

## ВИЯВЛЕННЯ КАУЗАЛЬНИХ ВІДНОШЕНЬ З МАРКОВСЬКИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ В УМОВАХ ЛАТЕНТНИХ КОНФАУНДЕРІВ

**Анотація.** Розглянуто проблеми виведення структур каузальних моделей на основі фактів умовної незалежності в ситуації, коли каузальні зв'язки можуть бути під дією латентних конфаундерів. Продемонстровано умови і можливості часткового та повного виявлення каузальних відношень, а також ідентифікації латентних конфаундерів. Сформульовано оновлені імплікативні правила виведення орієнтацій ребер (зв'язків) моделі. Деякі нові правила здатні виявляти конфаундований каузальний зв'язок та арку, спираючись на заборону певних автентичних ребер. (Заборона ребра може бути апіорною або аргументована свідченням типу стримування Верма.)

**Ключові слова:** каузальний зв'язок, d-сепарація, умовна незалежність, латентний конфаундер, орієнтація ребер, арка.

### ВСТУП

Впродовж останніх 30-ти років інтенсивно досліджувалися і розроблялися методи виведення каузальних моделей з даних пасивних спостережень, а також методи виявлення причинних відношень [1–9]. Реалістичні умови задачі вимагають враховувати існування прихованих змінних і латентних конфаундерів. Уявімо причину  $X$  та її наслідок  $Y$ . Латентний конфаундер (сплутувач) цього каузального зв'язку — це прихований фактор, який впливає на  $Y$  щонайменше двома шляхами, один з яких проходить через  $X$ , а інший — не проходить.

У запропонованій статті уточнюються поняття конфаундера та латентного конфаундера. Розглядається задача виведення структури каузальної моделі на основі фактів умовної незалежності (тобто емпіричних свідчень), коли темпоральна інформація відсутня. (Відомий темпоральний порядок змінних спрощує та прискорює виведення моделі, але не розв'язує проблеми розпізнавання каузальних відносин до кінця.) Каузальні зв'язки моделі є фінальним результатом покрокового уточнення спрямованості зв'язків із застосуванням правил орієнтації ребер. Каузальний зв'язок можна повністю ідентифікувати з даних тільки у сприятливому контексті. (Еквівалентні за марковськими властивостями моделі можуть відрізнятися спрямуваннями ребер.) У статті запропоновано модернізацію відомих правил орієнтації ребер для моделей з латентними конфаундерами і розроблено нові правила орієнтації. Показано, як апіорна заборона автентичних ребер та латентних конфаундерів (певного типу) надає додаткові можливості розпізнавання каузальних відношень.

### ОЗНАЧЕННЯ ТА ОСНОВИ

Каузальна мережа [1–10] утворюється з ребер вигляду  $X \rightarrow Y$ ; таке ребро відображає спрямований вплив  $X$  на  $Y$  (у цій парі  $X$  — причина,  $Y$  — ефект, наслідок). Каузальна модель задається парою  $(G, \Theta)$ , де  $G$  — оргграф (структура моделі), а  $\Theta$  — сукупність параметрів, визначених локально. Якщо в оргграфі  $G$  немає орієнтованих циклів (тобто циклонів), то  $G$  назвемо ациклонним оргграфом, а модель  $(G, \Theta)$  — АОГ-моделлю. Якщо нема потреби відображати існування прихованих спільних причин, то  $G$  — це ординарний оргграф (оАОГ), утворений з одноорієнтованих ребер вигляду  $X \rightarrow Y$ . Тоді

відповідна система структуральних рівнянь буде рекурсивною. Зокрема, каузальну модель задають як систему структуральних рівнянь вигляду  $y = f(x, z, v) + \varepsilon_y$ . Параметри оАОГ-моделі для кожної змінної  $Y$  описуються умовним розподілом імовірностей  $p(Y|\Phi(Y))$ , де  $\Phi(Y)$  — сукупність усіх «батьків» (безпосередніх причин) змінної  $Y$ . Каузальна мережа структурно описує сумісний розподіл змінних. Для того щоб відобразити ефекти прихованих спільних причин, у модель вводять біорієнтовані (двобічно-орієнтовані або асоціативні) ребра. Біорієнтоване ребро  $Q \leftrightarrow W$  відображає вплив прихованої причини  $H$  «паралельно» на  $Q$  та  $W$ . АОГ-модель зветься мішаною, якщо вона використовує одноорієнтовані та біорієнтовані ребра. Параметризація мішаної моделі значно складніша, ніж оАОГ-моделі [8].

Шлях — це послідовність сусідніх ребер без повторення некінцевих вершин. Оршлях — це шлях вигляду  $X \rightarrow \dots \rightarrow Y$ . Цикл — шлях, де перша та остання вершини тотожні. Циклон — це циклічний оршлях. «Майже-циклон» — конструкція, яка утворюється з циклону  $X \rightarrow \dots \rightarrow Y \rightarrow Z \rightarrow X$  після заміни будь-якого його ребра біорієнтованим, наприклад  $X \rightarrow \dots \rightarrow Y \rightarrow Z \leftrightarrow X$ . Кінець ребра  $X \rightarrow Y$ , дотичний до  $Y$ , називається «вістря», а кінець, дотичний до  $X$ , — «хвіст». Ребро з невизначеними кінцями позначається  $\circ - \circ$ . В описі конструкцій та фрагментів моделі використовується позначка  $*$  (астерікс) на кінці ребра, наприклад  $* \rightarrow$  або  $* - \circ$ . Цей еквіпотентний символ показує, що в цьому контексті тип кінця ребра може бути будь-яким (зокрема, невизначеним). Колізор — це фрагмент вигляду  $X * \rightarrow Y \leftarrow * Z$ , причому цей колізор називатимемо шунтованим, якщо у графі є ребро  $X * - * Z$ , інакше — нешунтованим. Шлях зветься безколізорним, якщо на ньому немає жодного колізора. Предикат  $\text{Ind}(X; S; Y)$  означає, що змінні  $X$  та  $Y$  є (взаємно) умовно-незалежними за умови на набір змінних  $S$ . Марковські властивості моделі зчитуються з графу  $G$  моделі за допомогою критерію d-сепарації [1–3].

