



МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ, МОДЕЛІ, ПРОБЛЕМИ І ТЕХНОЛОГІЇ ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДНИХ СИСТЕМ

УДК 681.3.00:007

ВІД КОВАРІАЦІЙ ДО КАУЗАЛЬНОСТІ. ВІДКРИТТЯ СТРУКТУР ЗАЛЕЖНОСТЕЙ У ДАНИХ

О.С. БАЛАБАНОВ

Проаналізовано сучасну методологію виводу каузальних моделей та структур систем імовірнісних залежностей із статистичних даних пасивних спостережень. Висвітлено можливості, проблеми, застереження та обмеження методів індуктивної ідентифікації каузальних відношень в апараті марковських властивостей та баєсових мереж. Виділено кілька ступенів каузальних моделей згідно з рівнем їх обґрунтованості та адекватності джерелу даних. Сформульовано статистичний паттерн, який зводить обґрунтування висновку про каузальний характер зв'язку двох змінних до тестування набору статистичних фактів (не)залежності.

ВСТУП

Серед задач, що розглядаються в контексті методології виділення знань з даних, мабуть, найцікавішою та когнітивно значущою видається ідентифікація каузальних відношень на основі апарату багатовимірних імовірнісних моделей залежностей та марківських властивостей [1–8]. Можливість ідентифікації каузальних відношень у такий спосіб викликала гострі заперечення. Деякі підсумки дискусії підведені в [8, 9]. Традиційно в емпіричних науках каузальні відношення встановлювали через контрольовані рандомізовані експерименти, тобто на основі даних активних експериментів. Натомість методи виділення знань з даних, як правило, використовують дані пасивних спостережень. Задача виведення каузальних моделей саме з даних пасивних спостережень є дуже привабливою й актуальною для багатьох сфер діяльності та досліджень, де активні експерименти неможливі практично або невиправдані економічно, або з етичних міркувань. Така ситуація постає, прикладом, у соціально-економічних та медико-біологічних дослідженнях, в астрономії, метеорології, геології та іноді навіть у техніці. Крім того, може бути невідома темпоральна (часова) послідовність змінних. Новітня емпірико-індуктивна методологія [1, 3, 5, 8] відкриває реальні можливості розв'язання задач за таких умов.

Каузальні моделі посідають, так би мовити, найвищий рівень в ієрархії емпіричних моделей. В англійській літературі каузальними мережами (діаграмами) називають імовірнісні моделі на основі ациклічних орієнтованих графів (АОГ), або їх розширення. Синтаксис АОГ-моделей дозволяє виразити каузальну семантику. Однак питання полягає в іншому: чи можна (без

апосторіорних знань) вивести з даних АОГ-модель, яка адекватно відображає каузальні відношення в предметній галузі, звідки взято статистичні дані.

Мета роботи — характеристика можливостей і обмежень методів виведення каузальних моделей з даних пасивних спостережень.

Провадиться не зовсім строга, але корисна класифікація рівня обґрунтованості висновків про причинно-наслідковий характер виведених зв'язків у моделі.

Оскільки зазначена тематика розвивалася кількома школами і до неї залучилися різні наукові спільноти — філософи, статистики, інформатики, дослідники з природничих та соціальних дисциплін, то в літературі існують розбіжності в трактуванні визначень і термінології. Намір автора — стисло і цілісно подати принципи та ключові положення предмета, а також вказати на менш відомі результати і запропонувати деякі уточнення.

Адекватність і точність каузальної моделі, виведеної з даних, детермінується двома складовими (компонентами) методу виведення. Перша складова — це базові процедури аналізу даних і тестування умовних незалежностей. Друга складова, яка і є предметом розгляду — «логічний» аналіз та синтез статистичних відношень, ідентифікованих першою компонентою.

Елементами синтаксису моделі є: вершина (змінна), дуга $X \rightarrow Y$ і ребро $X - Y$. Ребро — це дуга, орієнтація (спрямування) якої невідома або несуттєва в цьому контексті. Введемо якісні градації рівня адекватності каузальної моделі. Тобто, будемо виділяти кілька ступенів (гатунків) моделі та її фрагментів згідно з адекватністю відображення каузальних відношень об'єкта моделювання. Пропонуємо такі градації моделей: *псевдокаузальні, протокаузальні, субкаузальні та каузальні*. Гатунок моделі (рівень адекватності) визначається такими властивостями:

- надійність ідентифікації ребер моделі (топології статистичних зв'язків);
- обґрунтованість і надійність ідентифікації орієнтацій ребер моделі (спрямування впливів);
- обґрунтованість інтерпретації ребра моделі як каузального зв'язку визначеного напрямку.

Якщо всі ребра моделі адекватно відображають топологію безпосередніх зв'язків (залежностей) між змінними (відношення суміжності), будемо називати модель протокаузальною. Якщо при цьому ще і вістря орієнтованих дуг адекватно відображають автентичні напрямки залежностей (впливів) між змінними, то називатимемо модель субкаузальною. При цьому зв'язок змінних $X \rightarrow Y$ інтерпретується так: або змінна X , або якась асоційована з нею H має каузальний вплив на Y , а змінна Y певно не має каузального впливу на X . І нарешті, якщо пред'явлено переконливі аргументи, що змінна X каузально впливає на Y , то називатимемо модель каузальною (у цій частині моделі).

Припустимо, що домен («фрагмент світу»), який моделюється, описується системою ймовірнісних залежностей, структурованих ациклічним орієнтованим графом, тобто у формі АОГ-моделі. Ор-ациклічність каузальних структур виправдовується фізичною інтуїцією. Клас АОГ-моделей призначений для репрезентації систем усталених залежностей (на макрорівні).

АОГ-модель залежностей визначена як (G, θ) , де G — АОГ, причому кожній змінній відповідає своя вершина графу, а θ — сукупність локально заданих параметрів. Параметри задано у формі $p(X | F(X))$, де $F(X)$ — множина всіх «батьків» для X , тобто тих вершин Z , від яких прямує дуга $Z \rightarrow X$. Якщо є орієнтований шлях $R \rightarrow \dots \rightarrow W$, то змінна R називається «предком» для W , а W — «нащадком» для R . Прийнято виокремлювати три випадки (різновиди) АОГ-моделей. Коли модель визначена на дискретних (номінальних) змінних, її називають баєсовою мережею. Гаусові мережі визначено на дійсних змінних і лінійних залежностях (за нормально-розподілених відхилень). Подекуди їх називають також рекурсивними системами лінійних структуральних рівнянь. Гібридні мережі включають змінні різних типів. Для відображення каузальних відношень реальних систем потрібно враховувати можливість латентних змінних. При існуванні латентних змінних модель формально виходить за межі АОГ-моделей і стає певним розширенням, зокрема, класом моделей на основі анцестральних графів [10]. Латентна змінна відображається у моделі біорієнтованим ребром $X \leftrightarrow Y$.

