MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Lucie Zemánková

Příčiny účinků a účinky příčin

Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí bakalářské práce:	RNDr. Matúš Maciak, Ph.D.
Studijní program:	Matematika
Studijní obor:	Obecná matematika

Praha 2017

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 19. 7. 2017 Lucie Zemánková

Chtěla bych poděkovat mému vedoucímu bakalářské práce RNDr. Matúši Maciakovi za udělené rady, uvedení do tématu a hlavně pomoc při vypracovávání práce. Dále bych chtěla poděkovat rodičům, celé rodině a příteli Tomovi za pomoc při studiu, motivování mě k další práci a za vytvoření potřebného zázemí.

Název práce: Příčiny účinků a účinky příčin

Autor: Lucie Zemánková

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Matúš Maciak, Ph.D., Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Abstrakt: Práce se zabývá asociačním a kauzálním vztahem mezi dvěma různými náhodnými jevy a představuje základní statistické metody pro vyšetřování těchto vztahů. Nejprve se věnuje prokázání souvislosti mezi jevy (asociace) a ukazuje, že nalezení kauzálního vztahu mezi jevy vyžaduje vhodnou randomizaci systému nebo zásah (intervenci) do systému. Po intervenci do systému již není možné napozorovat všechny situace, tzv. kontrafaktuální pozorování, ale i přesto lze kauzální vztah prokázat za pomoci vhodných technických postupů a teoretických předpokladů. Práce dále shrnuje různé způsoby reprezentace kauzální struktury, nejprve pomocí grafů, kde jsou předvedeny základní metody odhadování kauzální struktury, a následně pomocí strukturálních rovnic, které již zachycují kvantitativní míru kauzálních vztahů.

Klíčová slova: kauzalita, asociace, intervence, randomizace, strukturální modely

Title: Causes of Effects and Effects of Causes

Author: Lucie Zemánková

Department: Department of probability and mathematical statistics

Supervisor: RNDr. Matúš Maciak, Ph.D., Department of probability and mathematical statistics

Abstract: The thesis deals with an associative and causal relationship between two different random phenomena and presents basic statistical methods for investigation of these relationships. Firstly it focuses on demonstrating the association between phenomena and shows that finding a causal relation between phenomena requires appropriate randomization of the system or intervention in the system. After intervening in the system, it is no longer possible to observe all situations, so-called counterfactual observation, but the causal relationship can still be demonstrated using appropriate technical procedures and theoretical assumptions. The thesis further summarizes different ways of representation of causal structures, first by means of graphs, where basic methods of estimating the causal structure are presented, and later by structural equations that already capture the quantitative measure of causal relations.

Keywords: causality, association, intervention, randomization, structural equation models

Obsah

Úvod

V mnoha odvětvích se odborníci s využitím statistiky zajímají o vztahy mezi dvěma a více jevy. Pozorují-li dva jevy současně, chtějí vědět, jestli tyto jevy spolu souvisí a navzájem se ovlivňují. Pokud už ví, že dva jevy spolu souvisí, je příhodné dále určit, který jev byl příčinou jevu druhého.

Pro ilustraci si uvedeme příklad z odvětví medicíny: Pacient se léčil s nemocí A. Při krevních testech lékaři zjistili přítomnost látky B v krvi. Na nemoc A se budeme odkazovat jako na jev A a na výskyt látky B v krvi jako na jev B. Lékaři tedy pozorovali současně jev A a jev B. Otázkou však je, jestli nemoc A a výskyt látky B spolu nějak souvisí.

Za pomoci statistického aparátu umíme souvislost dvou jevů zkoumat. V případě, že ukážeme, že jevy spolu souvisí, zajímá nás dále směr vlivu působení. Chceme zjistit, jestli nemoc A způsobila, že se v krvi vyskytla látka B, nebo jestli se v krvi nejdříve objevila látka B, která potom způsobila, že pacient onemocněl nemocí A. Jevy A a B se nemusí ovlivňovat přímo. Vliv na tyto dva jevy může mít jiný jev C, který nepozorujeme. Jev C může být například genetická dispozice daného pacienta, která způsobila, že se v krvi objevila látka B, a zároveň pacient onemocněl nemocí A.

Pro vývoj léčby nemoci A je třeba směr působení jevů A a B znát. Pokud by farmaceutická firma vyvinula lék, který by odstranil z krve látku B, a chtěla by tímto způsobem vyléčit nemoc A, lék by nefungoval v případě, kdy je přítomnost látky B pouze následkem nemoci A. Pokud naopak určíme, že látka B způsobuje nemoc A, můžeme tuto skutečnost využít k léčení nemoci A.

V případě, kdy jsme schopni statisticky potvrdit směr působení jevů, není ještě zaručeno, že tento směr působení platí ve všech dalších případech, protože stále hraje roli náhoda a jiné okolnosti. Například víme-li, že látka B v krvi způsobuje výskyt nemoci A, tak obecně neplatí, že další pacient, u kterého se v krvi objeví látka B, následně onemocní nemocí A. Svoji roli může hrát i genetická dispozice C daného pacienta, která ovlivní, že se v krvi objeví látka B, ale pacient neonemocní nemocí A. Případ, kdy se u pacienta vyskytla v krvi látka B a on následně onemocněl nemocí A budeme nazývat příčina účinku, zatímco v případě, kdy se u pacienta v krvi vyskytla látka B a nás zajímá, jestli pacient onemocní nemocí B, budeme hovořit o účinku příčiny.

Směr působení jevů nejsme schopni určit pouze z případů, které napozorujeme ve stejném čase. V předchozím příkladu můžeme u pacienta pozorovat výskyt nemoci A a výskyt látky B v krvi pouze ve stejném čase. Nejsme schopni říci, jestli se látka B v krvi vyskytla dříve, než se objevily první příznaky nemoci A, nebo obráceně. Pro určování směru působení jevů budeme potřebovat širší aparát.

Jeden z nástrojů na určování směru působení jevů může být *intervenční pokus*. V takovém pokusu nedochází pouze k pozorování, ale provedeme nějaký zásah do pozorovaného systému, případně pouze do jeho vybrané části, a potom sledujeme, jak tento zásah ovlivnil systém. Zásahem může být například podání léku pacientovi. Systémem by v tomto případě byla skupina pacientů, kterým bychom podali lék a dále zkoumali, jak na lék budou reagovat, zdali se uzdraví, nebo neuzdraví. Nemusíme lék podávat všem testovaným pacientům, můžeme si pacienty rozdělit na dvě skupiny, jedné skupině pacientů lék podáme a druhé ho nepodáme. Porovnáním výsledků v jedné a druhé skupině můžeme být schopni něco říci o účinku léku. Ani v tomto případě však nenapozorujeme všechny potřebné situace. U pacienta, který se uzdravil, když jsme mu podali lék, nezjistíme, jestli by se uzdravil i v případě, kdy bychom mu lék nepodali.

Důležitou roli v intervenčním pokusu hraje rozdělení systému do skupin. V předchozím odstavci jsme pacienty rozdělili na dvě skupiny. Jak ale zařadíme pacienty do skupin? Známe-li pořadí všech n pacientů, jak se hlásili na příjmu, mohli bychom říci, že prvních $\frac{n}{2}$ pacientů, zařadíme do skupiny 1 a zbytek do skupiny 2 (pokud je pacientů lichý počet, tak prvních $\frac{n+1}{2}$ zařadíme do skupiny 1 a zbytek pacientů do skupiny 2). Také bychom mohli říci, že každý lichý pacient v pořadí bude ve skupině 1 a každý sudý pacient v pořadí ve skupině 2. Možností, jak pacienty rozřadit, je mnoho. Při rozdělování do skupin je potřeba dbát na to, aby pacienti nebyli rozdělováni do skupin podle pravidel, která by mohla ovlivnit výsledek pokusu.

Ne vždy je možné (z etických nebo finančních důvodů) provádět zásah do systému. Například v případě zkoumání vlivu kouření na výskyt rakoviny plic není etické nutit skupinu jedinců začít kouřit, abychom mohli potvrdit, že u nich spíše dojde k rakovině plic než u druhé skupiny jedinců.

V této práci se pokusíme čtenáře uvést do problému určování vzájemných vztahů mezi souběžně pozorovanými jevy. V první kapitole se v části 1.1 zaměříme na určování, jestli spolu dva jevy souvisí. Dále budeme chtít určit směr působení těchto jevů, čímž se budeme zabývat v části 1.2. Jelikož z dat nemáme napozorovány všechny potřebné situace pro určení příčinných vztahů mezi jevy, budeme se muset vypořádat s problémem chybějících proměnných, buď pomocí intervence v části 1.3, nebo pomocí randomizace v části 1.4.

V druhé kapitole si ukážeme, jak lze vztahy mezi jevy zaznamenat – v části 2.1 pomocí grafů a v části 2.2 pomocí strukturálních rovnic. Jako příklad strukturálních rovnic pro lineární rovnice si v části 2.3 povíme něco více o lineární regresi. Na závěr si představíme v části 2.4 několik postupů, jakými jsme schopni určit závislosti jevů v daném systému, a v části 2.5 se budeme zabývat otázkou, za jakých podmínek můžeme vlastnosti po-zásahového systému popsat vlastnostmi před-zásahového systému.

1. Od asociace ke kauzalitě za randomizace

Nejprve si vysvětlíme pojmy asociace a kauzalita. Budeme je ilustrovat na příkladu měření účinku podaného léku. Dále si zavedeme značení pro zásah do modelu a nakonec si vysvětlíme pojem randomizace. Máme-li dobře randomizovaný systém, jsme schopni prokázáním asociace mezi dvěma veličinami potvrdit i kauzální vztah mezi těmito dvěma veličinami.

1.1 Asociace

Řekneme, že mezi dvěma jevy je asociační vztah, pozorujeme-li tyto dva jevy současně. Ve statistice míru asociace mezi dvěma jevy můžeme vyjadřovat různými způsoby, např. testováním hypotéz o korelačním koeficientu, podíly a rozdíly pravděpodobností mezi dvěma jevy, testováním pomocí χ-kvadrát testu nezávislosti na kontingenční tabulce. Míru asociace vyjadřuje také poměr šancí.

Pro určení asociace dvou jevů, např. jevů A a B, potřebujeme znát jejich *sdruženou pravděpodobnost* $P_{A,B}$, což je pravděpodobnost, že nastane jev A a zároveň nastane jev B

$$P_{A,B} = P(A \cap B).$$

Asociační parametry jsou takové parametry, které můžeme odvodit ze sdružené pravděpodobnosti $P_{A,B}$ dvou porovnávaných jevů A a B. Typickým asociačním parametrem je *podmíněná pravděpodobnost*, neboli pravděpodobnost jevu A za podmínky, že nastal jev B a ten má nenulovou pravděpodobnost:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{P_{A,B}}{P(B)}.$$

Asociaci mezi dvěma jevy, její zkoumání a vyvození závěrů si ukážeme na hypotetickém příkladu popsaném v článku [1].

Pomocí pokusu chceme ukázat, že lék na bolest hlavy je účinný. Testování se zúčastnilo 200 jedinců, kterým byl v případě bolesti hlavy podán prášek, 100 jedincům byl podán aspirin, 100 jedincům pouze placebo. Pokud na sobě jedinec pozoroval odeznění bolesti do 30 minut od požití prášku, byl označen jako uzdravený, v opačném případě jako neuzdravený.

	Neuzdravený	Uzdravený	Celkem
Placebo	88	12	100
Aspirin	70	30	100
Celkem	158	42	200

Tabulka 1.1: Tabulka znázorňující počty pacientů, kteří dostali určitý typ prášku a jak na daný prášek reagovali. Tabulka čerpá údaje z příkladu popsaném v [1].