**Означення 1** (d-сепарація). Шлях  $\pi$  в оргграфі  $G$  називають d-перекритим (d-блокованим) за допомогою (кондиціонування) множини вершин  $S$ , якщо і тільки якщо:

- на шляху  $\pi$  є принаймні один фрагмент вигляду  $Z \rightarrow z$  тим, що  $Z \in S$ ;
- на шляху  $\pi$  є принаймні один колізор  $* \rightarrow W \leftarrow *$ , причому  $W \notin S$  і немає жодної такої  $T \in S$ , що існує оршлях  $W \rightarrow \dots \rightarrow T$ .

Якщо всі шляхи між вершинами  $X$  та  $Y$  d-перекриті (або немає жодного шляху між  $X$  та  $Y$ ), то вершини  $X$  та  $Y$  є d-сепарованими. Шлях, який не є d-перекритим, є d-відкритим.

Якщо за кондиціонування множини  $S$  у графі  $G$  існує принаймні один d-відкритий шлях між  $X$  та  $Y$ , то вершини  $X$  та  $Y$  є d-з'єднаними для заданої  $S$ .

Факт, що множина вершин  $S$  d-сепарує вершини  $X$  та  $Y$ , позначатимемо предикатом  $\text{DS}(X; S; Y)$ . Тоді  $S$  є d-сепаратором (d-сепараторним набором) для пари  $X, Y$ . (Застережене  $X, Y \notin S$ .) Коли d-сепаратор порожній, будемо писати  $\text{DS}(X; ; Y)$ .

Зазначимо, що включення певної вершини в набір кондиціонування може не тільки d-перекрити деякий шлях між  $X$  та  $Y$ , але й d-відкрити інший шлях між  $X$  та  $Y$  (феномен провокації залежності). Тому неформально можна охарактеризувати d-сепараторний набір  $S$  для пари  $X, Y$  як такий, що блокує всі шляхи залежності між  $X$  та  $Y$ , в тому числі й ті, що відкриваються деякими елементами множини  $S$ .

Роль критерію d-сепарації розкривається через наступну властивість [3]. У кожній каузальній мережі для всіх  $X, Y, S$  виконуються імплікації вигляду

$$\text{DS}(X; S; Y) \Rightarrow \text{Ind}(X; S; Y). \quad (1)$$

Усі факти умовної незалежності, які визначаються (1), є легітимними (структурно детермінованими). Але марковськими властивостями моделі (у вузькому сенсі) доцільно називати тільки підмножину легітимних фактів умовної незалежності, а саме ті факти, для яких відповідний d-сепараторний набір  $S$  є локально-мінімальним або ненадлишковим [11, 12]. (Якщо набір  $S$  включає зайві елементи, то семантика марковської властивості розмивається.)

Зазвичай (за виключенням особливих випадків) виконується імплікація, обернена до (1). Ця закономірність декларується як припущення (умова) «каузальної не-оманливості» [2, 13]. Припущення каузальної не-оманливості (в його найжорсткішій формі) можна записати так:

$$\forall X, Y \notin S: \neg DS(X; S; Y) \Rightarrow \neg Ind(X; S; Y). \quad (2)$$

На відміну від [14, 15], далі приймаємо припущення каузальної не-оманливості в формі (2). Отже, в подальших викладках факти графової сепарації та факти умовної незалежності використовуються взаємозаміно. Тому будемо вживати термін «сепарація» без уточнення. Сепаратор та d-сепаратор  $S_0$  для пари вершин  $X, Y$  в оргграфі є мінімальним, якщо для всіх інших сепараторів  $S$  для пари  $X, Y$  виконується  $|S| \geq |S_0|$ . Він позначається  $dSep_{\min}(X, Y)$  та  $Sep_{\min}(X, Y)$ . Будемо вважати, що алгоритм виведення моделі завжди знаходить мінімальний сепаратор (звичайно, якщо сепаратор існує) [11, 14].

Є потреба уточнити поняття конфаундера (оскільки у відомих джерелах немає єдиного розуміння).

**Означення 2** (конфаундер і квазіконфаундер). Змінна (вершина)  $U$  зветься конфаундером для каузального зв'язку між  $A$  (причина) та  $B$  (ефект), якщо і тільки якщо:

- 1) існує непорожня множина оршляхів  $\lambda_{UA,1}, \lambda_{UA,2}, \dots$  від  $U$  до  $A$  (зокрема, можливе ребро  $U \rightarrow A$ );
- 2) існує непорожня множина оршляхів  $\lambda_{UB,1}, \lambda_{UB,2}, \dots$  від  $U$  до  $B$ , які не перетинаються з жодним  $\lambda_{UA,1}, \lambda_{UA,2}, \dots$ ;
- 3) існує непорожня множина оршляхів  $\lambda_{AB,1}, \lambda_{AB,2}, \dots$  (зокрема, ребро) від  $A$  до  $B$ .

Якщо чинні пп. 1 і 2, але не чинний п. 3, то така  $U$  зветься квазіконфаундером (для некаузального зв'язку між  $A$  та  $B$ ).

**Коментар і додаток до означення 2.** У публікаціях термін конфаундер часто розуміється ширше. Зокрема, квазіконфаундер також називають конфаундером. Крім того, замість умов пп. 1 та 2 іноді ставлять умову, що конфаундер  $Q$  лежить на якомусь безколізному шляху вигляду  $A \leftarrow \dots Q \dots \rightarrow B$  (back door path [1]). Інакше кажучи, конфаундером вважають вершину  $Q$ , яка лежить на якомусь із вказаних оршляхів  $\lambda_{UA,1}, \lambda_{UA,2}, \dots, \lambda_{UB,1}, \lambda_{UB,2}, \dots$ . Така вершина  $Q$  може бути використана для блокування того внеску у залежність між  $A$  та  $B$ , який робить справжній конфаундер  $U$  (для «очищення» каузального ефекту  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$  від внеску конфаундера  $U$ ). Проте такі змінні  $Q$  (на відміну від  $U$ ) не впливають «паралельно» на  $A$  та  $B$ . Натомість у більшості публікацій існує консенсус, що конфаундер є спільною причиною для  $A$  та  $B$ . Тому такі змінні  $Q$  (за виключенням самої  $U$ ) пропонуємо називати медіаторами конфаундера. Це не просто уможлядні поняття. По-перше, можлива ситуація, коли кондиціонування медіатора конфаундера  $Q$  призводить до провокації додаткового механізму викривлення каузального ефекту. Тобто внаслідок кондиціонування  $Q$  певна змінна  $V$  починає виконувати роль конфаундера для  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$ , хоча ця  $V$  не була конфаундером (і навіть медіатором конфаундера) для  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$ . (Кон-

диціонування конфаундера  $U$  ніколи не породжує таких проблем.) По-друге, доцільно врахувати іншу ситуацію, коли маємо проаналізувати дані, отримані в режимі різних варіативних втручань (активних експериментів). За зовнішнього керування конфаундером він залишиться в ролі конфаундера для зв'язку  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$  (окрім випадку, коли конфаундер стає константою). Натомість, у результаті зовнішнього керування медіатором конфаундера не створюється ефекту конфаундера. Більш того, в результаті відключається або викривляється дія відповідного конфаундера.

