

量子カーネルの少数データ非線形因果探索への応用

ソニーグループ株式会社 デジタル&テクノロジープラットフォーム 統合戦略部門 先端研究部
慶應大学量子コンピューティングセンター 共同研究員
手塚 宙之

共同研究者：

慶應大学量子コンピューティングセンター(当時) 川口 英明

ソニーグループ株式会社 先端研究部 荒井 謙、上野 比呂至、田中 雄、寺田 裕、前田 洋太(当時)

Contents

1. 因果推論について

2. カーネル法を用いた独立性検定

独立性検定とは

カーネル法とは

量子カーネルへの拡張

“量子カーネルを用いた独立性検定”

3. PCアルゴリズムへの応用と因果探索

PC algorithmの概要

統計検定の考え方

KCITについて

“量子カーネルを用いた非線形因果探索”

4. まとめ

Contents

1. 因果推論について

2. カーネル法を用いた独立性検定

独立性検定とは

カーネル法とは

量子カーネルへの拡張

“量子カーネルを用いた独立性検定”

3. PCアルゴリズムへの応用と因果探索

PC algorithmの概要

統計検定の考え方

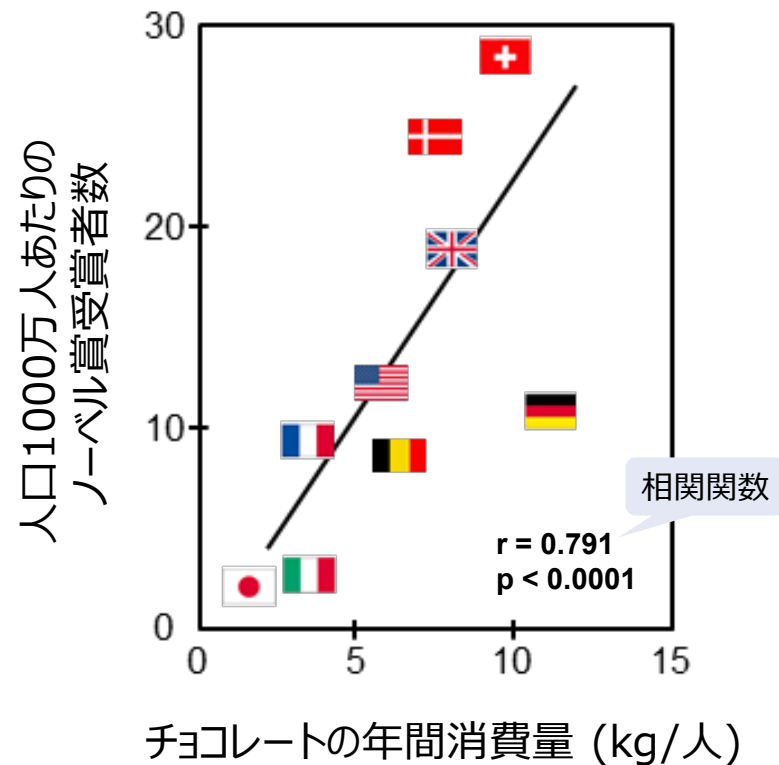
KCITについて

“量子カーネルを用いた非線形因果探索”

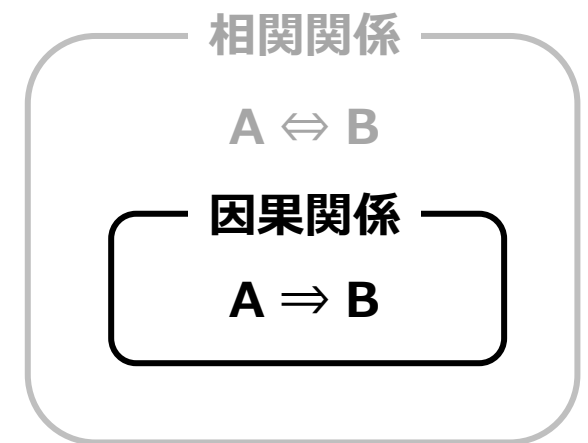
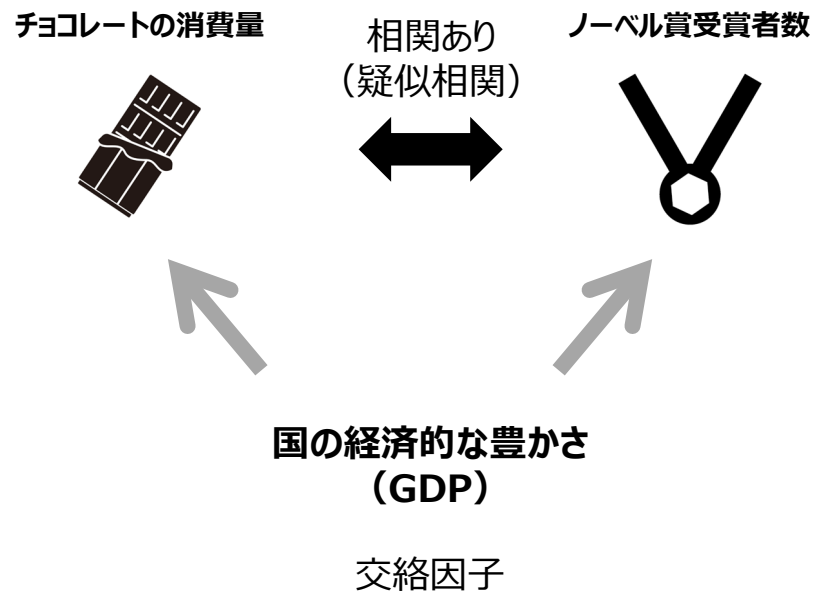
4. まとめ

“因果”と“相関”の違い

チョコレートとノーベル賞の関係



[New England Journal of Medicine \(2012\)](#)



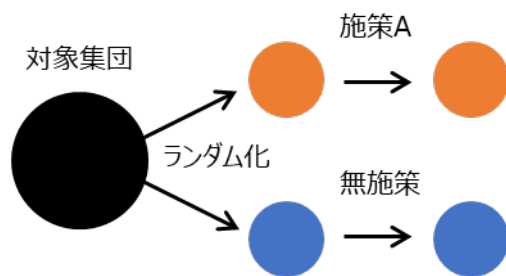
“因果”は“相関”よりも強い概念であり、意思決定には因果が重要

因果推論の推定対象

因果推論

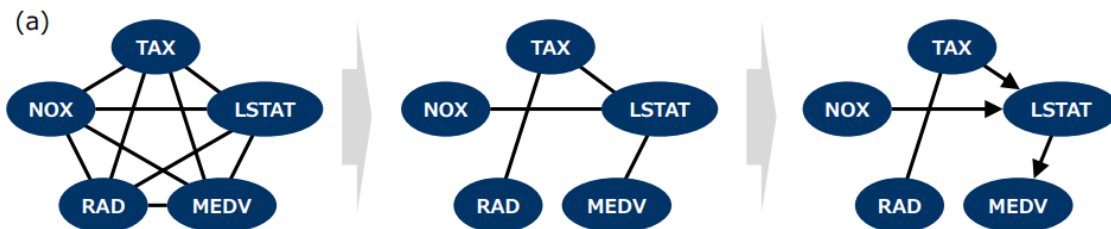
因果効果推定：因果の方向は**既知**、効果の有無を推定

(統計的検定論)



例：
ランダム化対照実験（RCT） for 治験
A/Bテスト for webマーケティング

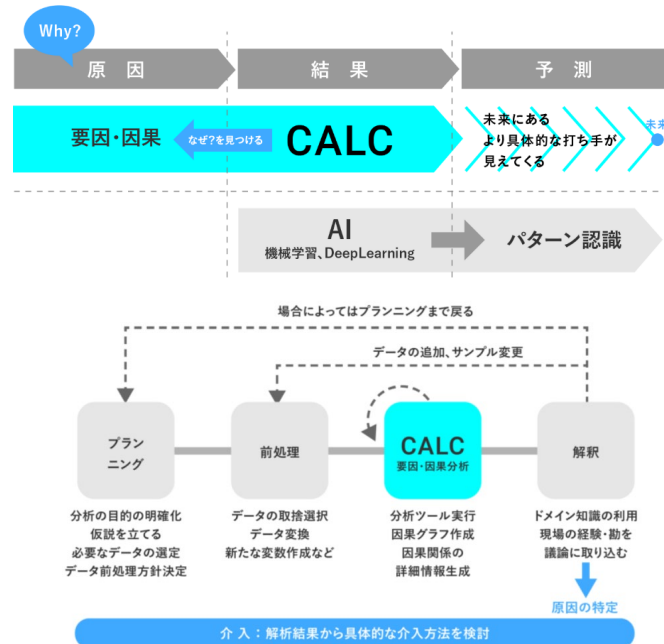
因果探索：因果の**方向**と**強さ**を推定



例：
LiNGAM: 線形性を仮定
NOTEARs: 非線形かつ非ガウス分布へ適用可
GESアルゴ: スコアベース（BICを利用）
...
etc.