Наявні дані є багатомірною статистичною відбіркою, яку можна розглядати як типову відбірку, генеровану з адекватної АОГ-моделі. Ідентифікувати модель — означає відтворити з наявних даних генеративну модель (з точністю до класу еквівалентності). Оскільки нас цікавить відкриття якісних відношень («знань»), доцільно спиратися на сепараційний (constraint-based) підхід до ідентифікації структур моделі. Цей підхід базується на тестах умовної незалежності і дає обґрунтування кожного фрагмента моделі. До найвідоміших методів і алгоритмів цього підходу відносяться алгоритми PC, IC, SGS та FCI [1–8]. Методи сепараційного підходу виводять модель у три етапи. На першому етапі ідентифікують усі ребра моделі, на другому — визначають орієнтації (спрямування) ребер, на третьому — обчислюють параметри. Стислий опис деяких методів можна знайти, зокрема, у [11–13].

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПРОТОКАУЗАЛЬНИХ ВІДНОШЕНЬ

Протокаузальна модель має адекватно відображати топологію безпосередніх залежностей (інформаційних зв'язків) між змінними в системі ймовірнісних залежностей, тобто сукупність ребер моделі. Ідентифікація ребер ґрунтується на виявленні відношень умовної незалежності. Умовну незалежність X від Y за фіксації (кондиціонування) набору змінних \mathbf{Z} позначатимемо формулою $\text{Ind}(X; \mathbf{Z}; Y)$, де $X, Y \notin \mathbf{Z}$. Така незалежність означає, що $p(Y | X, \mathbf{Z}) = p(Y | \mathbf{Z})$, або еквівалентно $p(XY | \mathbf{Z}) = p(X | \mathbf{Z})p(Y | \mathbf{Z})$. Для систем лінійних залежностей умовну незалежність зазвичай виражають через частковий коефіцієнт кореляції $\rho_{XY, \mathbf{Z}} = 0$.

Нехай чинне твердження умовної незалежності $\text{Ind}(X; \mathbf{S}; Y)$. Тоді для взаємної інформації між X та Y за кондиціонування \mathbf{S} легко отримати рівняння $\text{Inf}(X; Y | \mathbf{S}) = 0$, а також $\text{Inf}(Y; X\mathbf{S}) = \text{Inf}(Y; \mathbf{S})$, $\text{Inf}(X; Y\mathbf{S}) = \text{Inf}(X; \mathbf{S})$. Це інтерпретується як відсутність безпосереднього зв'язку між X та Y . Отже, факти умовної незалежності відображають структуру інформаційних потоків (статичних зв'язків) між змінними.

Відношення умовної незалежності в моделі визначаються критерієм *d*-сепарації і ґрунтуються на каузальній марківській умові [1, 3, 5]. Резонно вимагати, аби модель відображала всі інформаційні та каузальні взаємозв'язки в явному вигляді своєю графічною структурою. Тобто, кожна умовна незалежність, чинна в розподіленні ймовірностей, має виникати тільки у випадку відсутності відкритого (активного) шляху між відповідними вершинами графу моделі. Цей принцип називають припущенням необманливості (*faithfulness*) сумісного розподілу ймовірностей [1], або вимогою мінімальності та стабільності моделі [3]. Коли всі відношення умовної незалежності репрезентовано в моделі графічно, модель задовольняє принципу структурно-поведінкої адекватності. Утім, для коректного виведення всіх ребер моделі з даних можна навіть послабити припущення необманливості: безпосередній зв'язок (ребро) між X та Y має бути наявний у моделі тоді і тільки тоді, коли змінні X та Y взаємозалежні в усіх контекстах (умовах). Але навіть таке послаблене припущення іноді порушується. Це трапляється за певних «маскувальних» властивостей співвідношень параметрів. Побіч того, інші обставини також можуть перешкоджати виведенню адекватних протокаузальних моделей. Причинами помилок можуть бути: недостатній обсяг даних; гамір та похибки у даних (зокрема, неточні вимірювання, округлення змінних); латентні змінні; невдалий вибір функціональної форми залежності.

Можна виділити такі форми неадекватності протокаузальної моделі: зайві (псевдокаузальні) ребра та шляхи; втрачені ребра та шляхи; не відображення часткового суміщення шляхів; неадекватне відображення емпіричної умовної незалежності (комбінація названих вище випадків).

Помилки суміжності через вади даних (синдром зайвих та «загублених» ребер). За малих відбірок даних (через значне ухилення ймовірностей) можуть порушуватись співвідношення, які виражають умовну незалежність. Тоді гіпотеза умовної незалежності може бути помилково відкинута під час тестування (ризик помилок збільшується в тестах високого рангу [1, 11]). У результаті структура моделі перенасичується зайвими (псевдокаузальними) ребрами. Крім того, фальсифіковане ребро може виникнути внаслідок округлення змінних чи загублення шкали вимірювання. Припустимо, в автентичній моделі має чинність $\text{Ind}(R; Z; W)$, але під час вимірювання чи запису дискретної змінної Z декілька значень було об'єднано (агреговано). Тоді у відбірці даних незалежність $\text{Ind}(R; Z; W)$ може не виконуватись, і виникне зайве ребро $R - W$, аналогічне можливе для змінної Z дійсного типу. Зауважимо, що внаслідок округлення змінних можлива і протилежна помилка, коли ребро втрачається.