Testovaní jedinci nevěděli, kterou pilulku dostali, jestli placebo nebo aspirin, aby nedošlo k ovlivnění pokusu. Řekněme, že prvních sto pacientů dostalo aspirin a druhých sto pacientů dostalo placebo pilulku. Výsledky pokusu zaznamenává tabulka 1.1, která se nazývá kontingenční tabulka, a pro takové tabulky existují statistické metody, pomocí kterých lze určit, jestli tvrzení „*aspirin je účinný*“ platí.

Nejprve si přepíšeme tabulku 1.1 s počty případů v jednotlivých kategoriích na tabulku 1.2 relativních četností uzdravení a neuzdravení pro daný prášek. Tyto relativní četnosti odhadují pravděpodobnosti uzdravení a neuzdravení pro daný prášek. Pravděpodobnost uzdravení v případě, kdy pacient dostal aspirin, označíme p_1, pravděpodobnost uzdravení v případě, kdy pacient dostal placebo, označíme p_0 a jejich odhady označíme $\widehat{p_1}$ a $\widehat{p_0}$. Pravděpodobnosti neuzdravení jsou doplňkové pravděpodobnosti do jedné k dané pravděpodobnosti uzdravení, proto pro ně nebudeme zavádět speciální značení, ale označíme je jako „1− pravděpodobnost uzdravení“ pro daný prášek.

	Neuzdravení	Uzdravení	Celkem
Placebo	$1-\widehat{p_0}=0{,}88$	$\widehat{p_0}=0{,}12$	1
Aspirin	$1-\widehat{p_1}=0{,}70$	$\widehat{p_1}=0{,}30$	1

Tabulka 1.2: Tabulka znázorňující relativní četnosti uzdravení a neuzdravení v případech, kdy pacient dostane aspirin nebo placebo.

Z tabulky 1.2 můžeme ihned vyjádřit *poměr pravděpodobností* uzdravení, označíme ho RR z anglického *risk ratio*

$$\mathrm{RR}=\frac{\widehat{p_1}}{\widehat{p_0}}=\frac{0{,}30}{0{,}12}=2{,}50.$$

Poměr pravděpodobnosti RR je větší než 1, proto je pravděpodobnost uzdravení při použití aspirinu větší než pravděpodobnost uzdravení při použití placebo pilulky, konkrétně pravděpodobnost uzdravení při použití aspirinu je dvaapůlkrát větší než při použití placebo pilulky.

Další způsob vyvození závěru z tabulky 1.2 může být použití *poměru šancí* (značíme OR z anglického názvu *odds ratio*). *Šance* na úspěch je podíl pravděpodobnosti úspěchu a pravděpodobnosti neúspěchu, tedy $\frac{p}{1-p}$, kde p je pravděpodobnost úspěchu. V tabulce 1.2 je pravděpodobnost úspěchu pravděpodobnost uzdravení, pravděpodobnost neúspěchu je pravděpodobnost neuzdravení. Šance na uzdravení je tedy podíl pravděpodobností v jednom řádku. Šance na uzdravení při požití placebo pilulky je $\frac{p_0}{1-p_0}$ a šance na uzdravení při požití aspirinu je $\frac{p_1}{1-p_1}$. Poměr šance na uzdravení při požití aspirinu a placeba vyjadřuje podíl OR

$$\mathrm{OR}=\frac{\frac{p_1}{1-p_1}}{\frac{p_0}{1-p_0}}=\frac{p_1\,(1-p_0)}{p_0\,(1-p_1)}=\frac{0{,}30\cdot 0{,}88}{0{,}12\cdot 0{,}70}=3{,}14.$$

Šance, že se pacient uzdraví, když dostal aspirin, je více než třikrát větší, než šance, že se pacient uzdraví, když dostal placebo pilulku. Z výsledku tohoto měření to vypadá, že bychom mohli podpořit tvrzení *aspirin je účinný*.

Pomocí RR i OR jsme došli k závěru, že mezi použitím aspirinu a uzdravením je nějaký vztah. Při pozorování uzdravení v případě použití aspirinu jsme ale neuvažovali možnost, že by se daný pacient mohl uzdravit i v případě, když by si aspirin nevzal. Tento případ nejsme schopni napozorovat, protože jsme danému pacientovi již podali aspirin. Abychom mohli říci, že aspirin je účinný na bolest hlavy, potřebovali bychom nejdřív vyřešit problém s chybějícími pozorováními. Tím se budeme dále zabývat v následující části.

1.2 Kauzalita

Kauzalita popisuje příčinnou závislost mezi dvěma jevy. Je-li mezi dvěma jevy kauzální vztah, znamená to, že jeden jev je příčinou jevu druhého, který je účinkem. Toto nám zaručuje, že v případě, kdy pozorujeme jev, který je příčinou, tak následně musíme pozorovat i druhý jev, který je účinkem jevu prvního. Kauzální vztah může být přímý, nebo nepřímý. Máme-li jevy A, B, C, tak přímý kauzální vztah mezi jevy A a B je, pokud jev A přímo způsobí, že nastane jev B. Nepřímý kauzální vztah mezi jevy A a B je v případě, kdy jev A způsobí, že nastane jev C a jev C následně způsobí výskyt jevu B. Víme-li, že mezi dvěma veličinami je asociační vztah, ptáme se, jestli je mezi nimi i vztah kauzální.

Na příkladu v předchozí kapitole jsme si ukázali, že mezi užitím aspirinu a uzdravením je asociační vztah. Nyní bychom chtěli ukázat, že tento vztah je kauzální, tedy že aspirin je opravdu příčinou uzdravení pacienta. Abychom mohli určit kauzální vztah mezi užitím aspirinu a uzdravením, potřebujeme nejdříve vyřešit problém *counterfactuals*, tzv. *kontrafaktuálních pozorování*. Jedná se o hypotetické situace, které nemůžeme na datech pozorovat. Například uzdravil by se pacient, který se uzdravil při požití aspirinu, i v případě, kdyby si aspirin nevzal?

Vezmeme-li 100 pacientů, kteří si vzali aspirin, tak pro ně máme napozorováno, jestli se uzdravili, nebo neuzdravili. Pro pacienta, který si vzal aspirin a uzdravil se, bychom chtěli zjistit, jaká by byla pravděpodobnost, že by se neuzdravil, kdyby si aspirin nevzal. Tuto pravděpodobnost nazveme *kauzální pravděpodobnost* a označíme PC z anglického *probability of causation*. Známe-li kauzální pravděpodobnost, můžeme už něco říci o tom, jestli byl aspirin opravdu příčinou uzdravení pacienta.

Pro pacienty, kteří si vzali aspirin, však nemáme pozorovány případy, kdy si aspirin nevzali. Výsledky pokusu v případě, kdy si pacient nevzal aspirin máme pro jiných 100 pacientů. Definujeme-li si nové veličiny, které budou popisovat 4 možné situace výsledku pokusu (viz dále), tak budeme schopni z naměřených dat na 200 pacientech vytvořit novou kontingenční tabulku.

Zavedeme si dvě nové indikátorové veličiny uzdravení R_0 a R_1. R_0 pro případ, kdy si pacient aspirin nevzal a R_1 pro případ, kdy si pacient aspirin vzal. Máme celkem 4 možné situace ve výsledku pokusu. Pacient si

- aspirin nevzal a uzdravil by se: $R_0 = 1$,
- aspirin nevzal a neuzdravil by se: $R_0 = 0$.
- aspirin vzal a uzdravil by se: $R_1 = 1$,
- aspirin vzal a neuzdravil by se: $R_1 = 0$,

Přesné počty pacientů, kteří spadají do každé ze 4 možností výsledku pokusu, známe z tabulky 1.1. Počet pacientů označíme složenými závorkami $\{\}$, tedy $\{R_1 = 1\}$ je počet pacientů, kteří si vzali aspirin a uzdravili by se. Z dat víme, že

$$\begin{aligned} \{R_0 = 1\} &= 12, \qquad & \{R_1 = 1\} &= 30, \\ \{R_0 = 0\} &= 88, \qquad & \{R_1 = 0\} &= 70. \end{aligned}$$

Jak už bylo zmíněno dříve, pro pacienta, který si vzal aspirin, chceme popsat, co by se stalo, kdyby si aspirin nevzal a pro pacienta, který si aspirin nevzal nás zajímá, co by se stalo, kdyby si aspirin vzal. Obě veličiny R_0 i R_1 máme napozorovány na 100 pacientech, ale tito pacienti nejsou stejní. Pro 100 pacientů pozorujeme veličinu R_0 a pro jiných 100 pacientů pozorujeme veličinu R_1. Nás zajímají hypotetické situace, co by se stalo, kdyby si 100 pacientů, kteří si vzali aspirin, aspirin nevzalo a naopak co by se stalo, kdyby si 100 pacientů, kteří si aspirin nevzali, aspirin vzalo. Sestavíme si proto kontingenční tabulku pro hypotetických 100 pacientů, u kterých nás budou zajímat počty pacientů v jednotlivých hypotetických situacích, kdy veličiny R_0 a R_1 nabývají různé hodnoty. Z tabulky 1.1 známe marginální počty veličin R_0 a R_1 (celkové počty pacientů pro $R_0 = 0$, $R_0 = 1$, $R_1 = 0$ a $R_1 = 1$). Protože neznáme počet pacientů, kteří si vzali aspirin a uzdravili se, zatímco kdyby si aspirin nevzali, tak by se neuzdravili, označíme si tento počet x a platí

$$x = \{R_0 = 0,\, R_1 = 1\}.$$

S pomocí nově zavedeného x a znalostí marginálních počtů veličin R_0 a R_1 jsme již schopni vytvořit celou tabulku 1.3.

		R_0		
		0	1	Celkem
R_1	0	$88 - x$	$x - 18$	70
	1	x	$30 - x$	30
	Celkem	88	12	100

Tabulka 1.3: Tabulka zaznamenává počty pacientů v hypotetických případech – např. kolik pacientů, kteří si vzali aspirin a uzdravili se, by se uzdravilo i v případě, kdy by si aspirin nevzali. Veličiny R_0 a R_1 jsou indikátorové veličiny uzdravení zavedené dříve. V tabulce využíváme marginální počty pacientů pro veličiny R_0 a R_1 z tabulky 1.1.

Kauzální pravděpodobnost PC, že pacient, který si vzal aspirin a uzdravil se, by se neuzdravil, kdyby si aspirin nevzal, nyní můžeme vyjádřit pomocí náhodných veličin R_0 a R_1, podmíněné pravděpodobnosti a hodnot z tabulky 1.3 jako

$$PC = P[R_0 = 0 | R_1 = 1] = \frac{P[R_0 = 0,\, R_1 = 1]}{P[R_1 = 1]} = \frac{x}{30}.$$

Počty pacientů v tabulce 1.3 nemohou být záporné, musí tedy platit:

$$\begin{aligned} 88 - x &\geq 0, \qquad & x - 18 &\geq 0, \\ x &\geq 0, \qquad & 30 - x &\geq 0. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Z rovnic (1.1) dostáváme omezení pro x:

$$x \geq 18, \tag{1.2}$$
$$x \leq 30. \tag{1.3}$$

Omezení (1.3) nám říká, že $PC \leq 1$, což je základní vlastnost pravděpodobnosti a nepřináší nám novou informaci. Odhadu (1.2) můžeme využít a omezit díky němu kauzální pravděpodobnost

$$PC = \frac{x}{30} \geq \frac{18}{30} = 0{,}6.$$

Pravděpodobnost, že by se pacient neuzdravil v případě, kdy by si nevzal aspirin, víme-li, že se uzdravil, když si aspirin vzal, je větší než polovina, proto můžeme podpořit tvrzení, že aspirin byl příčinou uzdravení.