因果推論の歴史は深く、数多くの手法が提案されている

ビッグデータ/AIの波に乗ってサービスが林立



クウジツ株式会社 | 要因・因果分析「CALC」

2025年1月27日
株式会社hootfolio
BIRD INITIATIVE株式会社
日本電気株式会社

データから物事の原因と結果の関係を見える化し、意思決定を支援する因果分析AIソリューション「causal analysis(コーザル アナリシス)」を提供する株式会社hootfolio(フートフォリオ、以下 hootfolio)が、本年1月1日に事業を開始しました。hootfolioは、NECの事業イノベーションプロセスを経て、NECからカーブアウトしました。これにあたり、企業の新事業創出を支援するBIRD INITIATIVE株式会社(以下BIRD INITIATIVE、注1)の協力を得ています。

キードライバーを解き明かすCausal AI

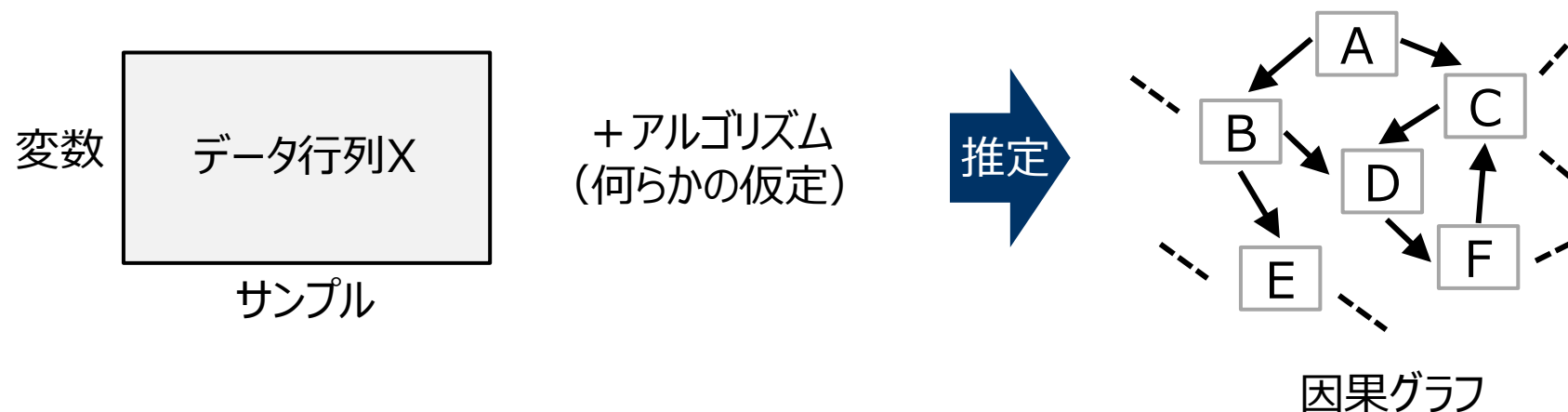


因果関係を構造的に捉え、KPI達成/課題改善の原因に効果的にアプローチできる

[hootfolio | 因果分析AI-causal analysis](#)

しかし、データ数が足りず使いたくても使えないという声もある

「少量のデータで因果探索を行うアルゴリズムの開発」



Contents

1. 因果推論について

2. カーネル法を用いた独立性検定

独立性検定とは

カーネル法とは

量子カーネルへの拡張

“量子カーネルを用いた独立性検定”

3. PCアルゴリズムへの応用と因果探索

PC algorithmの概要

統計検定の考え方

KCITについて

“量子カーネルを用いた非線形因果探索”

4. まとめ

Quantum Machine Intelligence (2025) 7:29
<https://doi.org/10.1007/s42484-025-00263-7>

RESEARCH



Estimation of mutual information via quantum kernel methods

Yota Maeda^{1,2} · Hideaki Kawaguchi² · Hiroyuki Tezuka^{1,2}

Received: 7 May 2024 / Accepted: 15 February 2025
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature Switzerland AG 2025

Abstract

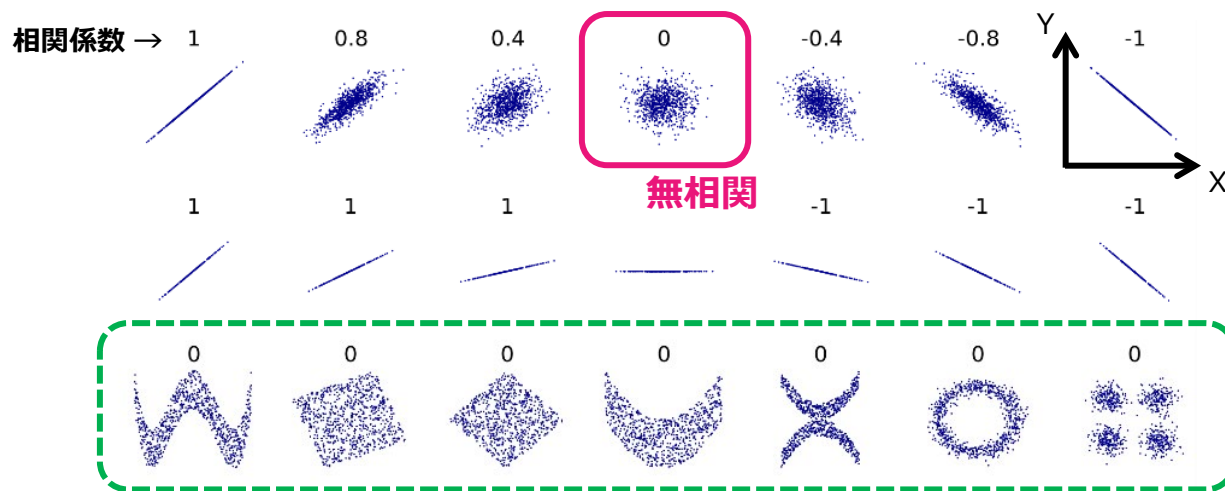
Recently, the importance of analyzing data and collecting valuable insight efficiently has been increasing in various fields. Estimating mutual information (MI) plays a critical role in investigating the relationship among multiple random variables with a nonlinear correlation. Particularly, the task to determine whether they are independent or not is called the independence test, whose core subroutine is estimating MI from given data. It is a fundamental tool in statistics and data analysis that can be applied in a wide range of applications such as hypothesis testing, causal discovery, and more. In this paper, we propose a method for estimating mutual information using the quantum kernel. We investigate the performance under various problem settings, such as different sample sizes or the shape of the probability distribution. As a result, the quantum kernel method showed higher performance than the classical one under the situation that the number of samples is small, the variance is large or the variables possess highly non-linear relationships. We discuss this behavior in terms of the central limit theorem and the structure of the corresponding quantum reproducing kernel Hilbert space.