Обманні (превалюючі) асоціації та замасковані ребра. Багато методів статистичного аналізу даних розпочинають із обчислення парних коваріацій (асоціацій). У методах ідентифікації структур моделей без циклів суміжності (зокрема, в алгоритмі Chow&Liu та інших [14–16]) ребра встановлюють згідно з величинами парних асоціацій (кореляцій). Дійсно, якщо в структурі без циклів є пара ребер ($X - Y$) та ($Y - Z$), асоціація змінних X та Z (у типовій відбірці) буде слабшою за асоціації пар змінних (X, Y) та (Y, Z). Однак у структурах із циклами суміжності це правило не

діє, і опосередкована асоціація може перевершити будь-яку «реберну» асоціацію з-поміж тих, на яких вона ґрунтується [16, 17]. Наприклад, нехай маємо гаусову мережу, де змінні X та Y мають кілька спільних «батьків» Z_1, Z_2, \dots, Z_k (рис. 1). Легко підібрати параметри такої моделі, щоб коваріація змінних X та Y була в кілька разів більша, ніж для кожної пари змінних, що поєднані ребром. Зокрема, нехай ця модель описується рівняннями:

$$X = Z_1 + Z_2 + \dots + Z_k + \varepsilon_X,$$

$$Y = Z_1 + Z_2 + \dots + Z_k + \varepsilon_Y,$$

$$\varepsilon_X \sim N(0, \sigma); \quad \varepsilon_Y \sim N(0, \sigma).$$

Тоді коваріація X та Y у k разів більша реберних. Для баєсової мережі з такою самою структурою можна підібрати такі параметри, що величина $\text{Inf}(X; Y)$ наблизиться до максимально можливого значення (коли дві змінні статистично тотожні), у той час як усі $\text{Inf}(X; Z_i)$ та $\text{Inf}(Y; Z_i)$

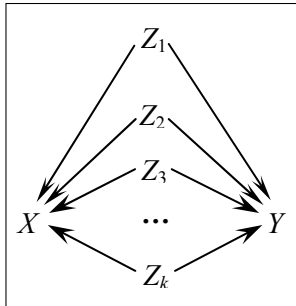


Рис. 1. Модель із «двійниковою» асоціацією

можуть як завгодно зменшуватися і навіть досягати нуля. Тобто, ребра такої моделі не проявляються парними залежностями (і не ідентифікуються найвними методами). Це — синдром «зникаючих» безпосередніх зв'язків (замаскованих ребер). Утім моделі з таким синдромом параметрично нестабільні. Достатньо трохи змінити розподіли змінних Z_i , і ребра перестануть бути замаскованими (хоча можуть бути слабкими). Зауважимо, що розглянена

структура (рис. 1) належить до підкласу монопотоківих моделей і може бути відтворена за допомогою методу «Proliferator-D», який використовує тести умовної незалежності виключно першого та нульового рангу [16].

Ідемпотентні залежності, або ланцюг із «пересувними» ребрами.

Нехай маємо дискретну модель ланцюгової структури $X \rightarrow Y \rightarrow Z$; тоді виконується $\text{Ind}(X; Y; Z)$. У [18] показано, що можна так параметризувати цю структуру, що буде також виконуватися $\text{Ind}(Y; X; Z)$. Остання незалежність відповідає структурі моделі у вигляді ланцюга $Y \rightarrow X \rightarrow Z$, де змінні розташовано в іншому порядку порівняно з тим, за яким насправді генероване сумісне розподілення ймовірностей. Більше того, сумісне розподілення ймовірностей (X, Y, Z) однаково добре узгоджується з ланцюговою структурою з будь-яким порядком розташування трьох змінних, зокрема, зі структурою $Y \rightarrow Z \rightarrow X$. Іншими словами, із трьох потенційно можливих ребер можна довільно обрати два. Можна уявити, що два ребра не мають певного місця. Звідси — образна назва «гумка-перевертень». Усього отримуємо 9 еквівалентних варіантів структури моделі. Утім, слід визнати, що така модель є аномальною і дещо штучною, бо передбачає спеціальні паттерни значень параметрів. Аналогічний феномен (еквівалентність усіх послідовностей змінних у ланцюзі) також спостерігається у функціональних моделях (тобто для детермінованих залежностей). Однак там необхідна од-

накова значність усіх змінних, а також і взаємна однозначність функцій. А вказана модель цього не вимагає і має вільні параметри. Зауважимо, що таку модель можна замінити на структуру у вигляді «зірки» з латентною змінною в центрі [19].

ПРОЯВИ ЛАТЕНТНИХ ЗМІННИХ

У багатьох реальних дослідженнях задача виведення моделі з даних потерпає від нестачі релевантних змінних (факторів), тобто через відсутність деяких змінних у даних. Змінну, яка не репрезентована в даних, не у всіх випадках називають латентною. Неприсутню в даних змінну можна назвати: прихованою, оминutoю або неспостережуваною. Апарат АОГ-моделей розраховано на ситуацію, коли кожна «оминута» змінна H_i впливає тільки на одну наявну змінну X_i і є незалежною від неprisутніх змінних H_j , які діють на інші модельні змінні. Такі неprisутні змінні не вважаються латентними. Латентна змінна — це неprisутня змінна, яка накладає суттєвий, якісний відбиток на розподіл імовірностей наявних змінних. Латентна змінна мусить впливати принаймні на деякі дві спостережувані змінні (тобто надходити до моделі двома дугами).

Можна виділити спеціальні випадки оминutoї змінної згідно зі схемою її «контакту» з моделлю: «проміжна», коренева, комбінована змінна. Проміжна прихована змінна H у наведених прикладах (рис. 2, а, 2, в) не тягне ніяких змін марківських властивостей моделі. Але в багатьох випадках дуже бажано, аби змінна у проміжній позиції була наявна в даних. Це корисно для застосування моделі, зокрема, для квантифікацій величини (сили) каузального ефекту [3].

Власне, латентною змінною зазвичай вважають таку «невидиму» змінну, яка є кореневою та впливає на дві (чи більше) явних змінних моделі (рис. 2, б, 2, г). Але й така латентна змінна може не відбиватися на марківських властивостях (рис. 2, б). Латентна змінна в різних контекстах накладає різні паттерни залежностей. Коли латентна змінна формує фрагмент W -образної конфігурації (рис. 2, г), факт її існування проявляється статистично [7]. А саме, для випадку рис. 2, г латентна змінна ідентифікується на підставі нетранзитивності емпіричної залежності через ребро $X — Y$ в обох напрямках, тобто на підставі такої комбінації статистичних фактів: залежність пар змінних (X, R) , (X, Y) та (Y, Z) , і незалежність пар змінних (X, Z) , (R, Y) та (R, Z) .