V příkladě s pacienty a léčením bolesti hlavy, rozebíraném výše, rozlišujeme následující dvě situace:

Situace A: Pacienta bolela hlava, vzal si aspirin a hlava ho bolet přestala. Byl to účinek aspirinu, co mu pomohlo od bolení hlavy?

Situace B: Pacienta bolela hlava. Rozmýšlí se, co udělá, aby zabránil bolesti. Pomohl by mu aspirin od bolení hlavy?

O situaci A hovoříme jako o situaci, která vyjadřuje *příčinu účinku*, pozorujeme účinek a chceme určit, co bylo jeho příčinou. Situace B popisuje *účinek příčiny*, neboli hypotetickou situaci, co by se stalo, kdyby si aspirin vzala.

Vrátíme se ještě k problému chybějících proměnných, kdy nemůžeme napozorovat dva různé typy zásahu na jedné jednotce pozorovaného systému – v našem případě jednom pacientovi. Problém chybějících proměnných má obecně několik řešení. Jsou jimi například:

- **Vědecké řešení:** zkoumáním a měřením pacienta můžeme zjistit, že se nachází ve stejném stavu jako předtím, než mu byl podán aspirin. Jakmile změříme, že se pacient nachází ve výchozím stavu, můžeme na něj aplikovat druhý způsob zásahu, tedy mu nepodáme aspirin. Tímto způsobem dokážeme na jednu a tutéž jednotku použít oba způsoby zásahu. Pro příklad s pacientem není tento způsob řešení vhodný, protože dostaví-li se bolest hlavy někdy v budoucnu, může mít jinou příčinu, než bolest hlavy, kterou jsme léčili aspirinem.

- **Statistické řešení:** místo kauzální pravděpodobnosti budeme zkoumat průměrný kauzální účinek zásahu do modelu (užití aspirinu). Stejně jako v [2] definujeme průměrný kauzální účinek T jako rozdíl středních hodnot výsledků pro případy, kdy pacient dostal aspirin a pro případy, kdy dostal pouze placebo
$$T = \mathsf{E}\ R_0 - \mathsf{E}\ R_1, \tag{1.4}$$
kde R_0 a R_1 jsou indikátorové veličiny uzdravení zavedené dříve. Z naměřených dat jsme však schopni vyjádřit pouze střední hodnotu v rámci

skupiny pacientů, kteří dostali aspirin, $\mathsf{E}\ (R_1|R = 1)$ a v rámci skupiny pacientů, kteří dostali placebo, $\mathsf{E}\ (R_0|R = 0)$, kde veličina R určuje zařazení do skupiny, která dostala aspirin $R = 1$ nebo placebo $R = 0$. V kapitole 1.4 si ukážeme, že za určitých předpokladů můžeme střední hodnotu $\mathsf{E}\ R_i$ odhadovat podmíněnou střední hodnotou $\mathsf{E}\ (R_i|R = i)$, kde i nabývá hodnot 0 a 1.

1.3 Intervence

Intervence, neboli vnější zásah do modelu, simuluje fyzikální intervenci tím, že danou náhodnou proměnnou nahradí konstantou. Například náhodné proměnné X přiřadíme hodnotu x. Intervenci budeme značit operátorem $do(x)$. V případě, kdy není jasné, na jaké veličině provádíme intervenci, píšeme operátor $do(x)$ jako $do(X = x)$, abychom zdůraznili, že proměnné X přiřazujeme hodnotu x.

Skupinu, na které provádíme intervenci, označujeme jako *intervenční skupinu*. Skupinu, na které jsme intervenci neprovedli, označujeme jako *skupinu kontrolní*. V našem příkladě intervenční skupina pacientů byli pacienti, kteří dostali aspirin, a kontrolní skupina byli pacienti, kteří dostali placebo.

Máme-li dvě náhodné veličiny X a Y, tak rozdělení veličiny Y je rozdílné v modelu, na který provádíme intervenci, tedy $P(Y = y|do(X = x))$, kde y je hodnota veličiny Y, a v případě podmíněného rozdělení veličiny Y za podmínky, že známe veličinu X, tedy $P(Y = y|X = x)$. Rozdíl je v přístupu k pozorování. Operátor $do(x)$ reprezentuje intervenci v modelu, to znamená, že na model provedeme určitý zásah zvenčí a potom pozorujeme proměnnou Y. Zatímco, chceme-li zjistit podmíněnou pravděpodobnost $P(Y = y|X = x)$, pozorujeme celý model a zaznamenáváme pouze případy, kdy $X = x$.

Rozdíl mezi operátorem $do(x)$ a podmíněnou pravděpodobností si ilustrujeme na příkladu způsobu léčení bolesti hlavy u pacientů z kapitoly 1.1. Jako veličinu Y použijeme indikátorovou veličinu R zařazení do skupiny zavedenou v části 1.2. Veličina R nabývá dvou hodnot, je rovna 0, pokud pacient dostal placebo a je rovna 1, pokud dostal aspirin. Veličina X bude indikátorová veličina uzdravení pacienta, tedy $X = 0$, pokud se pacient neuzdravil a $X = 1$, pokud se pacient uzdravil. Chceme ukázat, že je rozdíl mezi těmito dvěma pravděpodobnostmi $P(R = 1|do(X = 1))$ a $P(R = 1|X = 1)$. Operátor $do(X = 1)$ v tomto případě je pouze hypotetický, protože neumíme daného pacienta donutit, aby se uzdravil. Pokud bychom takového zásahu byli schopni, tak dvě rozlišované pravděpodobnosti popisují situace: $P(R = 1|do(X = 1))$ – jaká je pravděpodobnost, že pacient dostal aspirin za podmínky, že víme, že se uzdravil. Pacient by se uzdravil v každém případě, proto pravděpodobnost toho, že dostal aspirin vůbec nezávisí na intervenci $do(X = 1)$ a platí $P(R = 1|do(X = 1)) = P(R = 1)$. V druhé situaci: $P(R = 1|X = 1)$ – jaká je pravděpodobnost, že pacient dostal aspirin za podmínky, že se uzdravil. Využijeme-li údaje z tabulky 1.1 a Bayesovy věty, dostaneme číselné vyjádření pravděpodobností, odkud je vidět, že je rozdíl mezi podmíněnou pravděpodobností a operátorem $do(x)$:

$$
\begin{aligned}
P(R=1|do(X=1)) &= P(R=1) = 0{,}5 \\
P(R=1|X=1) &= \frac{P(X=1|R=1)\cdot P(R=1)}{P(X=1)} = \frac{\frac{30}{100}\cdot 0{,}5}{\frac{42}{200}} \approx 0{,}71
\end{aligned}
$$

Na příkladu s pacienty je obtížné si představit provedení intervence kvůli tomu, že neumíme donutit pacienta, aby se uzdravil. Lépe lze problém ilustrovat na příkladu z [3], kde zkoumáme dvě indikátorové veličiny, veličina X indikuje, jestli prší a veličina Y indikuje, jestli je ulice mokrá. Pozorujeme-li, že je ulice mokrá, tak je velmi pravděpodobné, že prší, což vyjadřuje pravděpodobnost $P(X=1|Y=1)$. Pokud ale provedeme zásah zvenčí (intervenci na veličinu Y) tím, že na ulici vylijeme vodu a docílíme tak stavu, že je ulice mokrá, nebude mít mokrá ulice žádný vliv na to, jestli prší nebo ne (tedy na veličinu X). Pravděpodobnost, že prší, za intervence na veličinu Y je tedy stejná, jako samotná pravděpodobnost toho, že prší $P(X=1|do(Y=1)) = P(X=1)$, což se rovná podmíněné pravděpodobnosti $P(X=1|Y=1)$ pouze v případě, že veličiny X a Y jsou nezávislé, což obecně neplatí.

Sdružené rozdělení veličin X a Y před intervencí a po intervenci se liší. Před zásahem máme sdružené rozdělení X a Y definované sdruženou pravděpodobností

$$P(X=x, Y=y),$$

kde x je možná hodnota veličiny X, y je hodnota veličiny Y. Po zásahu máme sdružené rozdělení X a Y vyjádřené

$$P\left(Y=y|do(X=x)\right).$$

Známe-li sdružené rozdělení veličin v systému, můžeme vyjádřit efektivitu zásahu do systému (např. efektivitu léčby) pomocí rozdílu středních hodnot, kde x_0 a x_1 jsou dva různé druhy zásahu do původního systému na veličinu X, které chceme porovnávat. Efektivita zásahu vyjádřená rozdílem středních hodnot

$$\mathsf{E}\left(Y|do(x_1)\right) - \mathsf{E}\left(Y|do(x_0)\right).$$

Efektivitu zásahu lze měřit také poměrem středních hodnot

$$\frac{\mathsf{E}\left(Y|do(x_1)\right)}{\mathsf{E}\left(Y|do(x_0)\right)}.$$

Abychom mohli intervenci správně použít, potřebujeme vědět, jak určit intervenční skupinu jednotek v systému. Více si k tomu řekneme v další kapitole.

1.4 Randomizace

Rozdělení jedinců do intervenční a kontrolní skupiny je důležité. V případě, že by v jedné skupině například byli jedinci, kteří jsou vůči intervenci imunní, nemohli bychom z výsledku pokusu nic rozhodnout. Do kontrolní skupiny zařadíme nekuřáky a do intervenční skupiny kuřáky. Oběma skupinám zamezíme přístup k cigaretám a budeme na jednotlivcích měřit, jestli proti abstinenčním příznakům fungují nikotinové náplasti.

Z příkladu je jasně vidět, že rozdělení jedinců do skupin je nesmyslné. U nekuřáků se vůbec nebudou projevovat abstinenční příznaky, tudíž nebudou potřebovat nikotinové náplasti a případně by na ně náplasti neměly žádný vliv. Mohli bychom udělat mylný závěr, že na skupině kuřáků nikotinové náplasti fungují, zatímco na nekuřácích náplasti nefungují. Z tohoto důvodu je nutné mít jedince do intervenční a kontrolní skupiny správně náhodně zařazeny. A k tomu se využívá randomizace.

Randomizace je proces náhodného rozřazení jedinců do skupin tak, aby každý jedinec měl stejnou pravděpodobnost, že je přiřazen do kontrolní skupiny jako do intervenční skupiny. Takovýto proces může být například házení mincí. Výsledek hodu je náhodný, tudíž rozřazování jedinců do skupin podle hodu mincí by také bylo náhodné. Pokud máme více skupin, můžeme házet kostkou, a to nám opět zaručí, že pravděpodobnost zařazení jakéhokoliv jedince do libovolné skupiny je stejná. Proces randomizace je také míchání balíčku karet, kde chceme zaručit, že seřazení karet v balíčku bude náhodné, abychom zamezili možnosti podvádění. Náhodným rozřazením jedinců do skupin eliminujeme systematické chyby, které by mohly mít vliv na výsledek pokusu (viz příklad výše).

Vrátíme se k vyjádření průměrného kauzálního účinku T, který jsme si definovali v rovnici (1.4) jako $T = \mathsf{E}\ R_0 - \mathsf{E}\ R_1$. Obecně neplatí

$$\mathsf{E}\ R_0 = \mathsf{E}\,[R_0|R=0], \text{ ani} \qquad \mathsf{E}\ R_1 = \mathsf{E}\,[R_1|R=1].$$

Z [2] víme, že pokud však platí, že přiřazování jedinců do skupin je statisticky nezávislé se všemi ostatními veličinami v modelu, tyto dva výrazy se rovnají. Rozřazování jedinců do skupin (veličina R) je nezávislé s ostatními veličinami $(R_0,\ R_1)$, pokud je randomizace správně provedena a jedinci jsou do skupin rozřazovaní náhodně.