Keywords Mutual information · Independence test · Causal analysis · Quantum kernel

[Estimation of mutual information via quantum kernel methods](#)
[| Quantum Machine Intelligence 7, 29 \(2025\)](#)

独立性検定とは

- 因果推論の基礎となるサブルーチン
- “独立”という事象を適切に識別するための統計検定
- 相関係数は、変数間の関係が線形の場合のみ有効
- もっと有効な指標はないか？



2変数の分布と相関係数の対応

相関なし???

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%94%E3%82%A2%E3%82%BD%E3%83%B3%E3%81%AE%E7%A9%8D%E7%8E%87%E7%9B%B8%E9%96%A2%E4%BF%82%E6%95%B0>

非線形でも使える独立性指標の例

- ✓ MI (Mutual Information; 相互情報量)

$$MI(X, Y) = \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} p_{XY}(x, y) \log \frac{p_{XY}(x, y)}{p_X(x)p_Y(y)} dx dy$$

- ✓ HSIC (Hilbert-Schmidt Independence Criterion)

$$HSIC(X, Y) = \|C_{xy}\|_{HS}^2, C_{xy} \text{は共分散作用素}$$

共通する特徴

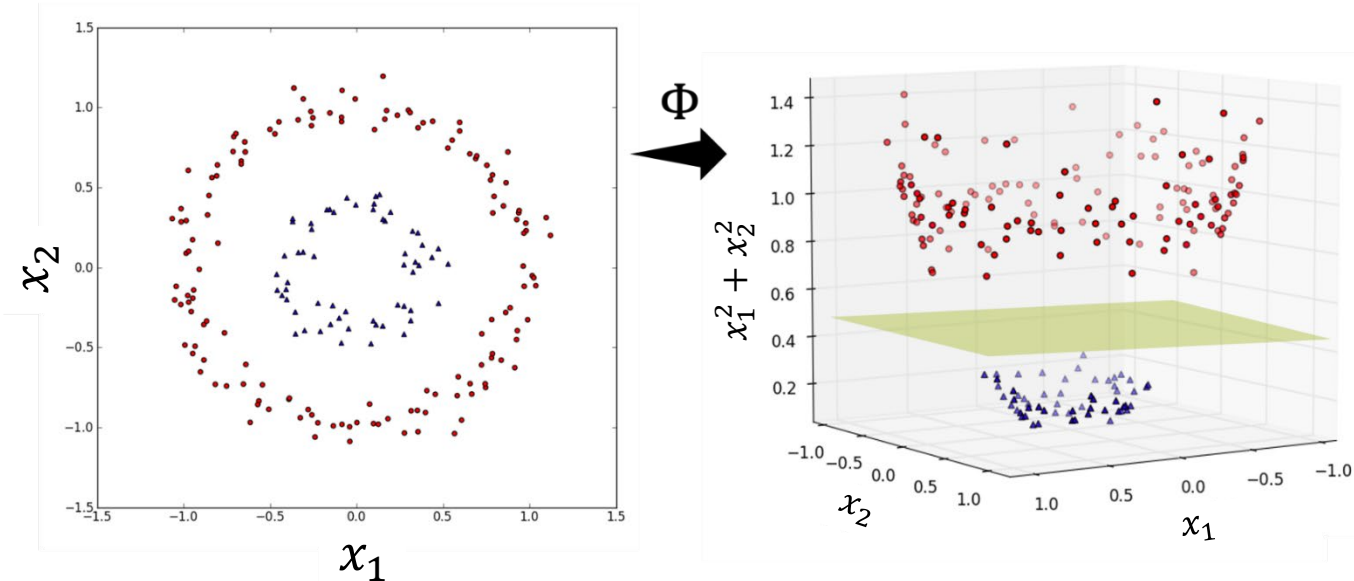
- 独立 $\Leftrightarrow 0$
- 値が大きい程、依存関係がある
- カーネル法により効率的に計算可能

カーネル法とは

非線形な特徴を持つデータを高次元空間に写像し、線形分離可能にするための手法

点群の分類の例

- 左図上の点群は線形分離不能
- 写像 $\Phi(x_1, x_2) = (x_1, x_2, x_1^2 + x_2^2)$ として右図のように変換すれば線形分離可能
- 写像後の内積（カーネル関数）
 $k(X, Y) = \Phi(X)^T \Phi(Y)$
を計算して線形分離



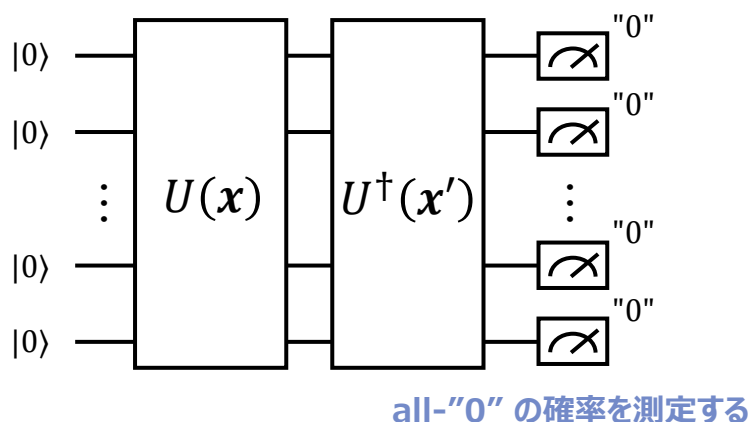
<https://cdn-ak.f.sthatena.com/images/fotolife/e/enakai00/20171013/20171013103327.png>

ポイント：

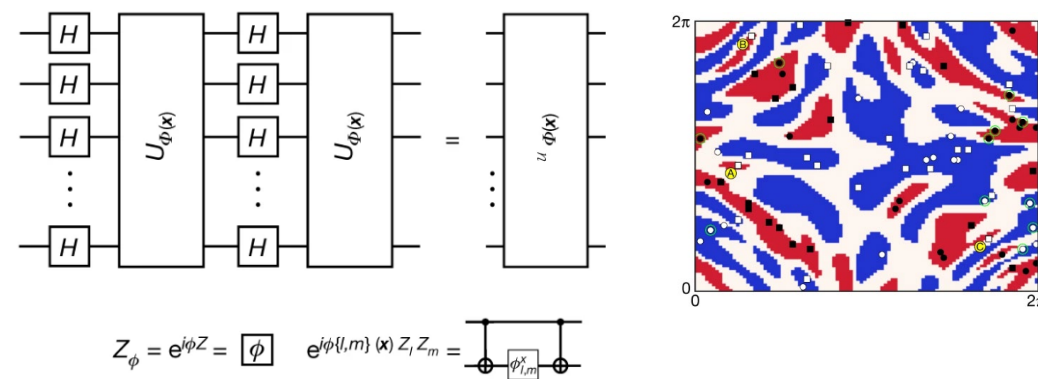
- 高次元空間の計算を陽に行わず、直接カーネル関数 $k(X, Y)$ を用いて内積を計算できる（カーネルトリック）
- 因果探索の文脈ではガウスクーネル $k(X, Y) = \exp\left(-\frac{\|X-Y\|^2}{2\sigma^2}\right)$ が標準的に用いられる

量子カーネルへの拡張

データがエンコードされた量子状態 $\rho(\cdot)$ を用いて、量子カーネル $k_Q(x, x') = \text{Tr}[\rho(x)\rho(x')]$ を定義する
量子カーネル $k_Q(x, x')$ の値はエンコード回路 $U(\cdot)$ を用いて下記の量子回路で計算が可能 (Fidelity kernel)



先行研究 : Quantum SVM [Nature](#) 567, 209–212 (2019)



