用いて議論することも消費者行動に関する因果仮説を構築するために重要なことであると言える。

7.3 今後の課題

最後に今後の課題について述べる。まず、本論文で提案したモデル・手法を実際のマーケティング・リサーチで得られたデータに適用することで、有用な因果仮説が得られるかどうかを確認することである。ただし、「有用な因果仮説」は企業やブランドのマーケティング課題によって変化するため、単純に背景理論と合致するかどうかなどで評価することはできないと考えられる。そのため、実際にマーケティング・リサーチの実務において、提案モデルを用いて因果仮説構築を行った事例を重ね、実務家からの意見を聞くことが必要である。

理論的な視点では、識別可能条件が成立していることを検証する手法の開発や、識別可能条件の緩和が挙げられる。本論文で示した提案モデルの識別可能条件は、連続変数のデータ生成過程における誤差変数の分散の大小に関する強い条件である。通常、データの分散は観測したデータのスケールに依存する。そのため、観測したデータの単位を変えるだけで、識別可能性が変化する可能性がある。さらに、観測データにおいてこの条件が成立しているかどうかを検証する方法は、筆者の知る限りでは存在しない。

次に、ゼロ過剰ポアソン分布などのゼロが多く含まれるカウントデータを扱うモデルの開発が挙げられる。例えば、購買データにおける「ある商品 A の購買回数」といったデータには、0 回というデータが非常に多く含まれ、0 回の人と 1 回以上の人ではデータ生成過程が異なると考えられる。0 回の方は、商品 A が属するカテゴリを購買しない人である場合や、近隣の店頭で販売されていないなどで入手できない人である場合などである。マーケティング・リサーチにおける行動データにはこのようなデータが多いため、ゼロ過剰ポアソン分布などを扱えるようにモデルを拡張することで、行動データに関する因果構造の推定などにおける活用の機会が広がると考えられる。

最後に、未観測共通原因がある場合でも適用可能な連続・離散混合モデルの研究が挙げられる。通常、未観測共通原因が存在する観測変数間の因果構造を推定することは困難である。しかし、マーケティング・リサーチでは、人間の行動をアンケート調査データや購買データなどによって観測しているため、未観測な事項が多い。例えば、消費者が商品を選ぶまでに触れた広告や情報、商品を選んだ時の感情などは通常観測できない。そのため、今後、未観測共通原因が存在しないという仮定を緩和することで、統計的因果探索の手法を用いて効率的に消費者行動の因果仮説を構築できるようになると考えられる。

謝辞

本研究活動および論文の執筆にあたり、終始適切な助言を賜り、丁寧に指導してくださった清水昌平先生に感謝申し上げます。研究を初めた当初は、統計的因果推論に関する知識は全くない状態でしたが、ゼミにおける輪読会にて真摯にコメントいただいたり、外部講師を招いた研究会を開催いただいたりしたことで、分野の理解を深めることができました。また、副指導教員を引き受けてくださった伊達平和先生には、中間報告会などにおいて研究内容の意義に対する貴重な助言をいただきました。感謝申し上げます。さらに、日頃のゼミにおいて理論に関して丁寧な指導をしてくださった青山学院大学経営学部の保科架風先生に感謝申し上げます。

そして、社会人派遣学生として送り出してくださった株式会社マクロミルの皆様に感謝いたします。特に、「社会人を数年間経験してからいつか大学院に進学したい」という自身の希望を聞き入れ、派遣を推薦してくださった西部君隆さん、派遣期間中に様々なご支援をいただいた小笠原道明さん、論文執筆中の諸業務を調整いただいた丸雄太さんに心から感謝いたします。