V případě randomizovaného pokusu můžeme tedy průměrný kauzální účinek T vyjádřit jako

$$T = \mathsf{E}\,[R_0|R=0] - \mathsf{E}\,[R_1|R=1],$$

kde obě střední hodnoty umíme odhadnout z napozorovaných dat jako příslušné nestranné odhady.

Pokud tedy můžeme na systém jedinců, se kterými v rámci pokusu pracujeme, provést randomizaci, vždy můžeme vyjádřit průměrný kauzální účinek zásahu do modelu.

Pro randomizování praktických pokusů existuje množství přístupů, stručný přehled několika z nich je popsán dále.

1.4.1 Úplná randomizace

Úplná randomizace je proces náhodného rozřazení do skupin, který je založený na hlavní veličině, která může mít různé úrovně, a dalších rušivých veličinách. Úplná randomizace kontroluje hlavní veličinu tím způsobem, že snižuje její rozptyl. Ostatní vedlejší veličiny ponechává bez zásahu. Například máme 25 různých pacientů, které chceme léčit 5 druhy různých léčiv, a zkoumáme účinek daného léčiva. Hlavní veličina je druh léčiva, má 5 úrovní, neboli 5 druhů léků. Vedlejší veličinou může být například pohlaví, výška pacienta nebo jeho hmotnost. Pokud je pacient například těžší, nemusela by mu stačit dané dávka léku a nezabíralo by na něho, ať by dostal jakýkoliv lék. Vedlejší veličinu ale nijak neomezujeme.

Počet randomizovaných jednotek musí být dělitelný počtem úrovní hlavní veličiny, abychom měli stejné zastoupení každé úrovně. V našem případě je počet pacientů – 25, dělitelný počtem léků – 5. Každý podávaný lék bude zastoupen mezi pacienty právě pětkrát. Očíslujeme-li si pacienty například abecedně podle příjmení, potom hledáme sekvenci 25 čísel sestavených náhodně tak, aby každé číslo od 1 do 5 bylo v této sekvenci zastoupeno právě pět krát. Počet všech možných sekvencí je $\frac{25!}{5!\cdot 5!\cdot 5!\cdot 5!\cdot 5!} \sim 6 \cdot 10^{14}$ a každá z nich je stejně pravděpodobná. Vybereme-li tedy jednu libovolnou sekvenci, máme úplně randomizovaný experiment s jedním hlavním faktorem na pěti úrovních a každá úroveň má pět opakování. Například abecedně seřazení pacienti mohou obdržet následující léky $(3, 4, 2, 1, 3, 5, 4, 2, 1, 5, 1, 3, 3, 1, 2, 5, 4, 3, 4, 4, 2, 5, 1, 5, 2)$.

Hlavních faktorů může být i více než jeden. Vždy ale platí, že celkový počet jednotek, které chceme randomizovat, musí být dělitelný každým počtem úrovně všech hlavních faktorů.

1.4.2 Bloková randomizace

V případě úplné randomizace nijak nekontrolujeme vedlejší veličiny a jelikož jedince zařazujeme do skupin náhodně, nemáme zajištěno, že by vedlejší veličiny měly ve skupinách stejné zastoupení. Obzvláště pokud máme menší množství jedinců, tak nerovnoměrné zastoupení vedlejších veličin ve skupinách může způsobit chyby v měření. Bloková randomizace, jak je popsáno v [4] zvyšuje pravděpodobnost, že v každé skupině bude stejný počet jedinců dané vedlejší veličiny tím, že v rámci jednoho bloku je přiřazeno stejné množství jedinců do kontrolní skupiny jako do intervenční skupiny. Z toho důvodu velikost bloku musí být dělitelná počtem skupin, do kterých rozřazujeme. Rozřazujeme-li do kontrolní a intervenční skupiny – celkový počet skupin je tedy 2, nemůžeme mít blok velikosti 3. Můžeme mít ale blok o velikosti 4 a v rámci tohoto bloku máme celkem 6 možných alokování jedinců do skupin:

$$\begin{array}{ll} [\mathrm{K} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{I}], & [\mathrm{I} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{K}], \\ [\mathrm{K} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{I}], & [\mathrm{I} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{I}], \\ [\mathrm{K} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{K}], & [\mathrm{I} \quad \mathrm{I} \quad \mathrm{K} \quad \mathrm{K}], \end{array}$$

kde K značí zařazení daného jedince v bloku do kontrolní skupiny a I značí zařazení do intervenční skupiny. Chceme-li kontrolovat například vedlejší veličinu hmotnost, tak každý blok označuje jiný interval hmotností (první blok obsahuje pacienty spadající do kategorie 50 kg–59 kg, druhý blok pacienty s 60 kg–69 kg a tak dále až šestý blok obsahuje pacienty o hmotnostech 100 kg–109 kg) a randomizace následně probíhá uvnitř každého bloku. Pokud bychom měli 24 pacientů, které máme rozdělené do bloků podle hmotností popsaných výše a chceme u každého pacienta určit, jestli si má vzít aspirin A, nebo placebo P, tak jedna z možností umístění pacientů je:

$$\begin{array}{ll} \text{1. blok: } [\mathrm{P} \quad \mathrm{P} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{A}], & \text{2. blok: } [\mathrm{A} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{P} \quad \mathrm{P}], \\ \text{3. blok: } [\mathrm{P} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{P}], & \text{4. blok: } [\mathrm{P} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{P}], \\ \text{5. blok: } [\mathrm{P} \quad \mathrm{P} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{A}], & \text{6. blok: } [\mathrm{P} \quad \mathrm{A} \quad \mathrm{P} \quad \mathrm{A}]. \end{array}$$

Nevýhodou blokové randomizace je, že proces rozřazování do skupin v rámci bloku je předvídatelný. Pokud již máme polovinu bloku rozřazenou do kontrolní skupiny, je jasné, že druhá polovina jedinců v rámci bloku bude zařazena do intervenční skupiny. Lepší způsob blokové randomizace je bloková randomizace s náhodně vybranou velikostí bloků.

1.4.3 Bloková randomizace s náhodně vybranou velikostí bloku

Pro blokovou randomizaci s náhodně vybranou velikostí bloku platí stejné podmínky na počet skupin a velikost bloků jako v případě blokové randomizace. Stejným způsobem probíhá i zařazení jedinců do bloků, které kontrolují nějakou vedlejší veličinu. Pro zmenšení vlivu předvídatelnosti při zařazování jedinců do skupin v rámci bloku je velikost bloku náhodně volena z několika možných velikostí.

Použijeme stejný příklad jako pro blokovou randomizaci. Náhodně budeme vybírat velikost bloku 4 nebo 8, například v pořadí 4, 8, 8, 4 pro 4 bloky. Nyní máme pacienty rozdělené podle hmotností na první blok 50 kg–64 kg, druhý blok pacienty s 65 kg–79 kg, třetí blok 80 kg–94 kg, čtvrtý blok pacienty s 95 kg–109 kg. Rozřazení pacientů do kontrolní a intervenční skupiny může být například následující:

1. blok: [A, P, P, A],
2. blok: [A, A, A, P, A, P, P, P],
3. blok: [P, A, P, A, A, P, A, P],
4. blok: [P, A, P, A].

2. Strukturální modely

V této kapitole se budeme zabývat hledáním vhodné reprezentace kauzálních vztahů, máme-li k dispozici napozorovaná data, na kterých jsme provedli intervenci. Nejprve si kauzální strukturu zavedeme pomocí grafů s využitím termínů z [3], poté si definujeme *strukturální rovnicový model*, abychom byli schopni kvantifikovat kauzální vztahy mezi veličinami.

2.1 Reprezentace kauzálních vztahů za pomoci grafů

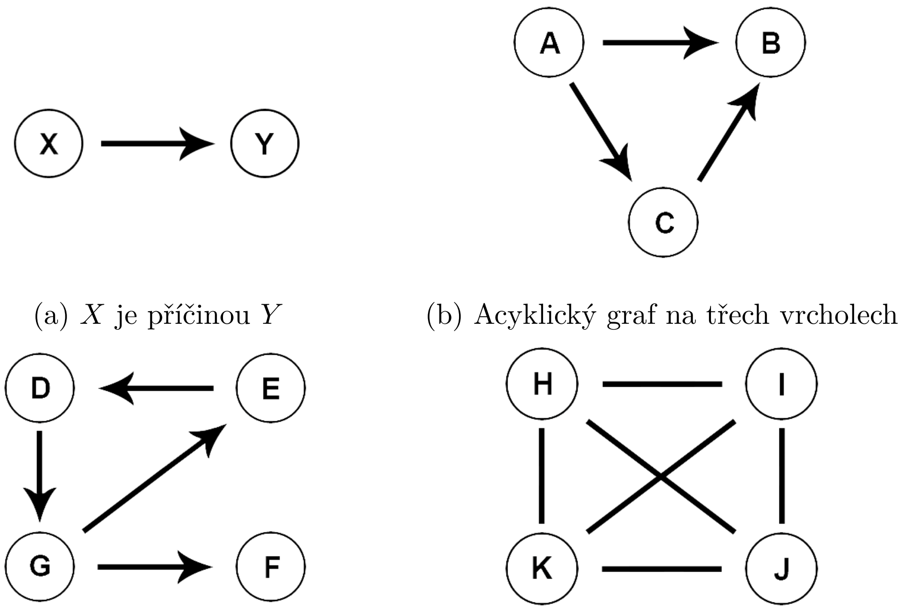
Použijeme základní pojmy z teorie grafů jako například vrchol, hrana, orientace hrany, cesta bez toho, abychom si je definovali, další základní pojmy shrnuje definice 1.

Definice 1 (Základní definice)**.** *Definujeme tyto základní pojmy z [3]:*

- *Základní vlastnost kauzálních vztahů X* je příčinou Y *značíme orientovanou hranou z vrcholu X do vrcholu Y.*
- *Dva vrcholy v grafu jsou* sousedící*, pokud mezi nimi existuje hrana.*
- Rodiče *vrcholu X jsou všechny vrcholy, ze kterých směřují orientované hrany do X.*
- Děti *vrcholu X jsou všechny vrcholy, do kterých míří z X orientované hrany.*
- Cyklický graf *je graf, který obsahuje orientovanou kružnici, tedy existuje orientovaná posloupnost vrcholů začínající z jednoho vrcholu, která se vrátí opět do toho stejného vrcholu.*
- Acyklický graf *je graf, který neobsahuje orientovanou kružnici.*
- Kostra grafu *G je neorientovaný podgraf $G^{'}$, který obsahuje všechny vrcholy grafu G a neobsahuje žádnou kružnici.*
- Úplný graf *je graf, ve kterém z každého vrcholu vede hrana do všech ostatních vrcholů.*
- *Nechť X, Y a Z jsou vrcholy. Řekneme, že cesta $X - Y - Z$ je* neblokovaná trojice *(z anglického unshielded tripple), pokud X a Z nejsou sousedící vrcholy. Dále řekneme, že vrchol Y je* kolider *(z anglického collider), pokud platí následující kauzální vztah:*

  $$X \longrightarrow Y \longleftarrow Z.$$

  Pokud navíc neexistuje hrana mezi X a Z, řekneme, že Y je neblokovaný kolider*.*
- Konfounder *(z anglického confounder) je skrytá proměnná, která je společnou příčinou alespoň dvou pozorovaných proměnných. Množina obsahující skryté konfoundery je podmnožinou množiny skrytých proměnných.*



(a) X je příčinou Y

(b) Acyklický graf na třech vrcholech

(c) Cyklický graf na čtyřech vrcholech

(d) Úplný graf na čtyřech vrcholech

Obrázek 2.1: Ukázkové grafy

Pojmy z definice 1 si ilustrujeme na grafech z obrázku 2.1. Na obrázku 2.1a) je znázorněn kauzální vztah mezi veličinami X a Y. Protože je hrana orientována k vrcholu Y, znamená to, že veličina X (reprezentovaná jako vrchol X) způsobila, že nastala veličina Y, tedy veličina X je příčinou veličiny Y.