ZZ feature map:
IQP回路と呼ばれ、代表的な「古典サンプリングが困難なクラス」の回路

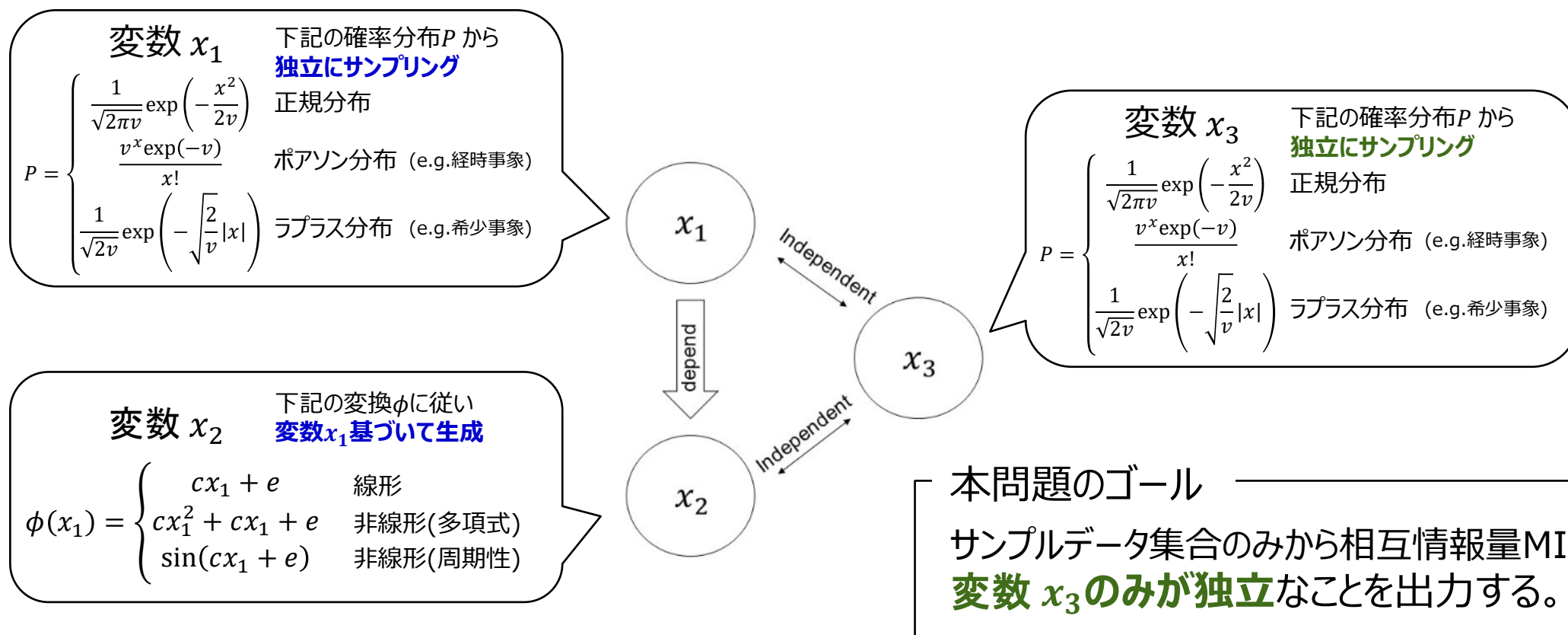
因果探索 (qLiNGAM)でも優位性の報告あり H.Kawaguchi, PLoS ONE 18(4): e0283933 (2023)

但し、断片的な実験結果のみで、優位性が出る条件の特定は不明だった

数値実験：量子カーネルを用いた独立性検定のベンチマーク

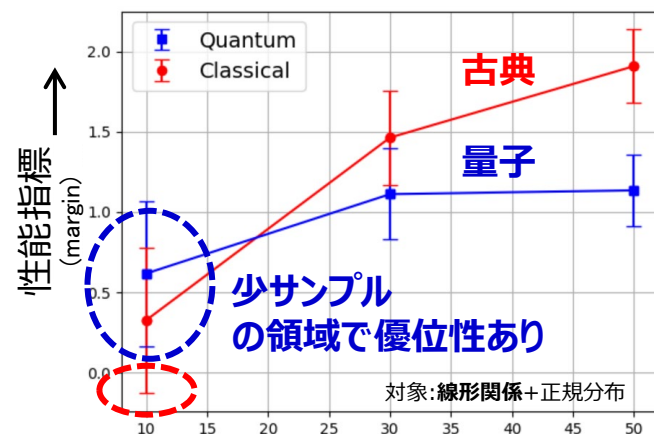
● 問題設定

- 3変数 $\{x_1, x_2, x_3\}$ を乱数から生成。但し、 x_2 は x_1 から計算される（ $x_1 \rightarrow x_2$ には因果関係あり）
- x_3 のみが“独立”という状況



数値実験：量子カーネルを用いた独立性検定のベンチマーク（MIを使用）

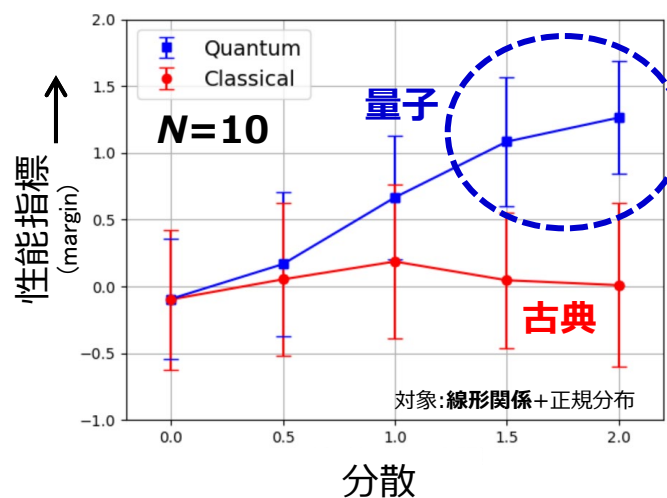
- 実験結果（サマリ）
 - ・ 少サンプル（ $N < 30$ ）
 - ・ 分散が大きい領域
 - ・ 因果関係が非線形関係 の場合に量子カーネルの方が高性能



古典手法では間違える
ケースがある (負の値)

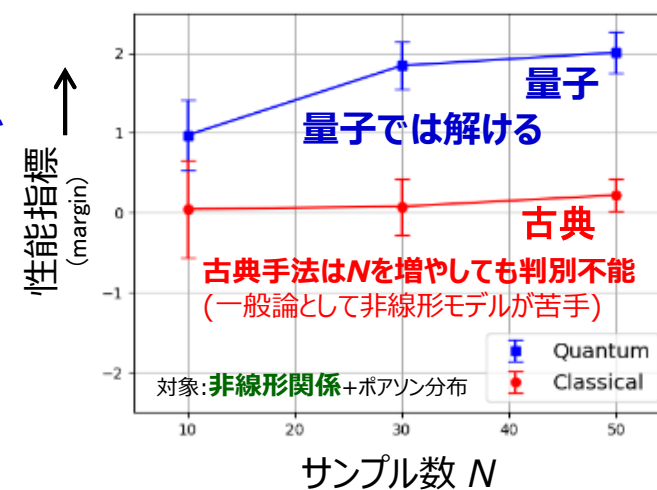
サンプル数 N

※エラーバーは100回試行で得られた標準偏差



分散が
大きい領域で
優位性あり

古典手法では
判別がつかない

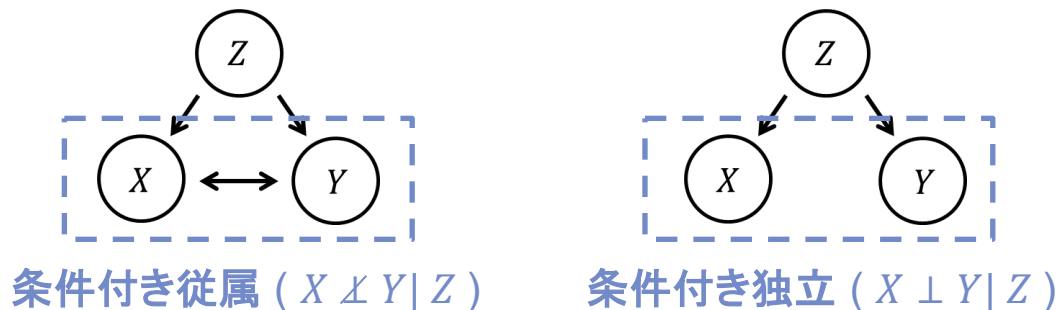


因果探索でも古典手法を凌駕する方法が構築できる！

実アプリケーションへの課題

- 相互情報量 (MI) を用いた独立性検定では **条件付き独立 ($X \perp Y | Z$)** が検出できない

「2変数では従属に見えていても、交絡因子を考慮すると独立なケース（偽相関）」



- モデルを仮定すると解析対象が限られてしまう

例: LiNGAMモデル:

$$X_j = \sum b_{ji} X_i + e_j \quad (\text{線形性を仮定})$$

実用性の高い別の方法を開発する必要がある
(非線形対応、条件付き独立性検定への対応)