最後になりましたが、2年間の学生生活を共に切磋琢磨したデータサイエンス研究科修士課程第1期生の皆様、清水研究室の皆様に感謝いたします。

参考文献

- [1] American marketing association. what is marketing? — the definition of marketing —. <https://www.ama.org/the-definition-of-marketing-what-is-marketing/>. Accessed: 2020-12-21.
- [2] D. M. Chickering. Optimal structure identification with greedy search. *J. Mach. Learn. Res.*, 3(Nov):507–554, 2002.
- [3] A. S. C. Ehrenberg. The pattern of consumer purchases. *J. R. Stat. Soc. Ser. C Appl. Stat.*, 8(1):26–41, Mar. 1959.
- [4] D. Heckerman, D. Geiger, and D. M. Chickering. Learning bayesian networks: The combination of knowledge and statistical data. *Mach. Learn.*, 20(3):197–243, Sept. 1995.
- [5] P. Hoyer, D. Janzing, J. M. Mooij, J. Peters, and others. Nonlinear causal discovery with additive noise models. *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, 2008.
- [6] M. Kalisch and P. Bühlmann. Estimating High-Dimensional directed acyclic graphs with the PC-Algorithm. *J. Mach. Learn. Res.*, 8(22):613–636, 2007.
- [7] C. Li and S. Shimizu. Combining linear Non-Gaussian acyclic model with logistic regression model for estimating causal structure from mixed continuous and discrete data. Feb. 2018.
- [8] G. Park. Identifiability of additive noise models using conditional variances. *J. Mach. Learn. Res.*, 21(75):1–34, 2020.
- [9] G. Park and S. Park. High-Dimensional poisson structural equation model learning via ℓ_1 -Regularized regression. *J. Mach. Learn. Res.*, 20(95):1–41, 2019.
- [10] G. Park and G. Raskutti. Learning Large-Scale poisson DAG models based on OverDispersion scoring. In C. Cortes, N. D. Lawrence, D. D. Lee, M. Sugiyama, and R. Garnett eds., *Advances in Neural Information Processing Systems 28*, pp. 631–639. Curran Associates, Inc., 2015.
- [11] G. Park and G. Raskutti. Learning quadratic variance function (QVF) DAG models via overdispersion scoring (ODS). *J. Mach. Learn. Res.*, 18(1):8300–8342, Jan. 2017.
- [12] J. Pearl. *Causality: Models, Reasoning and Inference*. Cambridge University Press, USA, 2nd edition, 2009.
- [13] J. Peters and P. Bühlmann. Identifiability of gaussian structural equation models with equal error variances. *Biometrika*, 101(1):219–228, Nov. 2013.
- [14] J. Peters, D. Janzing, and B. Schölkopf. Causal inference on discrete data using additive

- noise models. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, 33(12):2436–2450, Dec. 2011.
- [15] J. Peters, J. M. Mooij, D. Janzing, and B. Schölkopf. Causal discovery with continuous additive noise models. *J. Mach. Learn. Res.*, 15(58):2009–2053, 2014.
- [16] S. Shimizu, P. O. Hoyer, A. Hyvärinen, and A. Kerminen. A linear Non-Gaussian acyclic model for causal discovery. *J. Mach. Learn. Res.*, 7(Oct):2003–2030, 2006.
- [17] 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. *J. Mach. Learn. Res.*, 12:1225–1248, 2011.
- [18] I. Tsamardinos, L. E. Brown, and C. F. Aliferis. The max-min hill-climbing bayesian network structure learning algorithm. *Mach. Learn.*, 65(1):31–78, Oct. 2006.
- [19] H. R. Varian. Causal inference in economics and marketing. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 113(27):7310–7315, July 2016.
- [20] W. Wenjuan, F. Lu, and L. Chunchen. Mixed causal structure discovery with application to prescriptive pricing. In *Proceedings of the 27th International Joint Conference on Artificial Intelligence*, pp. 5126–5134. ijcai.org, 2018.
- [21] J. Zhang and P. Spirtes. Intervention, determinism, and the causal minimality condition. *Synthese*, 182(3):335–347, Oct. 2011.
- [22] K. Zhang and A. Hyvarinen. On the identifiability of the Post-Nonlinear causal model. May 2012.
- [23] H. Zou. The adaptive lasso and its oracle properties. *J. Am. Stat. Assoc.*, 101(476):1418–1429, Dec. 2006.
- [24] 久保拓弥. データ解析のための統計モデリング入門: 一般化線形モデル・階層ベイズモデル・MCMC. 岩波書店, May 2012.
- [25] 萩生田, 繁榘. 順序付きカテゴリカルデータへの因子分析の適用に関するいくつかの注意点. *心理学研究*, 67(1):1–8, 1996.
- [26] 佐藤忠彦. マーケティングの統計モデル. 朝倉書店, Aug. 2015.
- [27] 宮川雅巳. 統計的因果推論: 回帰分析の新しい枠組み. 朝倉書店, Mar. 2004.
- [28] 星野崇宏, 上田雅夫. マーケティング・リサーチ入門. 有斐閣, Dec. 2018.
- [29] 森岡毅, 今西聖貴. 確率思考の戦略論: USJ でも実証された数学マーケティングの力. KADOKAWA, May 2016.
- [30] 清水昌平. 統計的因果探索. 講談社, May 2017.
- [31] 照井伸彦, ウィラワン・ドニ・ダハナ, 伴正隆. マーケティングの統計分析. 朝倉書店, Sept. 2009.

[32] 片平秀貴. マーケティング・サイエンス. 東京大学出版会, 1987.

[33] 音部大輔. マーケティングプロフェッショナルの視点. 日経 BP, Apr. 2019.