Водночас виникає ідея розширити поняття конфаундера, а саме послабити п. 2 і сформулювати вимогу інакше:

2\*) існує непорожня множина оршляхів  $\lambda_{UB,1}, \lambda_{UB,2}, \dots$  від  $U$  до  $B$ , які не проходять через  $A$ .

Тобто, згідно з п. 2\* кожний шлях  $\lambda_{UA,i}$  (від  $U$  до  $A$ ) може перетинатися з якимось шляхом  $\lambda_{UB,j}$  (від  $U$  до  $B$ ). Нехай маємо саме такий конфаундер  $H$ , що шлях  $\lambda_{HA,i}$  перетинається зі шляхом  $\lambda_{HB,j}$ . Конфаундер  $H$  з такою особливістю втрачає важливу роль. Оскільки немає жодного безколізрного шляху  $A \leftarrow \dots H \dots \rightarrow B$ , то такий  $H$  не належить оптимальному набору коваріат для оцінювання відповідного каузального ефекту. Коли потрібно «очистити» каузальний ефект  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$ , цей  $H$  буде або зайвим, або сурогатним коваріатом. Тому такий  $H$  доцільно відрізнити, назвавши його «нетермінальний» конфаундер для пари  $A, B$ . (Відповідно, конфаундер, який задовольняє означення включно із п. 2, за умовчанням буде «термінальним».)

**Означення 3.** Якщо конфаундер  $U$  каузального зв'язку  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$  є прихованим, то він зветься прихованим конфаундером. Прихований конфаундер  $U$  для  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$  зветься латентним конфаундером, якщо і тільки якщо існує щонайменше один оршлях  $\lambda_{UB,i}^{(h)}$  від  $U$  до  $B$ , який не проходить через  $A$  і на якому всі вершини (за винятком  $B$ ) є прихованими. Латентний конфаундер  $U$  зветься «жорстким», якщо додатково існує щонайменше один оршлях  $\lambda_{UA,j}^{(h)}$  від  $U$  до  $A$ , на якому всі вершини (за винятком  $A$ ) приховані.

Якщо жодний з вказаних (прихованих) оршляхів  $\lambda_{UB,i}^{(h)}$  не перетинається з жодним оршляхом  $\lambda_{AB,1}, \lambda_{AB,2}, \dots$  від  $A$  до  $B$  (окрім кінцевої вершини  $B$ ), то цей  $U$  зветься «акуратним» латентним конфаундером для зв'язку  $A$  з  $B$  (інакше — «неакуратним»).

Очевидно, якщо  $U$  є латентним, але не жорстким конфаундером для  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$ , то цей  $U$  буде жорстким конфаундером для каузального зв'язку  $C \rightarrow \dots \rightarrow B$  (де  $C$  — найближча до  $U$  вершина на шляху  $\lambda_{UA,j}^{(h)}$ ).

Випадки, що ілюструють визначення латентного конфаундера, зображено на рис. 1 (тут пунктиром позначено приховані змінні). Майже-циклон адекватно відображає саме жорсткий латентний конфаундер.

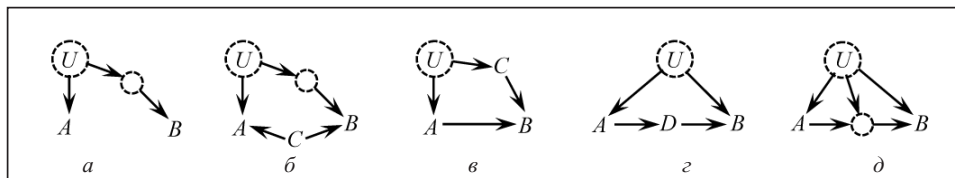


Рис. 1. Випадки латентних конфаундерів  $U$ : квазіконфаундери (а, б); нежорсткий конфаундер (в); жорсткий акуратний конфаундер для пари  $(A, B)$  і водночас нежорсткий для пари  $(D, B)$  (г); жорсткий неакуратний конфаундер (д)

Часто за умовчанням приймається припущення, що модель утворюється з простих ребер (тобто кожна прихована змінна має не більше двох «контактів» із моделлю). Тоді кожна прихована змінна  $U$  може бути жорстким латентним конфаундером тільки для одного каузального зв'язку і запропоновані означення можна спростити.

Якщо для пари  $A, B$  існує жорсткий латентний конфаундер і принаймні на одному з оршляхів  $A \rightarrow \dots \rightarrow B$  усі вершини (за виключенням кінцевих) приховані, то таку ситуацію треба відобразити за допомогою пари ребер:  $A \rightarrow B$  та  $A \leftrightarrow B$ . Така пара ребер зветься «арка». (Арка — це майже-циклон з двох ребер.) Для відображення арки пропонуємо також використовувати позначення  $A \curvearrowright B$ . Воно компактне і наочне, але не ідеальне, оскільки верхнє ребро неорієнтоване.

Ребро  $X * - * Y$  називаємо автентичним, якщо в генеративній моделі існує безколізорний шлях між  $X$  та  $Y$ , на якому всі некінцеві (проміжні) вершини приховані. (Зрозуміло, може існувати фізично безпосередній зв'язок між  $X$  та  $Y$ .) Зокрема, автентичний безпосередній каузальний зв'язок відповідає оршляху, на якому всі проміжні вершини приховані. Будемо намагатися виводити модель, яка складається тільки з автентичних ребер.

Для ефективної роботи з моделями в умовах латентних квазіконфаундерів було запропоновано спеціальний підклас мішаних моделей, структура яких описується анцестральними графами [10]. Анцестральні (або предкові) графи визначаються таким обмеженням: якщо вершини  $A$  та  $B$  поєднані оршляхом (зокрема, ребром), то забороняється ребро  $A \leftrightarrow B$ . Тобто побіч заборони циклонів також забороняються майже-циклони. Легко бачити, що заборона майже-циклонів еквівалентна забороні латентних конфаундерів (але латентні квазіконфаундери дозволені). (Для повноти зазначимо, що в анцестральних графах також застосовуються неспрямовані ребра, які відображають симетричні, обопільні залежності.)