Contents

1. 因果推論について

2. カーネル法を用いた独立性検定

独立性検定とは

カーネル法とは

量子カーネルへの拡張

“量子カーネルを用いた独立性検定”

3. PCアルゴリズムへの応用と因果探索

PC algorithmの概要

統計検定の考え方

KCITについて

“量子カーネルを用いた非線形因果探索”

4. まとめ

Quantum-enhanced causal discovery for a small number of samples

Yota Maeda,^{*} Ken Arai,^{*} Yu Tanaka,^{*} Yu Terada,^{*} Hiroshi Ueno, and Hiroyuki Tezuka[†]
*Advanced Research Laboratory, Research Platform, Sony Group Corporation,
1-7-1 Konan, Minato-ku, Tokyo, 108-0075, Japan*
(Dated: January 10, 2025)

The discovery of causal relationships from observed data has attracted significant interest from disciplines such as economics, social sciences, epidemiology, and biology. In practical applications, considerable knowledge of the underlying systems is often unavailable, and real data are often associated with nonlinear causal structures, which make the direct use of most conventional causality analysis methods difficult. This study proposes a novel quantum Peter-Clark (qPC) algorithm for causal discovery that does not assume any underlying model structures. Based on the independence conditional tests in a class of reproducing kernel Hilbert spaces characterized by quantum circuits, the proposed *qPC* algorithm can explore causal relationships from the observed data drawn from arbitrary distributions. We conducted extensive and systematic experiments on fundamental graph parts of causal structures, demonstrating that the qPC algorithm exhibits a significantly better performance, particularly with smaller sample sizes compared to its classical counterpart. Furthermore, we proposed a novel optimization approach based on Kernel Target Alignment (KTA) for determining hyperparameters of quantum kernels. This method effectively reduced the risk of false positives in causal discovery, enabling more reliable inference. Our theoretical and experimental results demonstrate that the proposed quantum algorithm can empower classical algorithms for robust and accurate inference in causal discovery, supporting them in regimes where classical algorithms typically fail. Additionally, the effectiveness of this method was validated using the Boston Housing dataset as a real-world application. These findings demonstrate the new potential of quantum circuit-based causal discovery methods in addressing practical challenges, particularly in small-sample scenarios where traditional approaches have shown limitations.

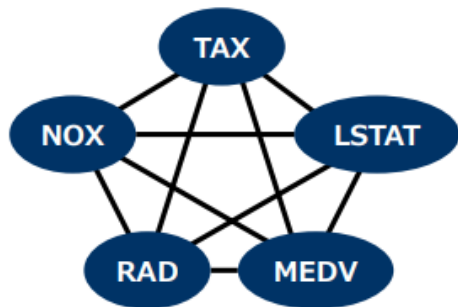
I. INTRODUCTION

[quant-ph] 9 Jan 2025

[\[2501.05007\] Quantum-enhanced causal discovery for a small number of samples](#)

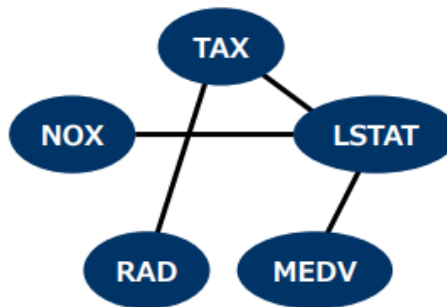
PC algorithmの概要

状態1



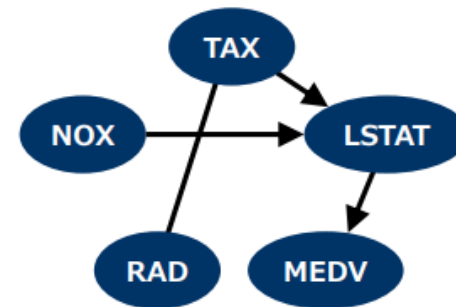
初期状態を用意
(全結合)

状態2



非独立関係の把握

状態3



DAGの完成

Step1.

独立性検定
を実行

(関係性の有無を推定)

Step2.

オリエンテーショ
ンルールを適用
(因果の向きを推定)

ここでカーネルを用いた検定を行う

(KCIT: Kernel-based Conditional Independence Test)

PC algorithmの特徴：

- 最近のSOTAの一つ
- モデルに線形性の仮定をおかない → 適用範囲が広い
- ノンパラメトリックモデル → 計算効率が高い（高次元でも少データ）

条件付き独立性検定をどう実装するか？

統計検定の考え方

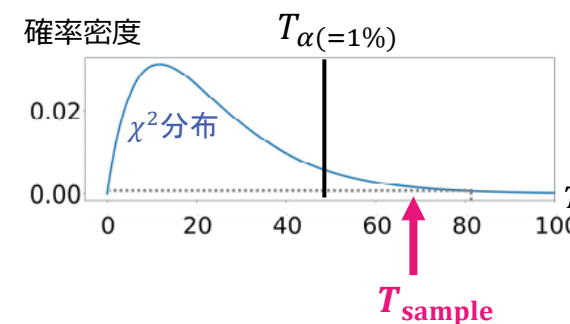
検定対象が統計量の選択に依存する

Step1: 帰無仮説（ex.「 X_i がそれぞれ独立である」という仮説）の下で着目する**統計量 T** の分布を計算する

例えば、 $T = \sum_i (X_i - E_i)^2 / E_i$ に着目すると、 T は帰無仮説の下で χ^2 分布に従うことが知られており、サンプルデータから算出される自由度 n を用いて χ^2 分布を計算する
（但し、 E_i はサンプルデータから計算される期待値）

Step2: サンプルデータを用いて統計量 T_{sample} を計算する

サンプルデータを用いて直接 $T = T_{\text{sample}}$ を計算する



Step3: 統計量 T_{sample} を有意水準 α に相当する T_α の値と比較する

右の例では、優位水準1%よりも起こる可能性が低いため、帰無仮説は棄却され「 X_i がそれぞれ独立である」という仮説が棄却された
つまり、「 X_i の間に何らかの依存関係がある」ことが示唆される

カーネル独立性検定(KCIT)について：非パラメトリックに条件付き独立性を評価する方法

- X, Y, Z は、 $\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}$ 空間の変数
- $\mathbf{K}_X, \mathbf{K}_Y, \mathbf{K}_Z$ は、 X, Y, Z から計算されたカーネル行列
- $\tilde{\mathbf{K}}_X, \tilde{\mathbf{K}}_Y, \tilde{\mathbf{K}}_Z$ は、例えば $\tilde{\mathbf{K}}_X = \mathbf{H}\mathbf{K}_X\mathbf{H}$ で計算される中心化カーネル（但し、 $\mathbf{H} = \mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T$, n はサンプル数）

条件なし独立性指標： $T_{UI} := \frac{1}{n} \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X \tilde{\mathbf{K}}_Y]$ を考える。