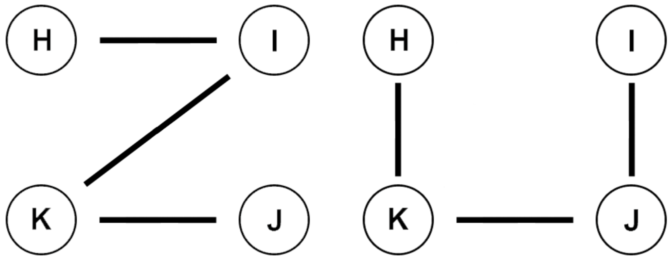
Vrcholy D a E na obrázku 2.1c) jsou sousedící, zrovna tak vrcholy D a G, E a G, G a F, protože mezi každou zmíněnou dvojicí vrcholů existuje hrana. Vrcholy E a F sousedící nejsou, protože mezi nimi hrana neexistuje.

Graf na obrázku 2.1b) je acyklický, protože v něm neexistuje orientovaná kružnice, zatímco v grafu na obrázku 2.1c) je orientovaná kružnice tvořená vrcholy E, D a G, proto je graf na obrázku 2.1c) cyklický.

Vrchol A na obrázku 2.1b) je rodič vrcholů B a C a naopak vrcholy B a C jsou děti vrcholu A. Neblokovanou trojici tvoří například vrcholy G, E a F z obrázku 2.1c), protože neexistuje hrana mezi vrcholy E a F. Její prostřední vrchol G není kolider, protože hrany jsou orientovány opačným směrem – kauzálními pojmy řečeno, vrchol G, který značí nějaký jev G, je společnou příčinou jevů E a F. Vrchol B na obrázku 2.1b) je kolider, protože do něho směřují dvě různé hrany, čili je společným účinkem jevů A a C. Vrchol C ale není neblokovaný kolider, protože vrcholy A a B jsou spojeny hranou, pokud by hrana mezi těmito dvěma vrcholy neexistovala, byl by vrchol C neblokovaný kolider.

V grafech nemáme určeno, že by nějaký vrchol měl vlastnosti skryté proměnné (jev, který označuje tento vrchol by nebyl změřen). Pokud bychom ale řekli v grafu na obrázku 2.1b), že vrchol A označuje skrytou proměnnou a vrcholy B a C označují pozorovanou proměnnou, tak by vrchol A byl konfounder, protože je jako skrytá proměnná příčinou dvou různých pozorovaných proměnných.

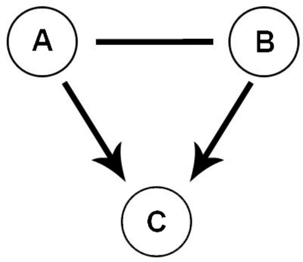
Graf na obrázku 2.1d) je úplný, protože z každého vrcholu vede hrana do zbylých tří vrcholů. Na tomto grafu si ilustrujeme také pojem kostry grafu. Kostra grafu nemusí být pouze jedna pro daný graf. Například v úplném grafu na čtyřech



Obrázek 2.2: Dva typy kostry úplného grafu na čtyřech vrcholech. Zbylé kostry získáme rotací hran každého z typů kostry podle pomyslného středu čtverce, který tvoří vrcholy, postupně o 90°, 180° a 270° a pro první kostru navíc i zrcadlením podle horizontální osy.

vrcholech jsme schopni vybrat 8 podgrafů, které splňují podmínku, že obsahují všechny vrcholy a neobsahují kružnici. Příklad dvou možných koster grafu z obrázku 2.1d) je vidět na obrázku 2.2.

V celé teorii předpokládáme, že žádná proměnná nemůže být příčinou sama sebe ať už přímou, nebo nepřímou. Tudíž v grafu nemůže existovat žádný orientovaný kruh, ani smyčka na jednom vrcholu (hrana, která vede z daného vrcholu do toho samého vrcholu). Kategorii takových grafů nazýváme *orientované, acyklické grafy* (použijeme zkratku DAG z anglického *directed acyclic graphs*), například graf na obrázku 2.1b).



Obrázek 2.3: Úplný, částečně orientovaný, acyklický graf – CPDAG, na třech proměnných.

DAG není možné sestavit pouze z napozorovaných dat, kvůli chybějícím pozorováním, která nám znemožní určit přesnou kauzální strukturu daného problému. Použitím napozorovaných dat ale můžeme získat třídu ekvivalence, do kte-ré hledaný graf patří. V rámci třídy ekvivalence mají grafy stejnou kostru a stejné neblokované kolidery. Třídu ekvivalence můžeme reprezentovat pomocí *úplného, částečně orientovaného, acyklického grafu* – zkráceně CPDAG z anglického *completed partially directed acyclic graph*. Pro každou neorientovanou hranu v CP-DAG existují aspoň dva DAG, jeden za každou možnou orientaci hrany. DAG na obrázku 2.1b) tedy spadá do třídy ekvivalence znázorněné CPDAG na obrázku 2.3.

2.2 Strukturální rovnice

Grafy zachycující kauzální strukturu problému nepopisují velikost působení veličin mezi sebou. Abychom mohli tyto kauzální vztahy mezi veličinami kvantifikovat, zavedeme si v této kapitole pojem *strukturální rovnice*, které vycházejí z grafů zachycujících kauzální strukturu a již v sobě obsahují velikost působení veličin.

Pomocí grafů znázorňujících kauzální strukturu daného problému nejsme schopni určit, jak velké jsou účinky daných veličin. Tuto skutečnost zachycují až strukturální rovnicové modely. Základní příklad strukturálních rovnic je *lineární regrese*, kde máme vztahy mezi proměnnými vyjádřené lineární rovnicí. Stejně jako nelze v lineární regresi vyjádřit závislost Y na X, známe-li závislost X na Y, ani v případě strukturálních rovnic, tedy kauzálních jevů, nejsme schopni popsat opačný vztah mezi proměnnými, známe-li jeden směr kauzálního působení. Strukturální rovnicový model (zkracujeme SEM z anglického *structural equation model*) se snaží oprostit od značení účinku pomocí algebraické reprezentace (koeficient v rovnici) a opětovně nadefinovat účinek jako obecnou kapacitu přenášení změn mezi proměnnými. Obecný rovnicový strukturální model je tvaru

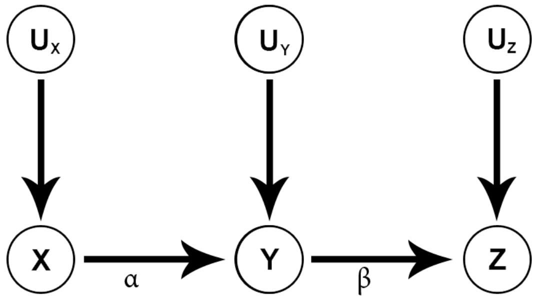
$$X_i = f_i(PA_i, U_i), \tag{2.1}$$

kde X_i je i-tá proměnná v modelu, PA_i jsou rodiče proměnné X_i, které známe z grafu zachycujícího kauzální strukturu daného modelu, a U_i jsou chybové proměnné X_i.

Definice 2 (SEM – Structural Equation Model; [5])**.** *Máme soustavu rovnic ve tvaru* (2.1)*, které reprezentují nějaký kauzální proces. Systém takových rovnic nazveme* strukturální*, pokud tyto rovnice jsou autonomní, tzn. každá rovnice je invariantní vůči možným změnám ve znění jiných rovnic.*

Definice 3 (Vnější a vnitřní proměnné)**.** Vnější proměnné *reprezentují skryté nebo nepozorované proměnné, které statistik chce ponechat nevysvětlené. Jsou to proměnné, které ovlivňují ostatní proměnné =* vnitřní proměnné*, ale samy nejsou ničím jiným ovlivňovány.*

Nově zavedené pojmy si ilustrujeme na příkladu znázorněném na následujícím obrázku:



Obrázek 2.4: Diagram znázorňující ilustrativní kauzální strukturu vzorového problému.

Kauzální strukturu z obrázku 2.4 lze popsat pomocí rovnicového strukturálního modelu, tedy SEM, následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} X &= f_X(U_X), \\ Y &= f_Y(X, U_Y), \\ Z &= f_Z(Y, U_Z). \end{aligned} \tag{2.2}$$

Ve třetí rovnici pro proměnnou Z se nevyskytuje proměnná X, sice z obrázku vidíme, že na Z proměnná X působí skrze Y, ale v SEM v řádku pro i-tou proměnnou jsou zachyceny pouze rodiče i-té proměnné.

V SEM (2.2), jsou vnitřní proměnné X, Y a Z a vnější proměnné jsou U_X, U_Y a U_Z. Pokud jsou vnější proměnné navzájem korelované, tak se tato korelace v grafu znázorňuje pomocí čárkované hrany orientované na obě strany, což v grafu 2.4 není zachyceno. V grafu je ale znázorněna kovariance mezi vnitřními veličinami X a Y a mezi vnitřními veličinami Y a Z, což vyjadřují koeficienty α a β na hranách mezi danými vrcholy grafu

$$\operatorname{cov}(X, Y) = \alpha, \qquad \operatorname{cov}(Y, Z) = \beta.$$

Je důležité do grafu zaznamenávat všechny informace, které jsme z naměřených dat získali. Například z obrázku 2.4 víme, že

$$\operatorname{cov}(U_X, U_Y) = 0 \ \text{ a } \ \operatorname{cov}(U_Y, U_Z) = 0,$$

protože mezi vrcholy U_X a U_Y, ani mezi vrcholy U_Y a U_Z není vyobrazena čárkovaná hrana znázorňující kovarianci.

Pokud bychom v modelu 2.2 použili operátor $do(X = x_0)$, neboli provedli intervenci na veličinu X, dostaneme model reprezentovaný SEM

$$\begin{aligned} X &= x_0, \\ Y &= f_Y(X, U_Y), \\ Z &= f_Z(Y, U_Z). \end{aligned} \tag{2.3}$$

2.3 Lineární regrese

Lineární regrese je základní příklad strukturálního modelu pro případ, kdy máme pouze jednu proměnnou X, tudíž rovnice f_i z (2.1) je pouze jedna ($i = 1$) a je lineární. Rodič proměnné X je proměnná Y a vnější proměnná U_X je značena jako chybová proměnná ε.

Model v případě jednoduché lineární regrese jako v [6] je popsán náhodnými veličinami X a Y, regresními koeficienty β_0, β_1 a chybovou veličinou ε. O proměnné ε předpokládáme, že má normální rozdělení s nulovou střední hodnotou a pevně daným neznámým rozptylem: $\varepsilon \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$. O proměnné X se hovoří jako o nezávislé proměnné a o proměnné Y jako o závislé proměnné.