В анцестральних графах можливі випадки, коли вершини  $X$  та  $Y$  не поєднані автентичним ребром, проте, для пари  $X, Y$  не існує жодного d-сепаратора. У виведеній моделі між відповідними вершинами виникає, образно кажучи, «ілюзорне» ребро [8, 14, 15]. Дозвіл латентних конфаундерів створює ще більше можливостей для виникнення ілюзорних ребер. Дійсно, якщо існують ребро  $X \leftrightarrow Y$  та оршлях  $Z * \rightarrow X \rightarrow Q \rightarrow \dots \rightarrow Y$ , то виникає ілюзорне ребро  $Z * - * Y$ . У запропонованій статті несепарабельність вершин не ототожнюється з наявністю ребра. Тобто ілюзорні ребра не прирівнюються до автентичних, попри те, що їх важко розрізнити. Приймаємо, що в моделях дозволені майже-циклони, але будемо утримуватися від використання арок, допоки вони не стануть безальтернативними. Ідентифікувати ілюзорні ребра та майже-циклони важко, а ідентифікувати арки ще важче.

#### ВИЗНАЧЕННЯ СПРЯМУВАНЬ РЕБЕР (ПРАВИЛА ОРІЄНТАЦІЇ РЕБЕР)

Методи виведення моделей, оснований на незалежності [2–6], спочатку ідентифікують сукупність неорієнтованих ребер моделі. Ребро ставлять між змінними, які не сепаруються. Потім алгоритм намагається визначити спрямування (орієнтації) ребер.

Нехай за умовами задачі на вході не задано апріорних знань та обмежень (окрім зазначених раніше). У процесі виведення мішаних АОГ-моделей орієнтація деяких ребер може бути невизначеною (частково або повністю). Це відображається позначками невизначених кінців ребер. Отже, доводиться оперувати ребрами вигляду  $X \circ - \circ Y$ ,  $X \circ \rightarrow Y$ ,  $X \circ * Y$ . Конструкція з підкреслен-

ням, наприклад  $Z \circ \circ W \rightarrow Y$ , використовується для фіксації інформації, що цей стик ребер не утворює колізора.

Для класу оАОГ-моделей необхідним і достатнім є набір із чотирьох правил орієнтації ребер [7]. (Коли ззовні (як апіорні знання) надходять додаткові орієнтації ребер, треба додати ще одне правило.) Для анцестральних моделей традиційні правила були модифіковані і додатково розроблені нові («витончені») правила [5]. Далі аналізуються правила  $\mathfrak{R}0$ ,  $\mathfrak{R}1$ ,  $\mathfrak{R}2$ ,  $\mathfrak{R}3$ ,  $\mathfrak{R}4$ . Правила  $\mathfrak{R}5$ – $\mathfrak{R}12$  не будемо розглядати, оскільки вони оперують з неспрямованими ребрами. Такі ребра виникають внаслідок селекції даних (коли дані втрачають каузальну інформацію). Коректність правил орієнтації ребер спирається на умову, що встановлено адекватні ребра (хоча й неорієнтовані) і що виконується підхоже припущення не-оманливості [14]. Оскільки прийнято припущення (2), процес виведення моделі можна описувати в графових термінах. Як показано в [14], використання мінімальних сепараторів дає змогу отримати компактні та прагматичні формулювання правил.

Перехід до класу моделей, де дозволені майже-циклони, потребує ревізії правил, розроблених для анцестральних моделей. Втім, перші два правила ( $\mathfrak{R}0$  та  $\mathfrak{R}1$ ) безпосередньо забезпечують відповідність структури фактам залежності/незалежності і тому не потребують змін для розширеного класу моделей.

Зручним формулюванням правила  $\mathfrak{R}0$  є

$$X * \circ Y * \circ Z \ \& \ Y \notin \text{Sep}_{\min}(X, Z) \Rightarrow X * \rightarrow Y \leftarrow * Z. \quad (3)$$

(Тут і далі, коли записано терм  $Y \notin \text{Sep}_{\min}(X, Z)$ , за умовчанням вважається, що  $\text{Sep}_{\min}(X, Z)$  існує.) Правило  $\mathfrak{R}0$  розпізнає нешунтований колізор.

Додатково в [2] запропоновано парне до  $\mathfrak{R}0$  правило (позначимо його  $\mathfrak{R}0^{(c)}$ ):

$$X * \circ Y * \circ Z \ \& \ Y \in \text{Sep}_{\min}(X, Z) \Rightarrow X * \circ \underline{Y} * \circ Z. \quad (4)$$

Дотримуючись аналогічної форми, правило  $\mathfrak{R}1$  можна записати як

$$X * \rightarrow Y \circ \circ Z \ \& \ Y \in \text{Sep}_{\min}(X, Z) \Rightarrow X * \rightarrow Y \rightarrow Z. \quad (5)$$

Хоча правило  $\mathfrak{R}1$  не спирається на обмеження структури моделі, доцільно (якщо використовується  $\mathfrak{R}0^{(c)}$ ) запровадити універсальніше і ефективніше правило. Таке узагальнене правило було запропоновано в [2, 4]. Це правило (позначимо його  $\mathfrak{R}1^{(+)}$ ) має вигляд

$$X * \rightarrow \underline{Y} \circ \circ Z \Rightarrow X * \rightarrow Y \rightarrow Z. \quad (6)$$

Розглянуті в [5] правила  $\mathfrak{R}2$ ,  $\mathfrak{R}3$  та  $\mathfrak{R}4$  були призначені для виведення моделей у класі анцестральних структур. Наведемо прагматичне формулювання правила  $\mathfrak{R}3$ :

$$X * \rightarrow W \leftarrow * Z \ \& \ X * \circ Y \circ \circ Z \ \& \ Y * \circ W \ \& \ Y \in \text{Sep}_{\min}(X, Z) \Rightarrow Y * \rightarrow W. \quad (7)$$

Обґрунтовуючи це правило, зазвичай посилаються на заборону циклонів та майже-циклонів. Натомість це правило прямо впливає з марковських властивостей безвідносно до структурних обмежень [4]. Дійсно, альтернативна орієнтація  $Y \leftarrow W$  у заданих умовах суперечить факту сепарації  $X$  та  $Z$  (див. критерій d-сепарації). Перехід до моделей з майже-циклонами не потребує корекції цього правила (наведена в [14] модифікація є помилковою).