これは X, Y が独立という帰無仮説の下で

ガンマ分布 $p(t) = t^{k-1} \frac{e^{-t/\theta}}{\theta^k \Gamma(k)}$ に従うことが示される。

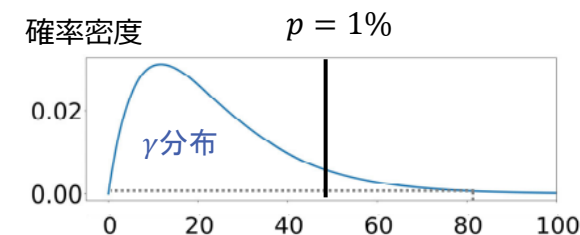
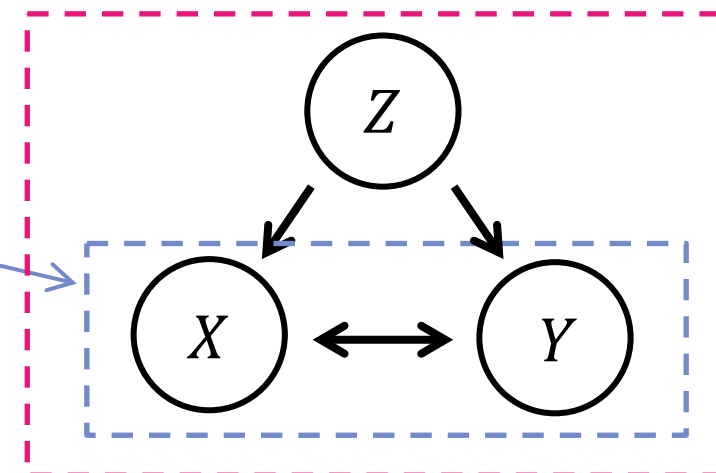
$$\text{但し、} k = \frac{\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X]^2 \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y]^2}{2\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X^2] \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y^2]}, \theta = \frac{2\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X^2] \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y^2]}{n^2 \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X] \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y]}$$

同様に条件付き独立性指標： $T_{CI} := \frac{1}{n} \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_{\check{X}|Z} \tilde{\mathbf{K}}_{Y|Z}]$ を考えると、

これも上記に類するガンマ分布に従う。

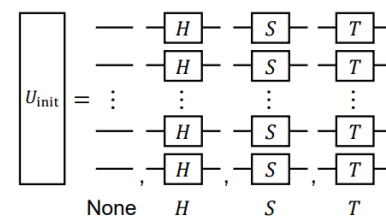
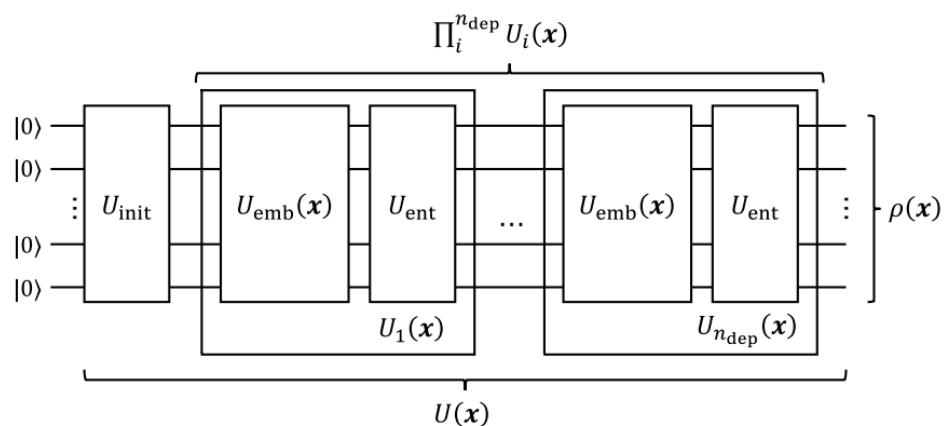
$$\text{但し、} \check{X} = (X, Z), \tilde{\mathbf{K}}_{\check{X}|Z} = \mathbf{R}_Z \tilde{\mathbf{K}}_{\check{X}} \mathbf{R}_Z, \mathbf{R}_Z = \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{K}}_Z (\tilde{\mathbf{K}}_Z + \epsilon \mathbf{I})^{-1} = \epsilon (\tilde{\mathbf{K}}_Z + \epsilon \mathbf{I})^{-1}$$

(Z に対して射影を行い Z の影響を切る操作に対応)



貢献1: 量子カーネルによるカーネル行列の計算

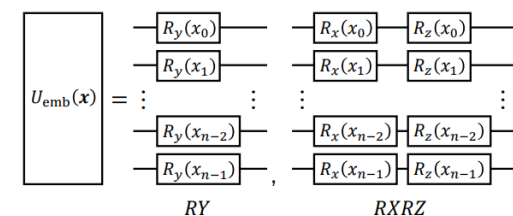
- 様々なansatz, observableを用いて性能を比較
- 安定して性能の出る Fidelity kernel, RY-CZ-circ を使用
- 量子カーネル $k_Q(x, y) = \text{Tr}[\rho(ax), \rho(ay)]$ として計算。但し、 a はKTA最適化のためのパラメタ。



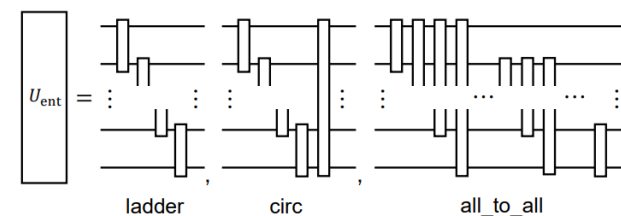
(a) Elements of the initializer



(c) Elements of the entangler



(b) Elements of the data embedder



(d) Topologies of the entangler

貢献2: 独立性検定におけるカーネル最適化: KTA(Kernel Target Alignment)

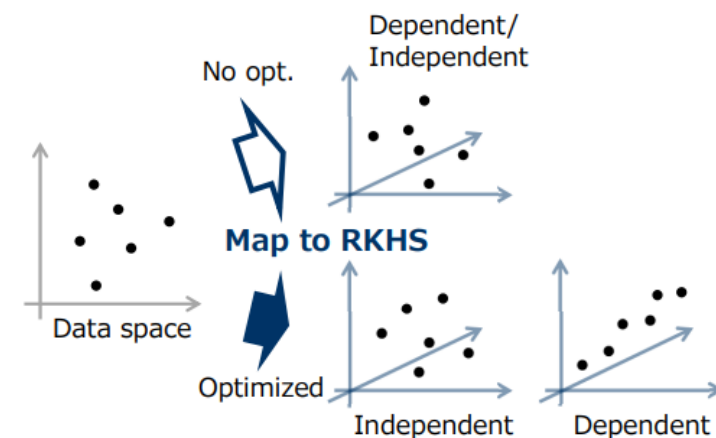
- カーネル法を用いる以上、データとの適合度が性能に直結する → データアダプティブに最適化できないか？
- カーネル法の一般論として、KTA(Kernel Target Alignment)という指標がある。
- これを独立性検定の文脈で再解釈できないか？

$$KTA(X, Y) := \frac{\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X \tilde{\mathbf{K}}_Y]}{\sqrt{\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X^2] \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y^2]}}$$

[着想] : 統計量とデータのSignal to Noise Ratio(SN比)を計算してみる。

$$\begin{aligned} \frac{S}{N} &:= \frac{\mathbb{E}[T_{UI}|\mathcal{D}]}{\sqrt{\text{Var}[T_{UI}|\mathcal{D}]}} \\ &= \frac{\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X \tilde{\mathbf{K}}_Y]}{\sqrt{\text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_X^2] \text{Tr}[\tilde{\mathbf{K}}_Y^2]}} = KTA(X, Y) \text{ と一致！} \end{aligned}$$