Латентна змінна з комбінованою роллю, навіть у простому варіанті (рис. 3, а), породжує складності відображення відношень у моделі. Двореберний сурогат структури (рис. 3, б) для такої ситуації є неадекватним, тому що тягне умовну незалежність $\text{Ind}(Y; X; Z)$, що не узгоджується з даними і чого немає в генеративній моделі. Триреберний сурогат (рис. 3, в) є неадекватним у тому, що залучає «нестандартне» (біорієнтоване) ребро і не відображає часткового суміщення шляхів. Крім того, є певні складності для параметризації такої моделі. У спеціальних випадках така латентна структура може бути ідентифікована [19].

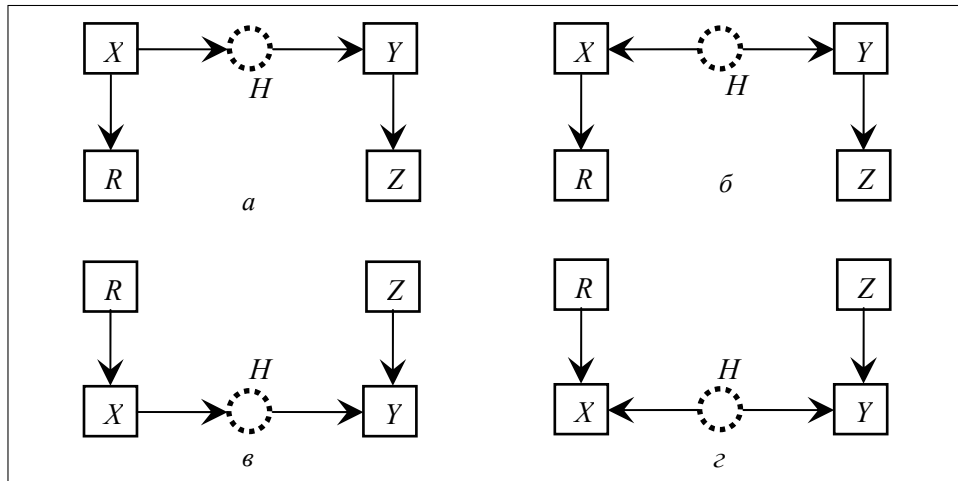


Рис. 2. Випадки прихованих змінних

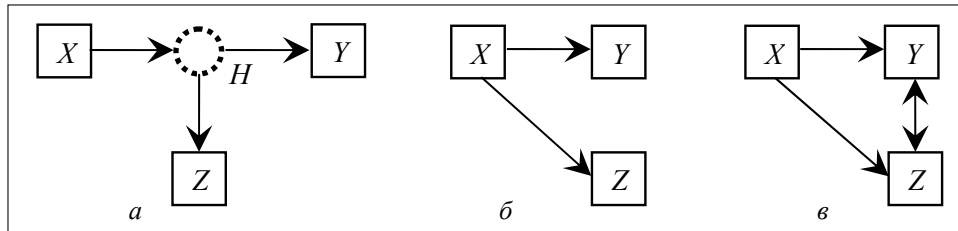


Рис. 3. «Нестандартна» латентна змінна

Латентні змінні допомагають спрощувати модель. Наприклад, фрагмент моделі у вигляді дворядного графу з перехресними ребрами (рис. 4, а) можна замінити на модель з одною «вузловою» латентною змінною (рис. 4, б). Унаслідок введення латентної змінної кількість зв'язків та параметрів кардинально зменшується. У роботі [20] наявність фрагмента моделі такого вигляду (рис. 4, а) пропонується розглядати як свідчення існування латентної змінної. Утім, таке свідчення — лише евристичне (слабке) і не є конфірмаційним.

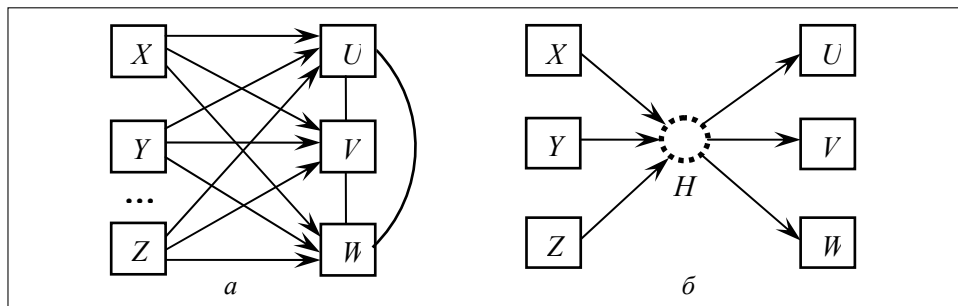


Рис. 4. Модель а спрощується під час введення латентної змінної б

КАУЗАЛЬНІ ТА СУБКАУЗАЛЬНІ МОДЕЛІ ТА ВІДНОШЕННЯ

Для трактовки моделі як каузальної чи субкаузальної необхідно, щоб модель адекватно відтворювала не тільки множину ребер, а також і адекватні (автен-

тичні) орієнтації цих ребер. Потенційно така можливість ґрунтується на експресивних можливостях АОГ-моделей і на властивостях відбірки даних та їхнього джерела. Фундаментом для ідентифікації каузальних моделей є постулат, відомий як принцип Рейхенбаха. Статистична асоційованість (взаємозалежність) змінних X та Y може пояснюватися трьома схемами механізму виникнення:

- X є причиною для Y ; в апараті АОГ-моделей це означає, що від X до Y веде строго орієнтований шлях $X \rightarrow \dots \rightarrow Y$;
- Y є причиною для X , тобто в моделі має бути шлях $X \leftarrow \dots \leftarrow Y$;
- існує деяка спільна причина U для змінних X та Y , тобто в моделі має бути шлях $X \leftarrow \dots \leftarrow U \rightarrow \dots \rightarrow Y$ (змінна U може бути латентною).

Третя схема може співіснувати з першою або другою.

Можливості індуктивної ідентифікації орієнтацій ребер. Задача ідентифікації спрямованості впливу повною мірою постає, коли відсутня темпоральна інформація про змінні моделі. Розпізнання справжніх орієнтацій ребер базується на властивості колізорів та на теоремі еквівалентності АОГ-моделей. Колізор (колайдер) — це фрагмент орграфу вигляду $X \rightarrow Y \leftarrow Z$. Цей колізор називається шунтованим (екранованим), якщо у графі є ребро $X \leftarrow Z$, інакше — нешунтованим. Змінну Y , яка входить до складу нешунтованого колізора $\rightarrow Y \leftarrow$, назвемо колізорною.