SEM pro lineární regresi vypadá následovně

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon.$$

Chybovou veličinu ε nejsme schopni napozorovat, ale protože víme, že má nulovou střední hodnotu a je nezávislá na X, tak můžeme psát podmíněnou střední hodnotu Y za podmínky X jako

$$\mathsf{E}\,[Y|X] = \beta_0 + \beta_1 X. \tag{2.4}$$

Na datech provedeme n pozorování proměnných X a Y a výsledky pozorování si zaznačíme jako hodnoty $X_1, \dots, X_n$ pro hodnoty veličiny X a $Y_1, \dots, Y_n$ pro hodnoty veličiny Y. Naším cílem je proložit naměřená data přímkou, neboli odhadnout parametry β_0, β_1, které popisují prokládanou přímku. Hledaná přímka bude tedy tvaru

$$y = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x. \tag{2.5}$$

Parametry β_0, β_1 se odhadují metodou nejmenších čtverců, tj. hledáme minimální reálné hodnoty b_0 a b_1 ve výrazu

$$(\widehat{\beta}_0,\ \widehat{\beta}_1) = \operatorname*{argmin}_{b_0,\, b_1 \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - b_0 - b_1 X_i)^2, \tag{2.6}$$

abychom dostali odhady $\widehat{\beta}_0$, $\widehat{\beta}_1$ parametrů β_0, β_1.

Pomocí regrese jsme schopni i předpovídat hodnoty závislé veličiny, neboli pomocí pravé strany rovnice přímky (2.5), můžeme určit levou stranu rovnice – hodnotu závislé proměnné y. Potřebujeme k tomu znát regresní koeficienty – z předchozích pozorování vyjádříme odhad regresních koeficientů $\widehat{\beta}_0$, $\widehat{\beta}_1$ a napozorujeme veličinu X. To nám stačí k vyjádření odhadu veličiny Y. Například z předchozích testů víme, že výška syna při narození závisí na výšce otce. Z dříve pozorovaných dat jsme odhadli regresní koeficienty $\widehat{\beta}_0$, $\widehat{\beta}_1$ a známe výšku otce, označíme ji x, výšku syna při narození y můžeme vyjádřit ve tvaru (2.5).

Známe-li však porodní výšku syna, neříká nám to nic o výšce jeho otce, protože směr regrese nemůžeme obrátit. Koeficienty $\widehat{\beta}_0$ a $\widehat{\beta}_1$ jsme odhadovali z rovnice (2.3) metodou nejmenších čtverců (2.6). Pokud bychom však chtěli odhadovat výšku otce X, známe-li porodní výšku syna Y, museli bychom nejdříve odhadnout koeficienty $\beta_0^{'}$ a $\beta_1^{'}$ z rovnice:

$$X = \beta_0^{'} + \beta_1^{'} Y + \varepsilon^{'}, \tag{2.7}$$

pomocí metody nejmenších čtverců jako řešení rovnice:

$$(\widehat{\beta}_0^{'},\ \widehat{\beta}_1^{'}) = \operatorname*{argmin}_{b_0,\, b_1 \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^{n} (X_i - b_0 - b_1 Y_i)^2. \tag{2.8}$$

Na první pohled je zřejmé, že rovnice (2.6) a (2.8) se liší, tudíž se budou lišit i regresní koeficienty rovnic (2.3) a (2.7), tedy v našem příkladu nejsme schopni pomocí koeficientů β_0, β_1 vyjádřit závislost výšky otce na porodní výšce syna.

2.4 Odhadování kauzální struktury

V této části si uvedeme několik způsobů, jak z napozorovaných dat sestavit graf zachycující kauzální závislosti mezi pozorovanými veličinami. Na napozorovaných veličinách budeme zkoumat podmíněné nezávislosti s pomocí *d-separace.*

Nejprve si proto zavedeme a ilustrujeme pojem d-separace, a poté rozebereme několik metod z [3] pro určování kauzální struktury na datech, která jsou pouze napozorovaná a neobsahují žádné skryté konfoundery.

Definice 4 (d-separace; [5])**.** *S je libovolná množina vrcholů v daném grafu, může být i prázdná. Řekneme, že množina vrcholů S* blokuje cestu p*, pokud platí alespoň jedno z následujících tvrzení:*

(i) p obsahuje alespoň jeden vrchol, ze kterého vychází hrana orientovaná od tohoto vrcholu (daný vrchol je příčinou) a tento vrchol je obsažen v množině S,

(ii) p obsahuje alespoň jeden kolider, který není v S a nemá žádného následovníka v S.

Pokud S blokuje všechny cesty z X do Y, potom řekneme, že S d-separuje *X* a *Y.*

Poznámka. Množina S může obsahovat i vrchol, který neleží na cestě p. Tedy cesta p může být blokována vrcholem, který neleží přímo na cestě p, ale je účinkem (vede do něj hrana) vrcholu cesty. Například v situaci

$$X \to V \leftarrow Y \to Z.$$

V tomto případě vrchol Z blokuje cestu z X do Y $X \to V \leftarrow Y$ z podmínky (i), kdy z vrcholu cesty Y vede hrana do vrcholu Z, který je v separační množině S.

Z definice d-separace dostaneme, že dva vrcholy X a Y jsou blokovány vrcholem Z v případě, kdy:

- X a Y jsou spojeny řetízkem a vrchol Z je v řetízku,

$$X \to Z \to Y, \quad X \leftarrow Z \leftarrow Y,$$

- Z je společnou příčinou X a Y,

$$X \leftarrow Z \to Y,$$

- vrcholy X a Y mají společný účinek (je mezi nimi kolider) na vrchol, který není vrchol Z a Z není ani následovník tohoto společného účinku,

$$X \to V \leftarrow Y \to Z.$$

První dva příklady vychází z části definice (i) a třetí příklad vychází z části definice (ii).

Pomocí neblokované trojice vrcholů můžeme určit podmíněné nezávislosti s využitím příkladů z [7], abychom následně mohli dát do spojitosti d-separaci a podmíněnou nezávislost.

Máme-li tři veličiny X, Y a Z, u kterých chceme určit vzájemné kauzální působení v případě, kdy X a Y na sebe přímo nepůsobí, mohou nastat celkem 4 situace orientace hran mezi veličinami:

$$\begin{array}{ll} X \rightarrow Z \rightarrow Y, & X \rightarrow Z \leftarrow Y, \\ X \leftarrow Z \rightarrow Y, & X \leftarrow Z \leftarrow Y. \end{array}$$

V případě $X \rightarrow Z \rightarrow Y$ (stejně tak i v případě $X \leftarrow Z \leftarrow Y$) platí, že krajní veličiny X a Y jsou nezávislé, kontrolujeme-li prostřední veličinu Z v řetízku. Například veličina X představuje kouření, veličina Z výskyt dehtu v plicích a veličina Y rakovinu plic. Víme, že platí, že kouření způsobuje výskyt dehtu v plicích, což dále způsobuje rakovinu plic. Pokud bychom kontrolovali výskyt dehtu v plicích, tak se veličiny X a Y stanou nezávislé, protože přerušíme řetízek kauzálních působení mezi nimi. Platí tedy $X \perp Y|Z$. Veličina Z také blokuje cestu mezi X a Y, protože se jedná o řetízek. Protože se jedná o jedinou cestou mezi X a Y, tak Z d-separuje veličiny X a Y.

V případě $X \leftarrow Z \rightarrow Y$, kdy je veličina Z společnou příčinou X a Y, platí, že X a Y jsou nezávislé, pokud kontrolujeme jejich společnou příčinu Z. Veličina X představuje počet čápů ve městě, veličina Y představuje počet narozených dětí ve městě. Mezi veličinami X a Y je pozitivní korelační vztah, což znamená, že s rostoucím počtem čápů se zvětšuje i počet narozených dětí. Korelace není způsobena tím, že čápi nosí děti, ale tím, že ve větších městech se rodí více dětí a zároveň se v nich zdržuje více čápů. Pokud tedy budeme kontrolovat velikost města, tak se počet čápů a počet narozených dětí stanou na sobě nezávislé. Dostáváme tedy $X \perp Y|Z$. Stejně jako v předchozím případu platí, že veličina Z d-separuje veličiny X a Y.

V případě $X \rightarrow Z \leftarrow Y$, kdy veličina Z je kolider, platí, že veličiny X a Y jsou závislé, kontrolujeme-li Z, a to i v případě, kdy o nich víme, že původně na sobě byly nezávislé. Toto můžeme ukázat na příkladě, kdy máme dva vojáky, kteří střílí na vězně. Veličiny X a Y představují informaci o tom, jestli daný voják vystřelil a veličina Z říká, jestli je vězeň naživu. Vojáci střílí na vězně nezávisle na sobě. Tedy platí, že $X \perp Y$. Pokud ale víme, že voják X nevystřelil a zároveň kontrolujeme veličinu Z, tedy víme, že vězeň zemřel, tak musí platit, že voják Y vystřelil. Tím dostáváme podmíněnou závislost mezi veličinami X a Y za podmínky Z. V tomto případě ani neplatí, že by veličina Z d-separovala veličiny X a Y, protože je porušena podmínka (ii) z definice d-separace.

Rozborem všech možných situací, které by mohly pro tři veličiny nastat, jsme zjistili, že v případě, kdy jsou veličiny X a Y nezávislé za podmínky třetí veličiny Z, platí, že veličina Z d-separuje tyto dvě veličiny, tedy d-separace nám dává nutnou a postačující podmínku pro určení podmíněných nezávislostí mezi dvěma proměnnými, známe-li třetí proměnnou v DAG. Obecně lze místo Z brát celou separační množinu S. Dále jsme také zjistili, že v případě, kdy máme neblokovanou trojici vrcholů $X - Z - Y$ a známe separační množinu vrcholů X a Y, můžeme tuto trojici orientovat v případě, kdy Z není v separační množině. Jestliže Z není v separační množině, znamená to, že Z ne-d-separuje vrcholy X a Y a nutně tedy musí být trojice orientována tak, aby vrchol Z byl kolider, tedy $X \rightarrow Z \leftarrow Y$, protože ve všech ostatních případech je vrchol Z v separační množině. Tento poznatek využijeme při konstrukci PC-algoritmu v další části.

2.4.1 PC algoritmus

PC algoritmus[1] je algoritmus na získání CPDAG z úplného neorientovaného grafu pomocí podmíněných nezávislostí a d-separace. Algoritmus běží ve třech krocích a je definován na úplném neorientovaném grafu.

Algoritmus:
Vstup: úplný neorientovaný graf

Krok 1. Ze všech možných dvojic vybereme jednu libovolnou dvojici vrcholů X a Y. Pokud existuje libovolná množina vrcholů M, která splňuje $X \perp Y \mid M$, zrušíme hranu mezi vrcholy X a Y. Pokračujeme další dvojicí, dokud nevyčerpáme všechny možné dvojice, potom pokračujeme krokem 2.

Krok 2. Vybereme libovolnou, dosud neorientovanou, neblokovanou trojici $X - Z - Y$, pokud Z není v separační množině vrcholů X a Y, tak orientujeme hrany $X \to Y \leftarrow Z$. Pokračujeme s další dosud nepoužitou neblokovanou trojicí, dokud nevyčerpáme všechny neblokované trojice, potom pokračujeme krokem 3.

Krok 3. Vybereme neorientovanou hranu grafu, kterou jsme ještě v kroku 3. nezkoušeli orientovat. Zvolíme jednu orientaci hrany, pokud touto orientací vznikl v grafu kruh, tuto hranu smažeme, pokud touto orientací vznikla v grafu V-struktura (vytvořila se orientace $X \to Y \leftarrow Z$), taktéž hranu smažeme. Stejný postup opakujeme pro druhou orientaci hrany. Pokud jsme hranu nesmazali, necháme ji neorientovanou a pokračujeme na další, dosud nepoužitou hranu. Projdeme-li všechny neorientované hrany, algoritmus končí.

Výsledkem algoritmu je CPDAG.