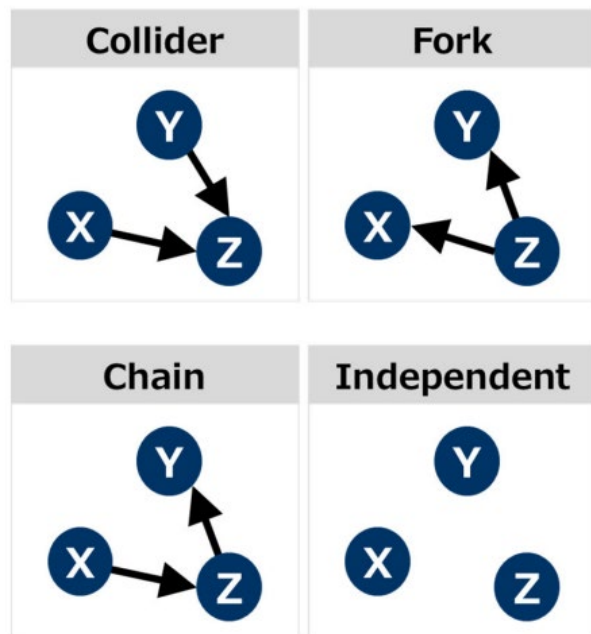
すなわち、KTAを最大化するようなカーネルを用いれば、データが良く適合する。
正確には「帰無仮説の棄却率が最大化」される（独立でないと判定されがちになる）。



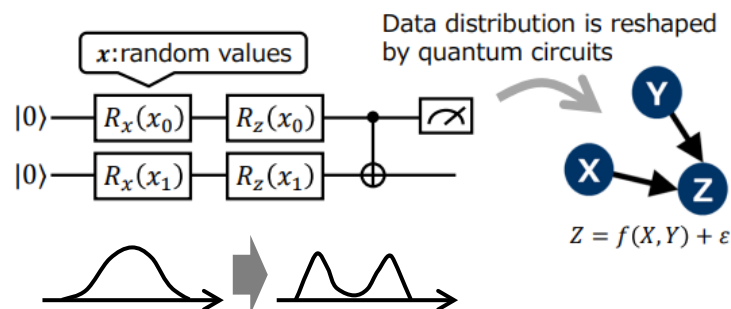
重要なのは、棄却率の最大化/最小化が制御できるという点（どちらが良いかは目的依存）

実験結果1 : Junction patternの識別

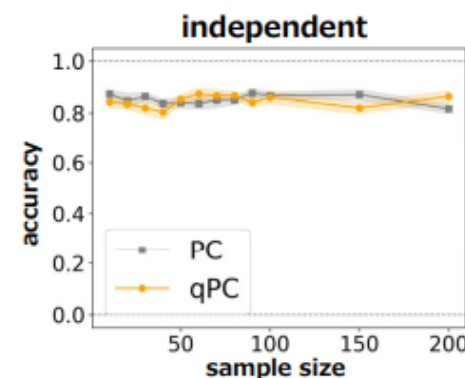
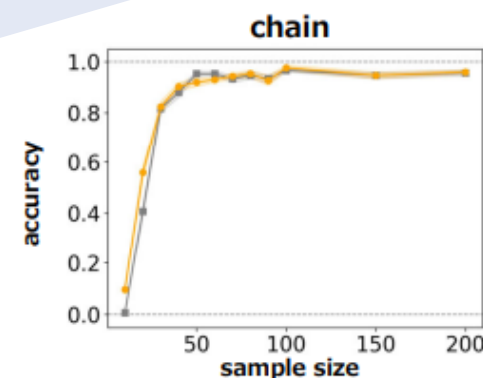
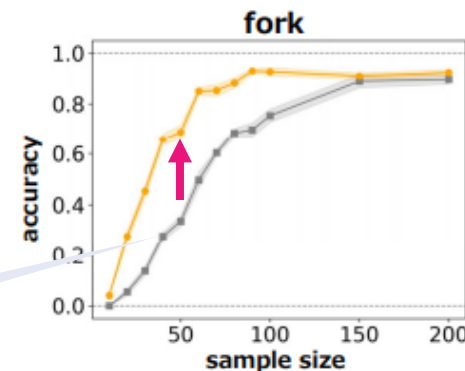
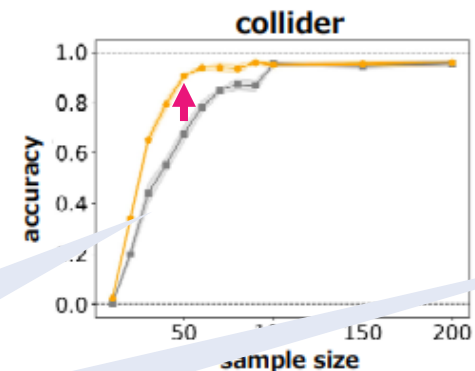
因果の基本要素
(Junction pattern)



変数の分布を量子回路で変形



測定データのみから因果構造を当てるゲームを実施
(カーネル最適化は未実施)

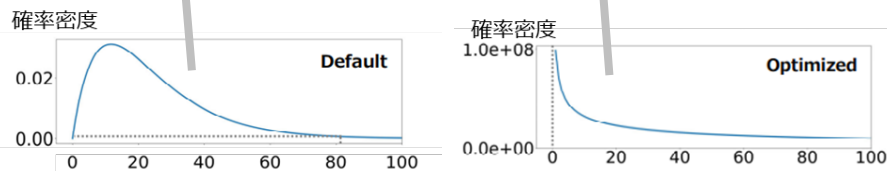
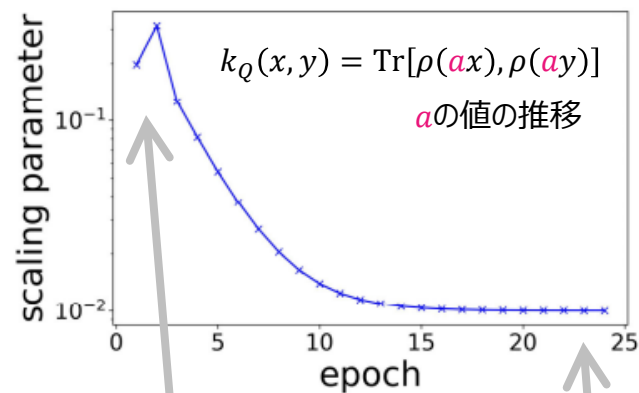
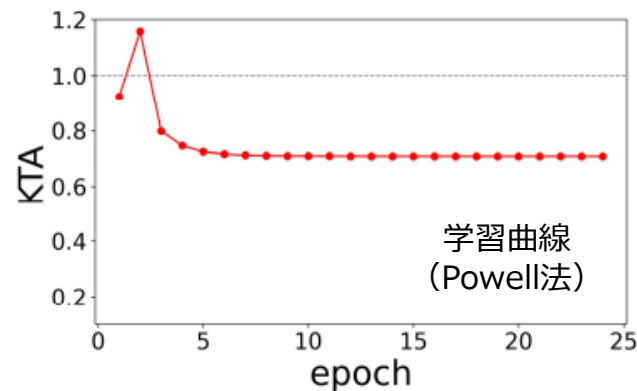