Для індуктивного виводу структур АОГ-моделей фундаментальним результатом є наступна теорема еквівалентності [7]: дві АОГ-моделі є еквівалентними, якщо і тільки якщо вони мають одні і ті ж ребра, а також одні і ті ж нешунтовані колізори.

Звідси відразу випливає, що в деревах та у повно зв'язаних АОГ-моделях орієнтація жодного ребра не ідентифікується. У методах сепараційного підходу процедура орієнтації ребер виконується на другому етапі алгоритму, коли всі ребра встановлено. Базовий принцип орієнтації ребер полягає у розпізнанні нешунтованих колізорів. Принцип формулюється як «колізорне правило»: якщо маємо $X \leftarrow Y \leftarrow Z$ та чинне $\text{Ind}(X; S; Y)$, де $Y, X, Z \notin S$, то орієнтуємо ребра $X \rightarrow Y$ та $Y \leftarrow Z$. Фізичний сенс цього принципу: тільки колізорна орієнтація такого двореберного шляху може пояснити нерозповсюдження інформації між X та Z через проміжну Y . Дуги, орієнтовані за ознакою колізора, вважаємо субкаузальними.

Неколізорні ребра теж можуть бути однозначно орієнтовані, а саме тоді, коли їх орієнтація логічно випливає з вимог орациклічності та уникнення несанкціонованих колізорів. Дійсно, якщо колізорне правило вже не вдасться застосовувати і маємо дугу $X \rightarrow Y$, а також ребро $Y \leftarrow Q$, причому Q не суміжна до X , то ребро $Y \leftarrow Q$ має бути орієнтоване як $Y \rightarrow Q$. Отже, ребро, яке дотичне до стрілки, але не задовольняє ознакам нешунтованого колізора, має бути орієнтоване так, щоб запобігти виникненню необґрунтованого колізора. Це правило можна назвати пост-колізорним.

Зазначеними правилами не орієнтуються ті ребра, які не утворюють нешунтованих колізорів, не дотичні нащадкам колізорних вершин, а також ребра між вершинами, які мають ідентичні набори «батьків». Як приклад останнього випадку, неорієнтованими залишаються ребра, що з'єднують

«братів» (ребро 2–3 на рис. 5, а). Не вдається орієнтувати ребра між «предками» колізорних вершин (у кореневій частині орграфу). Фрагмент моделі, який не вдається орієнтувати зазначеними правилами, назвемо фрагментом з варіабельними орієнтаціями (еквівалентні моделі мають альтернативні орієнтації ребер цього фрагмента). Кожне ребро у складі фрагмента з варіабельними орієнтаціями допускає довільну орієнтацію (коли розглядається окремо), однак сукупність суміжних ребер не може бути орієнтована довільно. Тобто, усі припустимі варіанти орієнтації ребер зв'язного фрагмента підлягають певним «системним» («топологічним») обмеженням.

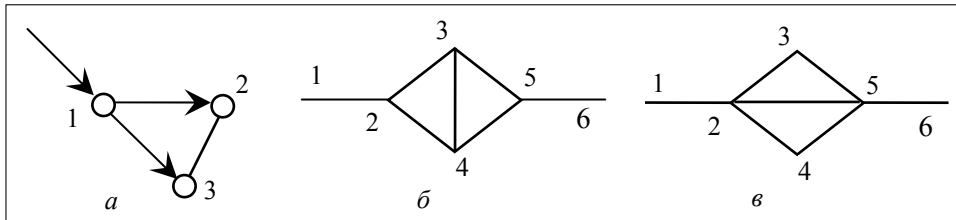


Рис. 5. Приклади неідентифікованості спрямування зв'язків

Нехай маємо кореневий фрагмент із варіабельними орієнтаціями. Відсутність нешунтованих колізорів означає, що в цьому фрагменті всі неорієнтовані цикли довжиною більше трьох ребер є трикутизованими (мають хорду). Вершину X цього фрагмента назвемо коренем, якщо в обраній моделі з класу еквівалентності всі ребра фрагмента дотичні до X , є спрямованими від вершини X , тобто мають вигляд $\leftarrow X \rightarrow$. «Системні» обмеження на орієнтації імплікуються такими синтаксичними вимогами: у кожній зв'язаній компоненті фрагмента має бути не менше одного кореня; усі корені — не суміжні; у кожному циклі має бути принаймні один колізор (шунтований) і стільки ж коренів.

Наприклад, розглянемо рис. 5, б. Припустимо, що ребра такої моделі не орієнтуються. Тоді, хоча граф такої моделі не є деревом, у ньому мусить бути тільки одна коренева вершина (цим коренем може виявитися довільна вершина). Те саме стосується графу моделі, зображеного на рис. 5, в. Граф на рис. 5, б репрезентує (охоплює) 14 еквівалентних моделей, а граф на рис. 5, в — 16 моделей.

У випадку, коли фрагмент із варіабельними орієнтаціями — некореневий, вказані обмеження узагальнюються так: у складі фрагмента існує вершина, яка є «предком» усіх інших вершин фрагмента.

Якщо є потреба ідентифікувати автентичні орієнтації ребер, які не орієнтуються колізорним та пост-колізорним правилами, аналітику доведеться вдатися до «слабких» методів, які не гарантують статистично спроможних (коректних) результатів. У певних ситуаціях можуть бути корисними евристичні критерії. Наприклад, коли є один домінуючий фактор впливу на задану змінну, можна розпізнати напрямок за допомогою міри дельта-детермінації [15]. Коли задача зводиться до вибору кореня дерева, то для підвищення шансів розпізнання кореня доцільно застосувати дельта-детермінацію в «колективному» режимі.

Концепція індуктивної каузальності. Деякі скептики заперечують каузальну інтерпретацію моделей, виведених виключно статистичними засобами з даних пасивних спостережень. Вони радять покладатися на рандомі-

зовані експерименти або на апіорну інформацію. Питання з'ясовується через аналіз та уточнення процедур.

Обґрунтовану концепцію індуктивної каузальності першими, мабуть, запропонували Дж. Перл і Т. Верма [3, 6]. Як передумову для каузальної інтерпретації моделей на основі АОГ, вони сформулювали два загальних принципи (або вимоги до моделі): мінімальність та стабільність моделі. Перша вимога відповідає відомому у філософії принципу «Леза Оккама». За умови адекватності простіша модель має перевагу, тому що легше піддається поясненню та верифікації. Друга вимога забезпечує стійкість виведеної структури до варіювання параметрів. Відтак дістаємо визначення: змінна X має справжній каузальний вплив на Y , тільки якщо в кожній мінімальній структурі моделі, узгодженій з даними, існує строго орієнтований шлях від X до Y . При цьому застережено спеціальні умови ідентифікації дуг вказаного шляху. Згідно з цими вимогами розроблено алгоритм ІС*, який на основі розподілення ймовірностей відтворює структуру моделі й ідентифікує дуги графу, які відображають «справжні» каузальні впливи (алгоритм маркує їх зірочкою). Алгоритм припускає існування латентних змінних, кожна з яких є кореневою та впливає лише на дві спостережувані змінні.