V prvním kroku najdeme kostru grafu. Pro dvojice vrcholů otestujeme, jestli pro ně existuje separační množina M, díky které by vrcholy byly podmíněně nezávislé. Pokud taková separační množina existuje, smažeme hranu mezi X a Y a pokračujeme na další dvojici vrcholů. Hranu můžeme smazat, protože pokud jsou za nějakých podmínek veličiny X a Y nezávislé, tak nemohou mít na sebe přímý kauzální vliv. Pokud platí $X \perp Y \mid M$ s libovolnou separační množinou M, tak v grafu mezi X a Y neexistuje hrana. Nejprve ověřujeme nezávislosti s malými separačními množinami (začneme se separační množinou obsahující pouze jeden vrchol) a postupně zvětšujeme jejich velikost přidáváním dalších vrcholů.

Ve druhém kroku využijeme separační množinu vrcholů X a Y, abychom orientovali neblokované kolidery. Víme, že neblokovaná trojice má mít orientaci V-struktury ($X \to Z \leftarrow Y$), pokud Z nepatří do separační množiny X a Y z poznatků z úvodu kapitoly 2.4. Pokud Z patří do separační množiny X a Y, nemůžeme jednoznačně určit, která orientace hran má být použita, neblokovaná trojice tedy zůstává zatím neorientována.

Ve třetím kroku vylučovací metodou určíme orientaci dosud neorientovaných

[1] PC algoritmus je název algoritmu, nejedná se o zkratku PC pro probability of causation, kterou jsme definovali v kapitole 1.1, ani pro personal computer.

hran. Pokud by nějaká přidaná hrana vytvořila cyklus, tak ji vyloučíme, protože hledáme orientovaný necyklický graf, který neobsahuje kruh. Zrovna tak můžeme vyloučit hrany, které by svým orientováním vytvořily V-strukturu $X \to Y \leftarrow Z$, protože všechny takové V-struktury byly doplněny v druhém kroku.

Tento algoritmus má exponenciální čas, ale pro řídké grafy zvládne doběhnout i pro několik tisíc proměnných v přijatelném čase.

2.4.2 Skórové metody

Skórové metody pracují s ohodnocením grafu, neboli skóre. Podle určitých pravidel přiřadí danému DAG skóre, kterým se potom porovnávají DAG navzájem a vybere se takto DAG nejlépe popisující danou kauzální strukturu. Aby skórová metoda byla rychlejší a spolehlivější, je výhodné, aby byla skóre-ekvivalentní. To znamená, že pro všechny grafy v jedné třídě ekvivalence dostaneme stejné skóre. Skórové metody tak neupřednostní jeden graf před druhým, pokud oba grafy patří do jedné třídy ekvivalence a jsou statisticky nerozeznatelné. Skóre grafu by také mělo být rozložitelné, to znamená, že jsme schopni vyjádřit skóre grafu jako součet ohodnocení jednotlivých vrcholů. V případě rozložitelnosti se zrychlí výpočet celkového skóre.

Pro grafy s menším počtem vrcholů (označme počet vrcholů k) je možné spočítat skóre pro každý DAG na k vrcholech a tato skóre následně porovnat mezi sebou. DAG s největším skóre nejlépe popisuje danou kauzální strukturu. Tento přístup není ovšem vhodný pro větší počet vrcholů, s rostoucím k se totiž exponenciálně zvětšuje počet DAG na k vrcholech. Pro větší počet vrcholů grafu je vhodné použít skórovou metodu nazývanou skórový hladový algoritmus z anglického názvu *Greedy Equivalent Search* (zkráceně GES), který je uveden v [8].

2.4.3 Metody pro zcela identifikovatelné modely

Algoritmy z předchozích dvou sekcí vrací jako výsledek pouze třídu ekvivalence, do které se řadí hledaná kauzální struktura problému řešeného z napozorovaných dat. Za určitých předpokladů je možné jednoznačně určit i skutečnou kauzální strukturu problému, tedy DAG.

Hledanou kauzální strukturu problému si označíme jako graf G. V [9] je ukázáno, že pokud jsou strukturální rovnice daného problému ve tvaru aditivního modelu šumu (zkráceně ANM z anglického *Additive Noise Model*)

$$X_i = f_i(PA_i) + n_i,$$

kde PA_i je množina rodičů vrcholu X_i v grafu G, n_i jsou nezávislé chybové proměnné, tak je možné za určitých technických předpokladů jednoznačně určit z napozorovaných dat skutečnou kauzální strukturu problému – graf G.

V případě, že chybové proměnné n_i mají normální rozdělení a funkce f_i jsou lineární, nelze za platnosti technických předpokladů jednoznačně určit kauzální strukturu, lze pouze určit třídu ekvivalence, do které hledaná kauzální struktura patří. Pokud je navíc splněna podmínka rovnosti rozptylů chybových proměnných n_i, tak je možné podle [10] taktéž jednoznačně určit kauzální strukturu problému.

2.5 Problém identifikovatelnosti

Ne vždy jsme schopni určit kauzální strukturu daného problému pomocí metod zmíněných v předchozí kapitole, v takových případech bychom ji chtěli umět alespoň nějak popsat. Model zaznamenávající daný problém, lze popsat pomocí pravděpodobnostního rozdělení. Předpokládejme, že máme v pozorovaném modelu tři náhodné veličiny X, Y, Z, které jsou popsány SEM (2.2). Na napozorovaných datech toto sdružené rozdělení označujeme

$$P_{X,Y,Z} = P(X = x, Y = y, Z = z),$$

kde X, Y, Z jsou pozorované veličiny a x, y, z jsou jejich hodnoty. V případě, kdy na pozorovaný model provedeme nějaký zásah zvenčí $do(X = x)$, tak tento po-zásahový model má rozdělení

$$P(Y = y, Z = z|do(X = x)).$$

Chtěli bychom umět něco říci o po-zásahovém rozdělení modelu, neboli umět po-zásahové rozdělení vyjádřit pomocí před-zásahového rozdělení napozorovaného modelu. Problém určení po-zásahového rozdělení pomocí známého před-zásahového rozdělení se nazývá *problém identifikovatelnosti*. V případě, kdy máme identifikovatelný model, jsme schopni po-zásahové rozdělení modelu vyjádřit pomocí před zásahového, což vede k tomu, že umíme vyjádřit kauzální efekt X na Y jako $P(Y|do(X = x))$, pomocí před-zásahového rozdělení $P_{X,Y,Z}$.

Definice 5 (Identifikovatelnost, [5])**.** *Nechť máme strukturální model M. Kauzální účinek veličiny Y na X v modelu M označíme jako $Q(M)$:*

$$Q(M) = P(Y = y|do(X = x)).$$

Veličina $Q(M)$ je identifikovatelná*, pokud pro jakékoliv dva modely M_1 a M_2 platí:*

$$P(M_1) = P(M_2) \Longrightarrow Q(M_1) = Q(M_2) \tag{2.9}$$

Poznámka.

1. Pro platnost modelu M existují předpoklady, které musí být splněny, abychom mohli identifikovatelnost definovat.
2. Pokud platí implikace (2.9), veličina Q závisí pouze na rozdělení P a lze ji vyjádřit pouze pomocí P. Což je přesně to, co bychom chtěli pro vyřešení problému identifikovatelnosti.

Příklad:

Použijeme SEM z obrázku 2.4, kde definujeme M_1 = model (2.2) a M_2 = model (2.3), a ukážeme stejně jako v [5], že i přesto, že neznáme přesnou definici funkcí f_X, f_Y, f_Z, jsme schopni říct, že $\mathsf{E}\left[Y|do(x_0)\right]$ je identifikovatelná:

Předpoklady:

- Y je funkce pouze proměnných X a U_Y,
- U_Y je nezávislé na U_X a U_Z, což implikuje $\mathrm{cov}(X, U_Y) = 0$.

V modelu M_1 máme:

$$\mathsf{E}\left[Y|X=x_0\right] = \mathsf{E}\left[f_Y(X, U_Y)|X=x_0\right] = \mathsf{E}\left[f_Y\left(x_0, U_Y\right)|X=x_0\right] = \\ = \mathsf{E}\left[f_Y\left(x_0, U_Y\right)\right].$$

V poslední úpravě jsme využili toho, že $f_Y(x_0, U_Y)$ a $X = x_0$ jsou nezávislé a $E[X|Y] = EX$, jsou-li X a Y nezávislé.

V modelu M_2 máme:

$$\mathsf{E}\left[Y|do(x_0)\right] = \mathsf{E}\left[f_Y(x_0, U_Y)\right].$$

Při použití operátoru $do(x)$ využíváme toho, že podmíněná střední hodnota operátorem $do(x)$ je střední hodnota v modelu, na který jsme intervenci použili.

Vidíme, že podmíněná střední hodnota v intervenčním modelu M_2 je stejná jako podmíněná střední hodnota v původním modelu M_1. Po-zásahová podmíněná střední hodnota $\mathsf{E}\left[Y|do(x_0)\right]$ se rovná před-zásahové podmíněné střední hodnotě $E\left[Y|X=x_0\right]$, čili podmíněná střední hodnota je identifikovatelná.

2.5.1 Model bez skrytých konfounderů

Chceme-li identifikovatelnost určit pomocí grafů, musíme předpokládat, že všechny kauzální účinky jsou identifikovatelné právě tehdy, když je model markovský. Model je markovský v případě, že je jeho graf acyklický (neobsahuje žádný orientovaný graf) a všechny chybové prvky $U_X,\ U_Y,\ U_Z$ jsou nezávislé.

Věta 1 (Kauzální Markovova podmínka, [5])**.** *Jakékoliv rozdělení generované markovským modelem M může být psáno jako*

$$P(V_1 = v_1, V_2 = v_2, ..., V_n = v_n) = \prod_{i=1}^{n} P(V_i = v_i|PA_i = pa_i),$$

kde V_1,...,V_n jsou vnitřní proměnné v M, $v_1, ..., v_n$ jsou jejich hodnoty a PA_i jsou vnitřní vrcholy, které jsou zároveň rodiči příslušného V_i v kauzálním grafu popisujícím model M, pa_i jsou jejich hodnoty.

Důkaz. Viz [11] strana 30.

□

Sdružená pravděpodobnost všech vnitřních proměnných v grafu lze psát jako součin podmíněných pravděpodobností vnitřních vrcholů podmíněných množinou jejich rodičů, kteří jsou zároveň vnitřní vrcholy.

Markovovu podmínku můžeme použít například na graf z obrázku 2.4. Vnější chybové veličiny $U_X,\ U_Y,\ U_Z$ jsou nezávislé, protože mezi nimi v grafu neexistuje žádná hrana, graf je acyklický, tudíž je i Markovský a můžeme větu 1 použít. Máme tři vnitřní proměnné, a to $V_1 = X,\ V_2 = Y,\ V_3 = Z$. Rodičem X je U_X, což je ale vnější proměnná, tudíž člen pro $i = 1$ bude pouze $P(X = x)$, kde x je hodnota veličiny X. Rodiče Y jsou vrcholy X a U_Y, vrchol U_Y je ale vnější vrchol, proto nepatří do množiny vrcholů, kterou podmiňujeme, tedy člen pro $i = 2$ je

$P(Y = y|X = x)$, kde x je hodnota veličiny X a y je hodnota veličiny Y. Vrchol Z má rodiče Y a U_Z, ale U_Z je vnější vrchol, tudíž člen pro $i = 3$ je $P(Z = z|Y = y)$, kde y je hodnota veličiny Y a z je hodnota veličiny Z. Sdruženou pravděpodobnost veličin X, Y, Z můžeme díky kauzální Markovově podmínce psát jako:

$$P(X = x, Y = y, Z = z) = P(X = x) \cdot P(Y = y|X = x) \cdot P(Z = z|Y = y).$$

Ukázali jsme si, jak můžeme z markovského grafu určit rozdělení jeho vnitřních veličin. Dále si ukážeme, jak lze vyjádřit rozdělení vnitřních veličin v modelu po intervenci $do(X = x_0)$.