Sample size < 100 で優位な性能差あり
少なくとも、qPC が得意な問題設定の
存在が実験的に示された。

これに加えてカーネル最適化を行ったらどうなるか？

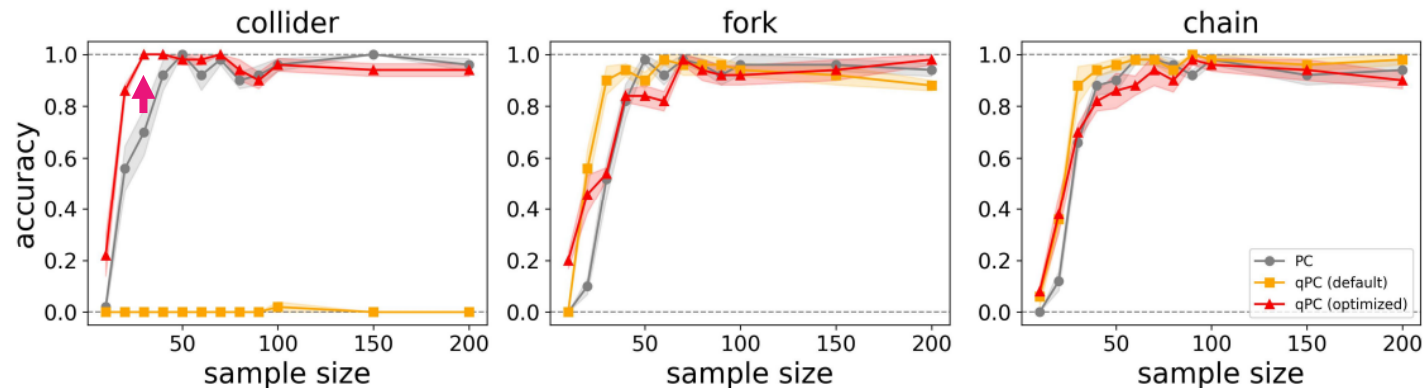
実験結果2：カーネル最適化による制御

直接法を用いた最適化を実施

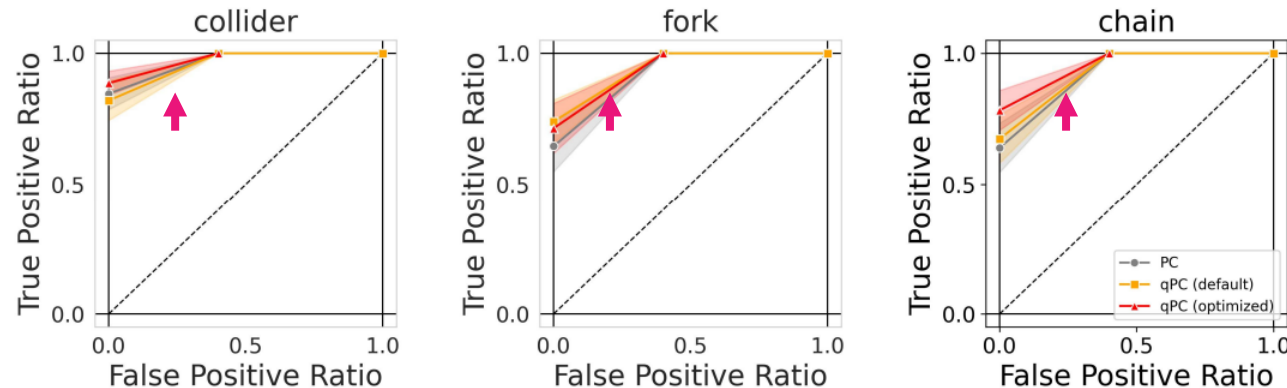


学習により推定されるガンマ分布の形状が変化

Junction patternの識別結果



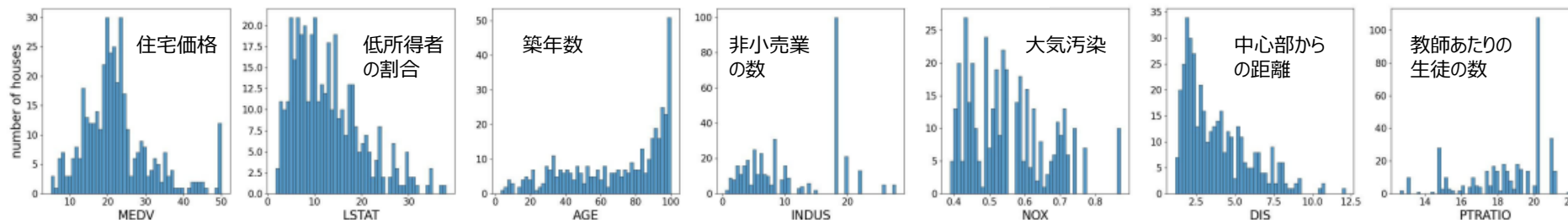
ROCカーブの比較 (偽陽性/真陽性の割合)



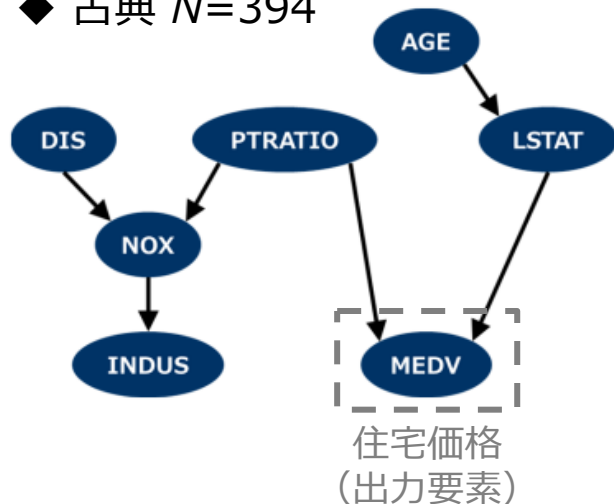
KTA最小化により偽陽性の割合を最小化できることを確認

実験結果3：リアルワールドデータによる検証

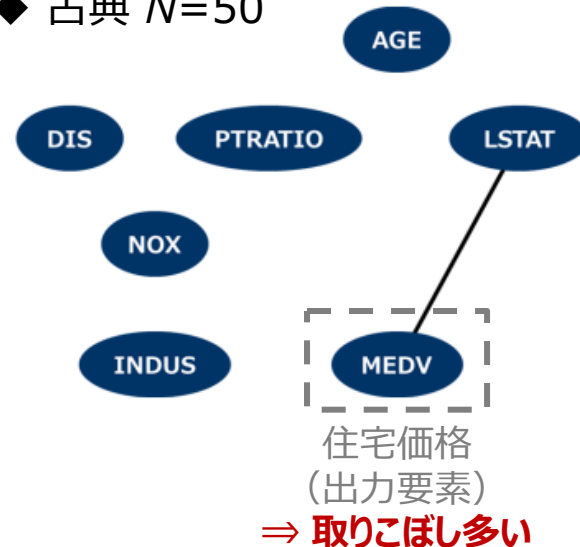
入力変数の分布 (Boston housing price data)



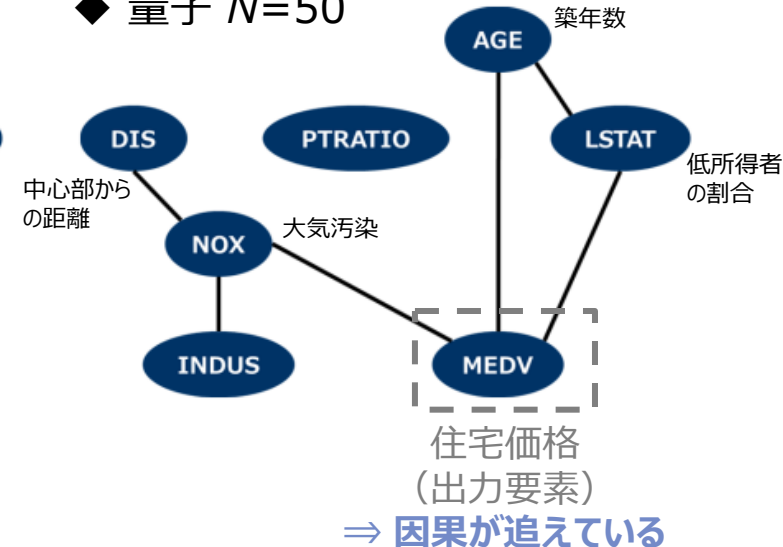
◆ 古典 $N=394$



◆ 古典 $N=50$



◆ 量子 $N=50$



リアルワールドデータでも提案手法の少サンプル優位性を確認

Contents

1. 因果推論について

2. カーネル法を用いた独立性検定

独立性検定とは

カーネル法とは

量子カーネルへの拡張

“量子カーネルを用いた独立性検定”

3. PCアルゴリズムへの応用と因果探索

PC algorithmの概要

統計検定の考え方

KCITについて

“量子カーネルを用いた非線形因果探索”

4. まとめ

まとめ

- 量子カーネル法を用いたノンパラメトリック因果探索手法 量子PC algorithmを提案した
- 特に、KTA最適化に基づく、独立性検定の検出力制御手法を開発した
- 人工データで提案手法の優位性・効果を検証した後に、リアルワールドデータでの優位性を確認した
- ポイントは、必要サンプル数の観点で従来手法（～500）に比べ、大幅に少数（<100）である点

今後の展望

- 優位性の理論解析
- 様々なデータを用いたベンチマーク