У [3, 6] визначено умови, за яких можна розпізнати окремий «справжній» каузальний вплив між двома змінними в термінах впливу та незалежності. Виходячи з цих умов, для випадку відсутності темпоральної інформації пропонуємо строго формалізоване визначення паттерну каузального впливу (воно уточнює подане раніше в [18]). Для позначення того, що X та Y є залежні за фіксації умови S (розуміється, що $X, Y \notin S$) введемо нотацію $Dep(X; S; Y) \equiv \neg Ind(X; S; Y)$. Відтак пропонується таке статистичне (індуктивне) визначення.

Визначення. Змінна X має справжній каузальний вплив на змінну Y , якщо

$$\exists Z \exists R \exists S (X \notin S) : \{Ind(Z; S; R) \& Dep(X; S; Z) \& Dep(X; S; R) \& Dep(X; S; Y) \& Dep(Z; S; Y) \& Ind(Z; XS; Y)\} . \quad (1)$$

Каузальний вплив, виявлений через статистичний паттерн (1), може бути безпосереднім або опосередкованим. Можливий випадок опосередкованого каузального впливу відображено на рис. 6 пунктиром. Каузальний зв'язок є безпосереднім (у контексті заданої множини змінних), якщо додатково виконується умова $\forall Q (X, Y \notin Q) : Dep(X; Q; Y)$. Для безпосереднього зв'язку можна сформулювати точніший критерій каузальності. Крім того, у три останні терми формули (1) не обов'язково має входити та сама множина S , що і в перші три терми. Зауважимо, що з огляду на припущення необманливості, визначення (1) містить надлишковий терм.

Формулювання статистичного паттерну (1) переводить питання верифікації каузального відношення в процедуру тестування композитної статистичної гіпотези. Таким чином, на основі симетричного поняття (не)залежності вдасться ідентифікувати несиметричне відношення каузального впливу. Наведене визначення каузальності кореспондується з інтуїтивним розумінням. Зміст його можна передати так: « X є причиною для Y ,

якщо існує інструментальна (керуюча) змінна (можливо, «невидима», а її індикатором є Z), і ця інструментальна змінна впливає на Y через посередництво X ». У цьому формулюванні виділяються три ознаки: автономність (а відтак — спрямованість) керування інструментальної змінної; дієвість цього керування для Y ; умовна незалежність інструментальної змінної від Y за фіксації причини X . Нагадаємо, що терміни «керування» і «вплив» мають на думці спрямований зв'язок, а не просто кореляцію. Стверджувати про наявність строго орієнтованого шляху від X до Y в усіх мінімальних моделях, узгоджених із даними, можна тому, що такий оршлях з необхідністю детермінується набором статистичних свідчень.

Обґрунтування принципу ідентифікації каузального впливу. Модель, зображена на рис. 6, підпадає під визначення каузального відношення (1), причому оршлях або дуга $X \rightarrow Y$ є каузальними. Структура моделі на рис. 6 є спрощенням загального випадку (тому що множина S — пуста) і характеризується такими статистичними свідченнями: є тільки дві умовні незалежності $\text{Ind}(Z; X; Y)$, $\text{Ind}(R; X; Y)$ і одна безумовна $\text{Ind}(Z; \{\}; R)$. Зокрема, чинна безумовна залежність $\text{Dep}(Z; \{\}; Y)$.

Якщо прийняти згадану вище конвенцію про можливі механізми виникнення залежностей, то залежність між X та Y може бути пояснена одним із трьох принципових припущень: змінна X каузально впливає на Y ; змінна Y каузально впливає на X ; X та Y обидві зазнають каузального впливу третьої змінної U (яка нерепрезентована в моделі), і, можливо, рівночасно діє один із двох перших механізмів. Для ствердження, що X має каузальний вплив на Y , достатньо спростувати (заперечити) усі альтернативні гіпотези.

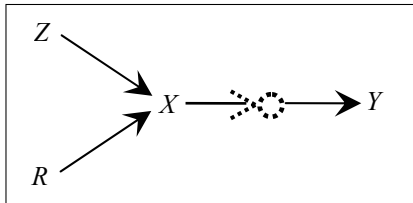


Рис. 6. Паттерн каузального зв'язку

Нехай гіпотеза H_0 — це твердження про існування оршляху від X до Y . При заданому в (1) наборі свідчень для гіпотези H_0 потенційно існують чотири основні альтернативи: H_1 , H_2 , H_3 , H_4 , які відображені відповідно на рис. 7, а, 7, б, 7, в, 7, г. Можливі й інші екзотичніші альтернативи.

Ці основні альтернативи породжуються з таких міркувань. Альтернатива каузальному впливові X на Y потребує або реверсу дуги (оршляху) $X \rightarrow Y$, або заміни її на дві дуги від прихованої змінної U , або комбінації цих конструкцій. Однак реверс дуги між X та Y у структурі рис. 6 миттєво призводить до зникнення ланцюга (відкритого шляху) між Z та Y , що суперечить залежності $\text{Dep}(Z; \{\}; Y)$. Відтак в альтернативних моделях доведеться вводити ребро $Z—Y$ або відповідно ребра $U—Y$ та $Z—U$, або $X—U$. Аналогічні ребра необхідні для змінної R . Отже, альтернативи поступаються з точки зору критерію простоти (додаються ребра та параметри). Однак ще вагомніше заперечення викликає порушення принципу структурно-поведінкової адекватності. Дійсно, в усіх альтернативних структурах факти $\text{Ind}(Z; X; Y)$ та $\text{Ind}(R; X; Y)$ графічно незумовлені. Отож ми будемо змушені накладати вимоги на співвідношення параметрів, аби «мімікрувати» ці умовні незалежності.