Правило  $\mathfrak{R}2$  має два варіанти умови [5]:

$$X \rightarrow Y * \rightarrow W \ \& \ X * \circ W \Rightarrow X * \rightarrow W; \quad (8)$$

$$X * \rightarrow Y \rightarrow W \ \& \ X * \circ W \Rightarrow X * \rightarrow W. \quad (9)$$

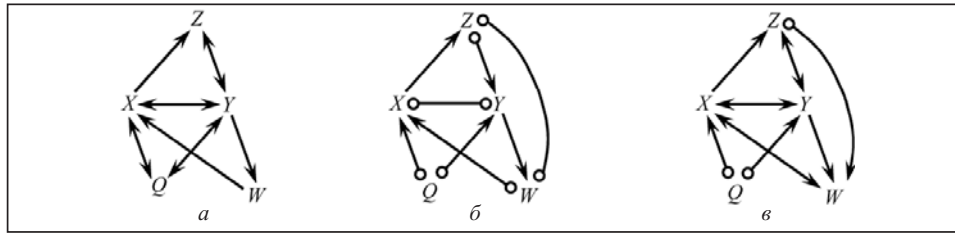


Рис. 2. Ілюстрації некоректності правила орієнтації ребер  $\mathcal{R}2$ : генеративна модель (а); проміжна виведена модель після застосування правил  $\mathcal{R}0$ ,  $\mathcal{R}1$  (б); виведена модель після застосування правила  $\mathcal{R}2$  (в)

Покажемо, що в класі моделей з дозволеними майже-циклонами правило  $\mathcal{R}2$  може призводити до помилок. Нехай генеративна модель має структуру, зображену на рис. 2, а. (У цій структурі є два майже-циклони:  $Y \rightarrow W \rightarrow X \leftrightarrow Y$  та  $Y \rightarrow W \rightarrow X \rightarrow Z \leftrightarrow Y$ .) Усі змінні (взаємно) безумовно залежні. Змінні  $W$  та  $Z$  не сепаруються, тобто у виведеній моделі виникає ілюзорне ребро  $Z \ast \ast W$ . У цій структурі чинні дві сепарації:  $DS(Q; Y; W)$  та  $DS(Q; \{X, W\}; Z)$ . Завдяки цим фактам сепарації правило  $\mathcal{R}0$  виконує орієнтації  $Q \circ \rightarrow X \leftarrow \circ W$  та  $Q \circ \rightarrow Y \leftarrow \circ Z$ . Далі, правило  $\mathcal{R}1$  орієнтує два ребра. Оскільки маємо  $Q \circ \rightarrow X$  та  $X \in \text{Sep}_{\min}(Q, Z)$ , то буде  $X \rightarrow Z$ . Також із фактів  $Q \circ \rightarrow Y$  та  $Y \in \text{Sep}_{\min}(Q, W)$  це правило виведе  $Y \rightarrow W$ . На цьому етапі виведена модель має вигляд, як показано на рис. 2, б. У цій структурі є кілька «трикутників», де виконуються умови правила  $\mathcal{R}2$ . Правило (8) діє для ребра  $X \circ \rightarrow Y$  двічі, окремо використовуючи фрагменти  $X \rightarrow Z \circ \rightarrow Y$  та  $Y \rightarrow W \circ \rightarrow X$ . Результатом цих двох застосувань правила (8) буде біорієнтоване ребро  $X \leftrightarrow Y$ . Маючи факти  $X \leftrightarrow Y \rightarrow W$  та  $X \leftarrow \circ W$ , правило (9) виведе  $X \leftrightarrow W$ . Тобто станеться помилка орієнтації ребра (адже в генеративній моделі маємо  $X \leftarrow W$ ). Правило  $\mathcal{R}2$  виконає орієнтації ще двох ребер, що дасть структуру, зображену на рис. 2, в.

Отже, переходячи до моделей з майже-циклонами, потрібно корегувати правило  $\mathcal{R}2$ . У [14] запропонована версія  $\mathcal{R}2^{(N)}$  цього правила з більш жорсткими умовами ( $X \rightarrow Y \rightarrow W$ ). (По суті, це повернення до первинного правила, призначеного для класу оАОГ-моделей [7].) Втім, маємо сумніви щодо незамінності такого правила.

#### ПРАВИЛО ОРІЄНТАЦІЇ $\mathcal{R}4$

Вищенаведені правила розпізнають адекватну орієнтацію, розглядаючи пари сусідніх ребер. Правило  $\mathcal{R}4$  відрізняється тим, що розпізнає орієнтацію ребер дистанційно. (Тому його можна назвати правилом «дистанційної дискримінації колізора/неколізора».) В оригінальному формулюванні правила  $\mathcal{R}4$  використано поняття дискримінаційного шляху [2, 4, 5]. Для спрощення викладок сформулюємо правило без цього поняття. Спочатку розглянемо спрощений (локальний) варіант оригінального правила [5], який працює для найпростішої структури, що задовольняє умови правила. Цей спрощений варіант правила  $\mathcal{R}4_{(1)}$  описано в [14]:

$$X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow \ast W \circ \ast Y \ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow W \rightarrow Y; \quad (10)$$

$$X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow \ast W \circ \ast Y \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftrightarrow W \leftrightarrow Y. \quad (11)$$

Як було показано в [14, 15], випадок правила (10) є некоректним для неанцестральних моделей. Корегована версія правила, названа  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$ , формулюється так [14]:

$$X * \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow * W \circ - * Y \ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftarrow * \underline{W} \circ \rightarrow Y; \quad (12)$$

$$X * \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow * W \circ - * Y \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftrightarrow W \leftrightarrow Y. \quad (13)$$

(Подібне правило було запропоновано в [2, 4].) На відміну від оригінального правила (10), у правилі (12) після знака імплікації замість позначки «хвіст» використано позначку невизначеного кінця ребра  $W \circ \rightarrow Y$ . Може здатися, що у формулюванні умов правил (12), (13) у конструкції  $W \circ - * Y$  астерікс біля  $Y$  є неточністю. Ця конструкція охоплює можливий випадок, коли маємо  $W \circ \rightarrow Y$  на вході, а тоді здається, що правило стає безплідним (нічого не виводить). Насправді конструкція з астеріксом біля  $Y$  є коректною. Вістря на позиції астерікса отримаємо, якщо в моделі є ребро  $F * \rightarrow Y$ , яке утворює нешунтований колізор з ребром  $W \circ \rightarrow Y$ . Якби в правилі було записано  $W \circ - \circ Y$ , то вказана ситуація не була би врахована, і тоді ані (12), ані (13) не спрацювали б. Коли маємо  $W \circ \rightarrow Y$ , сенс правила зводиться до виявлення неколізорного стику ребер  $Z \leftarrow * \underline{W} \circ \rightarrow Y$ . Версія  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$  правила не продукує каузальний зв'язок. Але можна вдосконалити це правило, так що воно зможе виводити каузальний зв'язок (див. далі).