Věta 2 (Zkrácená faktorizace, [5])**.** *Pro každý markovský model M je rozdělení po intervenci $do(X^{'} = x_0)$ na množině vnitřních proměnných $X^{'}$ dáno zkrácenou faktorizací:*

$$\begin{aligned} P(V_1 = v_1, V_2 = v_2, ..., V_k = v_k|do(X^{'} = x_0)) = \\ = \prod_{i|V_i \notin X^{'}} P(V_i = v_i|PA_i = pa_i)|_{x=x_0}, \quad (2.10) \end{aligned}$$

kde V_i jsou vnitřní proměnné v M, na které nebyl prováděn zásah, a v_1, ..., v_n jejich hodnoty. pa_i jsou hodnoty vnitřních rodičů PA_i příslušného V_i v kauzálním grafu popisujícím model M a $P(V_i = v_i|PA_i = pa_i)$ je před-zásahová podmíněná pravděpodobnost.

Důkaz. Viz [5] strana 109.

□

Tato věta zobecňuje vyjádření rozdělení z věty 1 pro po-zásahové intervenční rozdělení. Jak je vidět z (2.10), součin na pravé straně rovnice vynechává vrcholy, kterým byla intervencí přiřazena hodnota x_0. Zkrácená faktorizace nám usnadňuje vyjádření po-zásahového rozdělení přímo z grafu.

Pokud bychom použili stejný příklad jako pro ilustraci věty 1, vycházeli bychom z modelu 2.3. V tomto případě budeme provádět intervenci na prostřední vrchol v řetízku, tedy na veličinu Y. Množina vrcholů $X^{'}$ obsahuje pouze vrchol Y. Opět máme tři vnitřní proměnné $V_1 = X$, $V_2 = Y$, $V_3 = Z$ z předchozího příkladu již známe rodiče příslušných veličin, stačí nám tedy zkontrolovat, zdali pro příslušné i platí $V_i \in X^{'}$, abychom podle toho zařadili příslušný činitel do součinu, nebo ne. V množině $X^{'}$ je pouze veličina Y, proto nám stačí vyřadit činitel pro $i = 2$ a místo hodnot y dosazovat zásahem přiřazenou hodnotu y_0. Celkově tedy máme:

$$P(X = x, Z = z|do(Y = y_0)) = P(X = x) \cdot P(Z = z|Y = y_0).$$

Známe sdružené rozdělení veličin X a Z za intervence $do(y_0)$, takže jsme schopni vyjádřit rozdělení obou veličin zvlášť, protože víme, že obě veličiny jsou diskrétní, stačí tedy marginalizovat (nasčítat) přes všechny hodnoty jedné veličiny, abychom dostali vyjádřenou veličinu druhou za platnosti intervence $do(y_0)$.

$$
\begin{aligned}
P(X=x|do(Y=y_0)) &= \sum_z P(X=x,Z=z|do(Y=y_0)) = \\
&= \sum_z P(X=x)\cdot P(Z=z|Y=y_0) = P(X=x)\cdot \sum_z P(Z=z|Y=y_0) = \\
&= P(X=x)
\end{aligned}
$$

Součet pravděpodobností $P(Z=z|Y=y_0)$ musí dát z vlastností pravděpodobnosti výsledek 1. Jak je vidět z odvození výše, rozdělení veličiny X za intervence $do(y_0)$ je stejné jako rozdělení X bez intervence. To je patrné i z obrázku 2.3, kde je vidět, že veličina Y nijak nepůsobí na veličinu X, proto rozdělení X se nemění s provedením intervence na Y. Naopak na veličinu Z má veličina Y přímý kauzální účinek, tudíž rozdělení veličiny Z po intervenci $do(y_0)$ by mělo záviset na y_0:

$$
\begin{aligned}
P(Z=z|do(Y=y_0)) &= \sum_x P(X=x,Z=z|do(Y=y_0)) = \\
&= \sum_x P(X=x)\cdot P(Z=z|Y=y_0) = P(Z=z|Y=y_0)\cdot \sum_x P(X=x) = \\
&= P(Z=z|Y=y_0)
\end{aligned}
$$

Opět platí, že součet pravděpodobností $P(X=x)$ přes všechny hodnoty x je 1.

Ukázali jsme si, jak můžeme získat sdruženou pravděpodobnost vnitřních veličin po zásahu zvenčí pomocí markovského grafu, kde nemáme žádné skryté konfoundery. Tento postup bychom chtěli rozšířit i na model, který může obsahovat skryté konfoundery, a o tom si něco více řekneme v další kapitole.

2.5.2 Model obsahující skryté konfoundery

V přítomnosti skrytých konfounderů v modelu se vyjádření kauzálního vlivu jedné proměnné na jinou proměnnou stává poněkud složitější. V takovémto případě nemůžeme použít marginalizaci přes vnější proměnné, kterou jsme využili v příkladu v minulé kapitole. Potřebujeme tedy zjistit, jak vypadá množina proměnných, přes kterou můžeme marginalizovat, aniž bychom změnili účinek intervence.

Pro případ markovského grafu (acyklický graf, jehož chybové veličiny jsou nezávislé), kdy zkoumáme kauzální účinek veličiny X na veličinu Y, víme z [11], že jsme schopni vyjádřit po-zásahové rozdělení proměnné Y jako

$$
P(Y=y|do(X=x)) = \sum_{PA} P(Y=y|PA_i=pa_i,\ X=x)\cdot P(PA_i=pa_i), \qquad (2.11)
$$

kde PA je množina rodičů PA_i veličiny X (té veličiny, na kterou jsme provedli intervenci) v grafu, pa_i jsou hodnoty veličiny PA_i.

Na rozdíl od případu, kdy jsme v modelu neměli žádné skryté konfoundery a při vyjadřování po-zásohového rozdělení jsme marginalizovali přes všechny vnější proměnné, v případě modelu se skrytými konfoundery pro markovský graf stačí marginalizovat pouze přes rodiče té proměnné, na kterou provádíme zásah.

Pro grafy, které nejsou markovské, potřebujeme najít množinu splňující zachování účinku intervence. Takováto množina se nazývá *postačující množina*, její přesnou definici shrnuje následující definice.

Definice 6 (Hledání postačující množiny, neboli kritérium zadních vrátek)**.** *Množina S je* postačující*, pokud platí následující dvě podmínky:*

1. *Žádný prvek množiny S není následovníkem X,*
2. *množina S blokuje všechny cesty z X do Y, které končí hranou orientovanou k X (tj. cesty, které jsou zadními vrátky k X).*

Zadní vrátka k X označují nepodložené asociace mezi X a Y, zatímco cesty orientované od X k Y nesou kauzální vztahy mezi těmito dvěma veličinami. Zablokování prvně zmíněných cest podmíněním množinou S nám zajistí, že z asociace mezi X a Y prokážeme kauzalitu, neboli X bude mít kauzální vliv na Y.

Nalezení přípustné množiny nám zajistí odstranění všech nežádoucích systematických chyb, které by mohly ovlivňovat kauzální účinek X na Y. Proto v případě, že množina S je přípustná, platí:

$$P(Y = y|do(X = x), S = s) = P(Y = y|X = x, S = s), \tag{2.12}$$

kde x je hodnota přiřazená intervencí veličině X, y je hodnota veličiny Y a s je prvek množiny S. Rovnice (2.12) vyjadřuje, že pro jednotlivé prvky postačující množiny získáme kauzální účinek X na Y pomocí asociativních vztahů. Chceme-li vyjádřit celkový kauzální účinek X na Y stačí použít větu o celkové pravděpodobnosti, využít (2.12) a sčítat přes všechny prvky s množiny S:

$$\begin{aligned} P(Y = y|do(X = x)) &= \sum_{s \in S} P(Y = y|do(X = x), S = s) \cdot P(S = s) = \\ &= \sum_{s \in S} P(Y = y|X = x, S = s) \cdot P(S = s). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Prvky na pravé straně rovnice známe z naměřených dat, nebo jsme je schopni získat pomocí statistických nástrojů (např. lineární regrese). Získali jsme tedy vzorec pro určení kauzálního účinku X na Y i v případě, kdy máme v modelu skryté konfoundery.

V případě, kdy nejsme schopni nalézt z naměřených dat žádnou přípustnou množinu, lze také vyjádřit kauzální účinek X na Y, ale už jiným postupem, než byl uveden výše, a ten je popsán v [5].

Závěr

Práce se zabývala asociačním a kauzálním působením jevů mezi sebou. Nejprve bylo ukázáno, že pozorování dvou veličin zároveň ještě neznamená, že by jedna veličina byla příčinou veličiny druhé. Pro určení kauzálních vztahů bylo potřebné popsat i chybějící pozorování, které z napozorovaných dat nejsou známá. Určení kauzálního vztahu z napozorovaných dat s vypořádáním se s kontrafaktuály pomocí intervence bylo ilustrováno na praktickém příkladu z odvětví medicíny, který lze využít například při testování účinnosti nového léku ve farmaceutickém průmyslu. Dále bylo uvedeno několik typů randomizace, které lze využít při experimentech.

V druhé polovině práce byla zavedena reprezentace kauzálních vztahů mezi jevy pomocí teorie grafů a bylo ukázáno několik metod pro sestavení grafu kauzální struktury daného problému. V grafech není zahrnut kvantitativní popis kauzálních vztahů mezi jevy, proto byly popsány strukturální rovnicové modely. Jako jejich základní příklad byla rozebrána lineární regrese, což je strukturální rovnicový model pro případ pouze jedné rovnice, která je navíc lineární. Nakonec byl diskutován problémem identifikovatelnosti, neboli možnosti popsat po-zásahové vlastnosti modelu pomocí před-zásahových.

Seznam použité literatury

[1] Dawid, A. P. *et al.* Fitting science into legal contexts: Assesing effects of causes or causes of effects? *Sociological Methods & Research* **43**, 2014, 359–390.

[2] Holland, P. W. Statistics and causal inference. *Journal of the American Statistical Association* **81**, 1986, 945–960.

[3] Kalish, M. and Bühlmann, P. Causal structure learning and inference: A selective review. *Quality Technology & Quantitative Management* **11**, 2014, 3–21.

[4] Efird, J. Blocked randomization with randomly selected block sizes. *International Journal of Environmental Research and Public Health* **8**, 2011, 15–20.

[5] Pearl, J. Causal inference in statistics: An overview. Statistics Surveys **3**, 2009, 96–146.

[6] Anděl, J. *Základy matematické statistiky.* Druhé opravené vydání. Matfyzpress, Praha, 2007.

[7] Borsboom, D. Causal networks, blocking, and d-separation. 2012. Dostupné z: http://www.sachaepskamp.com/files/NA/d-separation2013.pdf.

[8] Chickering, D. M. Optimal structure identification with greedy search. *Journal of Machine Learning Research* **3**, 2002, 507–554.

[9] Peters, J. *et al.* Causal discovery with continuos additive noise models. *Journal of Machine Learning Research* **15**, 2014, 2009–2053.

[10] Peters, J. and Bühlmann, P. Identifiability of Gaussian structural equation models with equal variances. *Biometrika* **101**, 2014, 219–228.

[11] Pearl, J. *Causality: models, reasoning, and inference.* První vydání. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

Seznam obrázků

Seznam tabulek

Seznam použitých zkratek

OR - poměr šancí z anglického odds ratio
PC - pravděpodobnost příčiny z anglického probability of causation
DAG - orientovaný acyklický graf z anglického directed acyclic graph
CPDAG - úplný částečně orientovaný acyklický graf z anglického completed partially directed acyclic graph
SEM - strukturální rovnicový model z anglického Structural Equation Model
GES - Greedy Equivalent Search je příklad skórové metody
ANM - model sčítavého šumu z anglického Additive Noise Model