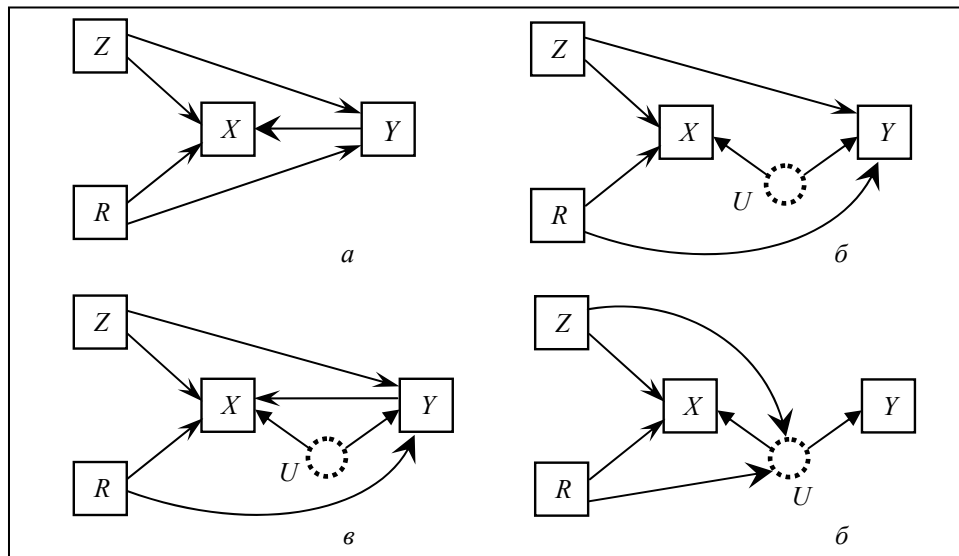


Рис. 7. Альтернативні моделі для паттерну каузального зв'язку

Розглянемо альтернативну гіпотезу H_1 (рис. 7, а). Дані свідчать про $\text{Ind}(Z; X; Y)$, однак є ребро $Z - Y$. Для узгодження цих двох фактів маємо вдаватися до такого виправдання. За кондиціонування змінної X наводиться (провокується) [13, 16] «додаткова» залежність між її «батьками» Z та Y , і більш того, ця провокована залежність між Z та Y точно нейтралізує початкову «реберну» залежність між Z та Y . Аналогічно, для виправдання факту $\text{Ind}(R; X; Y)$ необхідна «анігіляція» ребра $R - Y$ з провокованою залежністю між R та Y (через X). Такі узгодження виглядають штучними (натяжка).

Для гіпотези H_2 (рис. 7, б) повторюються аналогічні міркування з тією відмінністю, що необхідно, аби «реберна» залежність між Z та Y точно «анігілювалася» з ланцюгом двох залежностей, який утворено з ребра $U - Y$ та з наведеної залежності між Z та U . Для гіпотези H_3 (рис. 7, в) для пояснення $\text{Ind}(Z; X; Y)$ необхідний інший варіант «анігіляції» залежностей. Тут роль «нейтралізатора» для ребра $Z - Y$ відіграє конструкція на основі чотирьох ребер з участю прихованої змінної U . Аналогічна «анігіляція» необхідна для виправдання факту $\text{Ind}(R; X; Y)$. Для гіпотези H_4 (рис. 7, г) повторюється аргументація, викладена для гіпотези H_1 , з тією відмінністю, що замість змінної Y підставляється U .

Отже, усі моделі, що заперечують каузальний вплив X на Y , непереконливі з точки зору критичного раціоналізму, і тому мають бути відкинуті. Альтернативні гіпотези не лише потребують введення додаткових ребер, а ще й накладають жорсткі вимоги на співвідношення параметрів. Наукова методологія відкидає подібні натяжки (припущення ad hoc). Лише існування дуги $X \rightarrow Y$ (або оршляху) забезпечує задовільне пояснення статистичних відношень у даних.

Можна помітити, що визначення (1) включає в себе умови колізрного та пост-колізрного правил. У той же час не всі ребра, які орієнтовано за допомогою колізрного правила, відповідають каузальним зв'язкам. Відповідно, не всі оршляхи моделі є каузальними. Ці семантичні відмінності можна синтаксично виразити в апараті графів частково-орієнтованих індукційних шляхів (POIPG) [1]. Потрібно зауважити, що за невеликого розміру відбірки даних визначення (1) на практиці може іноді призводити до помилок. Один із головних ризиків хибної ідентифікації каузального зв'язку походить від ненадійності стандартного колізрного правила. Помилкова орієнтація ребер $Z - X - R$ може відбутися у разі слабкості транзитної залежності між Z та R . Можна підвищити надійність колізрної орієнтації ребер за допомогою інструменту провокації (реактивації) залежності [13, 16]. Відповідно, для підвищення надійності ідентифікації каузальних відношень потрібно включити (додати) у формулювання (1) умову $\text{Dep}(Z; X\mathbf{S}; R)$, яка контрастує з умовою $\text{Ind}(Z; \mathbf{S}; R)$. Можна сказати, що X «реактивує» залежність між Z та R (а у випадку пустої множини \mathbf{S} — провокує залежність). Така корекція визначення підвищить надійність виявлення каузальних відношень.

ВИСНОВКИ

Розглянена постановка задачі — виведення каузальних моделей з даних пасивних спостережень — теоретично обтяжлива (потребує нестандартного мислення). Але саме така постановка відповідає практичним потребам і сучасним викликам. Зрозуміло, що нею не вичерпується методологія індуктивного виводу (з емпіричних даних) моделей когнітивного призначення. Можливі й інші форми збору й аналізу емпіричних даних. З одного боку, репрезентація даних у формі єдиного сумісного розподілення ймовірностей змінних є спрощенням і обмеженням. Сукупність фактів умовної (і безумовної) незалежності не вичерпує змісту аналізованих даних. Зокрема, при цьому залишається не ужитим поняття стабільності каузальних параметрів крізь різні субдомени. З іншого боку, якщо розглядати структуру АОГ-моделі лише як форму репрезентації фактів умовної незалежності в розподіленні ймовірностей, то сумісне розподілення ймовірностей містить навіть надлишкову інформацію. Наприклад, маргінальні розподілення ймовірностей кореневих змінних навряд чи несуть каузальну інформацію.