Розглянемо всі можливі варіанти ситуації, де потенційно може бути застосоване правило  $\mathcal{R}4$  (нагадаємо, що майже-циклони дозволені). Виокремимо набір рис моделі та вимог, які створюють можливість виконання умов правила  $\mathcal{R}4$ . (Знов обмежимося випадком найкоротшого індукційного шляху, тобто з трьох ребер.) Вибравши таке саме розташування змінних, як у (10)–(13), фіксуємо набір вимог:

1) змінні  $X$  та  $Y$  d-з'єднані шляхом  $X * \rightarrow Z \rightarrow Y$ , але сепаруються (отже, вони не поєднані ребром);

2) існує пара ребер  $Z \leftarrow * W \circ - * Y$ .

Тепер легко перелічити всі (локальні) конфігурації ребер, де можуть бути виконані умови правил  $\mathcal{R}4_{(1)}$  та  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$ . Можливі три варіанти уточнення ребра  $W \circ - * Y$  та два варіанти уточнення правого кінця ребра  $Z \leftarrow * W$ . Загалом маємо  $3 \times 2 = 6$  можливих комбінацій ребер цього трикутника. Серед цих комбінацій є одна з циклом ( $Z \rightarrow Y \rightarrow W \rightarrow Z$ ), її видаляємо. Отже, маємо п'ять конфігурацій, які відображені на рис. 3. Лівий кінець ребра  $X * \rightarrow Z$  не відіграє ролі в цьому аналізі, тому варіанти  $X \rightarrow Z$  та  $X \leftrightarrow Z$  не розрізняються. Репрезентовані на рис. 3 конфігурації можуть (як фрагменти) входити у більші структури, але додавання ребер не має порушувати вказаних фактів. Також утримаємося

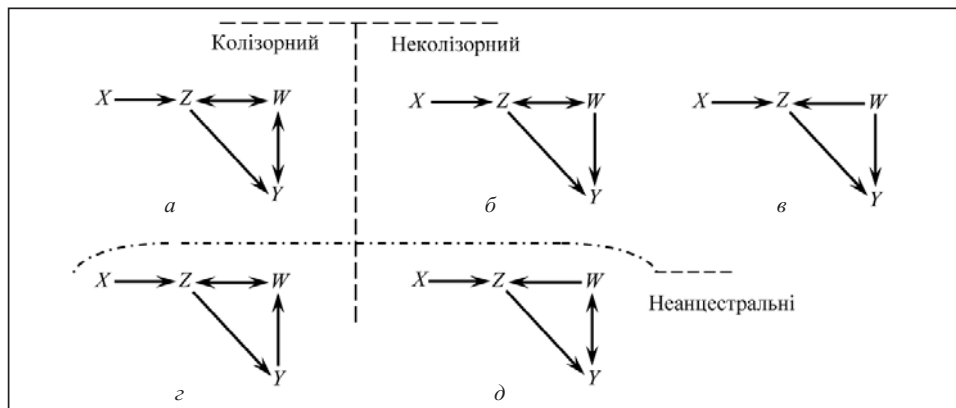


Рис. 3. Всі конфігурації, узгоджені з умовами правила  $\mathcal{R}4$ : анцестральні моделі (а, б, в); неанцестральні моделі (з, д)

від утворення арок. Дві останні конфігурації (див. рис. 3, з, д) містять майже-циклони і зумовлюють потребу в перегляді правила, розробленого для анцестральних моделей.

З вимоги 1 випливає, що  $Z$  обов'язково належить сепаратору для пари  $X, Y$ ,  $Z \in \text{Sep}_{\min}(X, Y)$ . Отже, внаслідок кондиціонування набору  $\text{Sep}_{\min}(X, Y)$  утворюється відкритий шлях між  $X$  та  $W$  згідно з вимогою 2. До цього шляху приєднано ребро  $W \circ - * Y$  (конкатенація), так що утворюється 3-реберний шлях між  $X$  та  $Y$ . Але оскільки внаслідок кондиціонування  $\text{Sep}_{\min}(X, Y)$  відкритого шляху між  $X$  та  $Y$  бути не може, то шлях між  $X$  та  $Y$  через  $Z$  та  $W$  має бути заблокований саме на вершині  $W$ . Для цього є два варіанти, які визначаються типом стику ребер на вершині  $W$  та відповідним термом в умові правила  $\mathcal{R}4$ :

- 1) стик указаних ребер є колізорним, а  $W$  не належить  $\text{Sep}_{\min}(X, Y)$ ;
- 2) стик указаних ребер є неколізорним, а  $W$  належить  $\text{Sep}_{\min}(X, Y)$ .

Першою розглянемо одну конфігурацію з майже-циклоном (рис. 3, з). Це особлива конфігурація, бо вона містить спрямування ребра  $W \leftarrow Y$ , не передбачене відомими версіями правила  $\mathcal{R}4$ , зокрема, (10)–(13). У цій конфігурації маємо таке сполучення орієнтацій ребер, що змінні  $X$  та  $W$  неможливо сепарувати. (Стандартний алгоритм не може розпізнати, чи існує автентичне ребро  $X * - * W$ , чи це ребро є ілюзорним.) Нехай маємо генеративну модель, зображену на рис. 3, з. Наявність (ілюзорного) ребра  $X * - * W$  у виведеній моделі створює додатковий 2-реберний шлях між  $X$  та  $Y$ . Оскільки  $W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y)$ , то правило  $\mathcal{R}0$  орієнтує ребра цього шляху як  $X \circ \rightarrow W \leftarrow \circ Y$ . Правила  $\mathcal{R}1$  та  $\mathcal{R}2$  не діють у цій ситуації. Правило  $\mathcal{R}3$  знаходить підхожі умови і встановлює вістря ребра  $Z \circ \rightarrow W$ . У результаті буде виведено модель, зображену на рис. 4, а. (Якщо алгоритм оснащено правилом (4), то додатково буде виведено  $X \circ \rightarrow Z \circ \rightarrow Y$ .) Такий результат не задовольняє умови правила  $\mathcal{R}4$  за кількома пунктами. По-перше, умовам правил (10)–(13) не задовольняє вістря ребра  $W \leftarrow \circ Y$ . По-друге, умовам правила  $\mathcal{R}4$  суперечить невизначений лівий кінець ребра  $Z \circ \rightarrow W$ . Інші неузгодженості з умовами правила  $\mathcal{R}4$  (які можна знайти на рис. 4, а) властиві тільки цій конкретній структурі, а взагалі їх можна усунути. Наприклад, якщо генеративна модель (розширення цієї конфігурації) додатково буде включати два ребра:  $Q * \rightarrow X$  та  $V * \rightarrow X$  (див. рис. 4, б), то буде виведено  $X \rightarrow Z \rightarrow Y$  (див. рис. 4, в). Але дві (вказані вище) невідповідності умовам правила  $\mathcal{R}4$  залишаться. У наступному розділі пояснюється, чому не вдається вивести ліве вістря ребра  $Z \leftrightarrow W$  у цій конфігурації, а також розглядається ще одна проблема.

Отже, попри те, що особлива конфігурація (рис. 3, з) потенційно не суперечить умовам правила  $\mathcal{R}4$ , деякі умови не будуть задоволені в ході виведення моделі. Водночас колізорний стик ребер на вершині  $W$  виводиться іншими правилами. Таким чином, особлива конфігурація не створює проблем для правила  $\mathcal{R}4$ . Після зняття цієї конфігурації з розгляду стає очевидним (див. рис. 3),

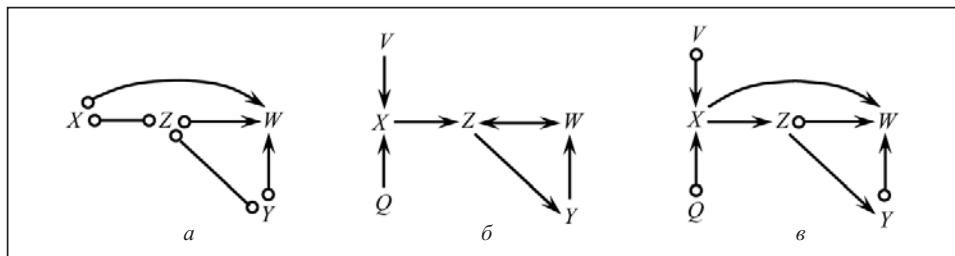


Рис. 4. Особлива конфігурація ребер (див. рис. 3, з), варіанти: виведена модель (а); генеративна модель (б); виведена модель (в)

що умова  $W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y)$  (разом з рештою умов) виконується для єдиної конфігурації (див. рис. 3, а), яка є анцестральним графом. Отже, версія (11) правила  $\mathcal{R}4$  безпечно поширюється на неанцестральні моделі. Правило (11) просто не працює в такому випадку (умови правила захищені).

Тепер розглянемо випадок  $W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y)$ , тобто конфігурації з неколізорним стиком ребер  $Z \ast \text{--} W$  та  $W \ast \text{--} Y$ . Зазначимо, що вихід за межі анцестральних моделей спричинив появу конфігурації, показаної на рис. 3, д. Як наслідок, виникла варіабельність лівого кінця ребра  $W \ast \text{--} Y$ . Це зумовило потребу в корегуванні правила  $\mathcal{R}4_{(1)}$ . А саме за умови  $W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y)$  довелося замінити висновок  $W \rightarrow Y$  на  $Z \leftarrow \ast \underline{W} \circ \rightarrow Y$ , як записано у (12). Але з'ясувалося, що оновлене правило не вичерпує можливостей виведення орієнтацій. Дійсно, нехай маємо конфігурацію, відображену на рис. 3, б. Завдяки факту  $W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y)$  зрозуміло, що маємо неколізорний стик ребер  $Z \ast \text{--} W$  та  $W \circ \text{--} Y$ . Якщо додатково також з'ясується, що маємо вістря на правому кінці ребра  $Z \ast \rightarrow W$ , то стане зрозумілим, що єдина можливість отримати неколізорний стик ребер  $Z \ast \rightarrow W$  та  $W \circ \text{--} Y$  — це орієнтувати ребро як  $W \rightarrow Y$ . Такий сценарій демонструється далі. Отже, фіксуємо, що корегована версія (12) правила виконує не всю можливу роботу. Для виведення орієнтацій ребер у вказаних ситуаціях (у класі моделей з латентними конфаундерами) доцільно запропонувати оптимізовану версію правила  $\mathcal{R}4_{(1)}$ .

Для моделей з дозволенними майже-циклонами замість версії  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$  пропонуємо оновлену та оптимізовану версію правила, позначену  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$  (індекс  $LC$  означає latent confounders). Правило  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$  охоплює три варіанти ситуації і формулюється так:

$$X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow \ast W \circ \text{--} Y \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftrightarrow W \leftrightarrow Y; \quad (14)$$

$$X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftrightarrow W \circ \text{--} Y \ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftrightarrow W \rightarrow Y; \quad (15)$$

$$X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftarrow \circ W \circ \text{--} Y \ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftarrow \circ \underline{W} \circ \rightarrow Y. \quad (16)$$

Перший варіант (14) повторює відповідний варіант (11) оригінального правила  $\mathcal{R}4_{(1)}$  та варіант (13). Другий варіант правила (15) є новим. (Опис правої частини (15) охоплює два ребра, щоб витримати єдиний формат правила.) Третій варіант правила (16) є уточненням версії  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$  з урахуванням нового варіанта правила (15). Ліва частина (16) відрізняється від (12) тільки кінцем одного ребра, біля змінної  $W$ . У (12) записано  $Z \leftarrow \ast W$ . Натомість у (16) записано  $Z \leftarrow \circ W$ , і такий запис потрібен, тому що інші варіанти цього кінця ребра або вже враховані, або призводять до втрати сенсу. Дійсно, є два альтернативні варіанти. Варіант  $Z \leftrightarrow W$  вже охоплено (враховано) варіантом правила (15). Інший варіант, тобто  $Z \leftarrow W$ , не дає змоги розрізнити орієнтацію ребра  $W \circ \text{--} Y$ , тому що за будь-якої орієнтації цього ребра  $W \circ \text{--} Y$  стик ребер  $Z \leftarrow W \circ \text{--} Y$  буде неколізорний. Виводити конструкцію  $\leftarrow \underline{W} \circ \rightarrow$  не має сенсу, це тривіально.