Характеристика моделей як причинно-наслідкових (у загальнонауковому розумінні цього терміна) — це питання *інтерпретації* моделі людиною. Будь-хто може не сприймати розглянені аргументи та запропонувати інші інтерпретації й інші дефініції. Та все ж видається, що наведене визначення каузального зв'язку вже самою своєю конструкцією схиляє до каузальної інтерпретації, а аргументація є концептуальною й узгодженою. Але, коли користувач збирається застосувати модель для прогнозу наслідків втручань в об'єкт, необхідно застерегти наступне. Потрібно ретельно порівняти умови збору даних та умови планованих втручань. Якщо змінна керування не була репрезентована в даних, то для прогнозу наслідків керування доведеть-

ся зробити припущення про локальний і неруйнівний (для моделі) характер керування.

Якість виведеної моделі зумовлюється повнотою набору змінних, розміром відбірки та точністю даних. Аналітик може опинитися не в змозі розпізнати реально існуюче каузальне відношення через те, що сформульований вище індуктивно-статистичний Y-паттерн (1) не відшукується. Необхідна (але недостатня) передумова для виявлення цього паттерну — відсутність двох ребер у ближньому оточенні пари «причина – наслідок». Інша передумова — наявність індикатора інструментальної змінної. Більш того, якщо (під час збирання чи обробки) відбірку даних було піддано селекції за значенням певної змінної, яка є нащадком усіх інших змінних у моделі, то правдоподібно, що жодний зв'язок моделі не буде орієнтований, тобто напрямки впливів не ідентифікуються. Також у моделі з'являться зайві ребра. Цей ефект (провокування залежностей) відомий як *selection bias*, а також як парадокс Берксона [1, 3, 10]. Взагалі, якщо виведена модель виявилась недостатньо інформативною, то необхідно розширити номенклатуру спостережень, збільшити обсяг відбірки даних чи підвищити точність вимірювань.

Методологія виведення каузальних моделей, що ґрунтується на систематичному аналізі статистичних відношень і на виявленні марківських властивостей, на разі видається найбільш потужною та перспективною емпірико-індуктивною методологією. Вона здатна настільки повно і точно ідентифікувати каузальні відношення, наскільки це дозволяють наявні дані спостережень. Виведення каузальних моделей із багатовимірних динамічних рядів даних ґрунтується на тих самих загальних принципах, але процедури виведення мають специфіку, зокрема, потрібне переформатування відбірки даних («кейсизація»).

Свіжий огляд літератури з каузального моделювання в економетриці на основі даних спостережень подано в [21].

ЛІТЕРАТУРА

1. *Spirtes P., Glymour C. and Scheines R.* Causation, prediction and search. — NY: MIT Press, 2001. — 543 p.
2. *Scheines R., Spirtes P., Glymour C. et al.* The TETRAD Project: Constraint based aids to causal model specification // *Multivariate Behavioral Research*. — 1998. — **33**. — № 1. — P. 65–118.
3. *Pearl J.* CAUSALITY: models, reasoning, and inference. — Cambridge University Press, 2000. — 526 p.
4. *Pearl J.* Graphs, causality, and structural equation models // *Sociological Methods and Research*. — 1998. — **27**. — № 2. — P. 226–284.
5. *Spirtes P.* A Tutorial on Causal Inference // Technical Report № CMU-PHIL-183. Dep. of Philosophy, August. — Carnegie Mellon University, PA. — 2009. — 68 p.
6. *Pearl J., Verma T.* A theory of inferred causation // *Proceeding and International Conferences on Principles of Knowledge Representation and Reasoning*. — Morgan Kaufmann, San Mateo, CA. — 1991. — P. 441–452.
7. *Verma T., Pearl J.* Equivalence and synthesis of causal models // *The 6-th Annual Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*. — Cambridge, MA, Elsevier Science Publishers. — 1991. — P. 220–227.

8. *Glymour C.* What's right with «Bayes Net Methods» and what is wrong with «Hunting Causes and Using Them»? // *British Journal for the Philosophy of Science.* — 2010. — **61.** — № 1. — P. 161–211.
9. *Pearl J.* Review of N. Cartwright «Hunting Causes and Using Them» // *Economics and Philosophy.* — 2010. — **26.** — № 1. — P. 69–77.
10. *Richardson T. and Spirtes P.* Causal Inference via ancestral graph Markov models // *Highly Structured Stochastic Systems.* — Oxford University Press, 2003. — P. 83–105.
11. *Балабанов А.С.* Минимальные сепараторы в структурах зависимостей. Свойства и идентификация // *Кибернетика и системный анализ.* — 2008. — № 6. — С. 17–32.
12. *Андон Ф.И., Балабанов А.С.* Структурные статистические модели: инструмент познания и моделирования // *Системні дослідження та інформаційні технології.* — 2007. — № 1. — С. 79–98.
13. *Балабанов А.С.* К выводу структур моделей вероятностных зависимостей из статистических данных // *Кибернетика и системный анализ.* — 2005. — № 5. — С. 19–31.
14. *Chow C.K., Liu C.N.* Approximating discrete probability distributions with dependence trees // *Institute of Electrical and Electronics Engineers transactions on Information Theory.* — 1968. — **14.** — № 3. — P. 462–467.
15. *Балабанов О.С.* Индуктивное видтворення деревовидних структур систем залежностей // *Проблемы программирования.* — 2001. — № 1/2. — С. 95–108.
16. *Балабанов А.С.* Реконструкция модели вероятностных зависимостей по статистическим данным. Инструментарий и алгоритм // *Проблемы управления и информатики.* — 2009. — № 6. — С. 90–103.
17. *Балабанов О.С.* Системи ймовірнісних залежностей: графові та статистичні властивості // *Математичні машини та системи.* — 2009. — № 3. — С. 80–97.
18. *Балабанов О.С.* Відкриття структур залежностей в даних: від непрямих асоціацій до каузальності // *Материалы 3-й междунар. конф. «УкрПРОГ'2002».* Проблемы программирования. — 2002. — № 1/2. — С. 309–316.
19. *Андон П.И., Балабанов О.С.* До відкриття латентного бінарного фактора в статистичних даних категорного типа // *Доп. НАН України.* — 2008. — № 9. — С. 37–43.
20. *Elidan G., Lotner N., Friedman N. and Koller D.* Discovering hidden variables: A structure-based approach // *Proceedings of the 13-th Conferences on Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS-2000).* — Denver, Colorado. — 2000. — P. 479–485.
21. *Kwon D.-H., Bessler D.A.* Graphical Methods, Inductive Causal Inference, and Econometrics: A Literature Review // *Computational Economics.* — 2011. — **38.** — № 1. — P. 85–106.

Надійшла 22.04.2010