Тепер захистимо новий варіант (15) правила  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$ . (Цей варіант правила продукує каузальний зв'язок.) Покажемо сценарій, коли правило (15) працює. Нехай маємо генеративну модель, відображену на рис. 5, а. Після застосування правила  $\mathcal{R}0$  буде виведено біорієнтоване ребро  $Z \leftrightarrow W$ . Потім правило  $\mathcal{R}1$  допоможе уточнити ребро  $Z \circ \rightarrow Y$  як  $Z \rightarrow Y$ . Правила  $\mathcal{R}2^{(N)}$  та  $\mathcal{R}3$  не працюють. Ребро між  $W$  та  $Y$  залишиться у вигляді  $W \circ \text{--} Y$ . На цьому етапі отримаємо про-



Рис. 5. Ілюстрація застосування правила орієнтації ребер: генеративна модель (а); проміжна виведена модель перед застосуванням  $\mathcal{R}4$  (б)

міжний результат, показаний на рис. 5, б. Якщо алгоритм використовує правило  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$ , то в цій ситуації спрацює варіант правила (15) і буде виведено каузальне ребро  $W \rightarrow Y$ . Отримаємо модель, повністю узгоджену зі свідченнями (зокрема, з фактом, що змінна  $W$  є необхідним елементом сепаратора для пари  $X, Y$ ). Якщо алгоритм використовує правило  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$ , то спрацює (12) і буде виведена орієнтація ребра  $W \circ \rightarrow Y$ . (Точніше, конструкція  $Z \leftrightarrow W \circ \rightarrow Y$ .) Якщо алгоритм також застосовує правило (6) і циклічно намагається задіяти всі правила орієнтації, то зрештою він знайде конструкцію  $Z \leftrightarrow W \circ \rightarrow Y$ , застосує (6), і буде виведено каузальне ребро  $W \rightarrow Y$ . Але запропонований варіант (15) виконує потрібну роботу негайно та дає змогу знайти додаткові резерви оптимізувати алгоритм виведення.

Порівняємо механізм ідентифікації каузального зв'язку правилом (15) з «класичним» механізмом правила  $\mathcal{R}1$  (5). В обох випадках та змінна, яка ідентифікується як причина, є членом мінімального сепаратора для  $X$  та змінної-наслідку  $Y$ . Відмінність правила (15) полягає в тому, що змінна-причина (у цьому разі  $W$ ) стає медіатором залежності між «інструментальною» змінною  $X$  та змінною-наслідком  $Y$  тільки після кондиціонування допоміжної змінної  $Z$ . (Між змінною-причиною  $W$  та інструментальною змінною  $X$  лежить колізор  $X \rightarrow Z \leftrightarrow W$  (див. рис. 5, а).)

Після виведення ребра  $W \rightarrow Y$  у моделі (див. рис. 5, б) виникає ситуація, коли для іншого фрагмента моделі (який включає змінну  $V$ ) треба застосувати розширений варіант правила  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$  (який буде сформульовано далі). Той розширений варіант правила виведе  $W \leftarrow \circ V \circ \rightarrow Y$ .

Тепер припустимо, що маємо генеративну модель, яка відрізняється від моделі, показаної на рис. 5, а, лише тим, що змінна  $V$  відсутня (тобто повертаємося до структури на рис. 3, б). Тоді спрацює варіант правила (16) і буде виведено стик ребер  $Z \leftarrow \circ W \circ \rightarrow Y$ . Формулювання варіанта правила (16) є коректним, і висновок не можна посилити. Під дію правила (16) підпадають три моделі, показані на рис. 3, б, в, д. Вони не відрізняються марковськими властивостями, хоча мають різні фрагменти  $Z \leftrightarrow W \rightarrow Y$ ,  $Z \leftrightarrow W \rightarrow Y$  та  $Z \leftarrow W \rightarrow Y$ . Ці варіанти адекватно описуються патерном  $Z \leftarrow \circ W \circ \rightarrow Y$ .

Як зазначалося раніше, правила  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(N)}$  та  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$  були сформульовані для найпростішої із структур, для яких призначено правило  $\mathcal{R}4$  (для ситуації з найкоротшим дискримінаційним шляхом). Напишемо наступний за складністю варіант правила, який працює для структури, де є два колізори на шляху між вершинами  $X$  та  $W$ . Відповідний розширений варіант правила, позначений  $\mathcal{R}4_{(2)}^{(LC)}$ , формулюється так:

$$\begin{aligned}
 & X * \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftrightarrow Q \rightarrow Y \ \& \ Q \leftarrow * W \circ - * Y \ \& \\
 & \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Q \leftrightarrow W \leftrightarrow Y;
 \end{aligned} \tag{17}$$

$$X * \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftrightarrow Q \rightarrow Y \ \& \ Q \leftrightarrow W \circ - * Y \ \& \\ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Q \leftrightarrow W \rightarrow Y; \quad (18)$$

$$X * \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \leftrightarrow Q \rightarrow Y \ \& \ Q \leftarrow \circ W \circ - * Y \ \& \\ \& \ W \in \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Q \leftarrow \circ W \circ \rightarrow Y. \quad (19)$$

У ситуації, яку відображено на рис. 5, б, правило (19) виведе  $W \leftarrow \circ V \circ \rightarrow Y$ .

#### АПІОРНІ ВИМОГИ. АРКИ. ЕКСТРАПРАВИЛА

Спочатку повернемося до аналізу особливої конфігурації. Як вже було зазначено, для виконання умов правил (11), (13) та (14) потрібно, зокрема, вивести ліве вістря ребра  $Z \leftarrow * W$ . Чи можна вивести це вістря, маючи генеративну структуру, частиною якої є особлива конфігурація (див. рис. 3, з)? Оскільки в цій конфігурації змінні  $X$  та  $W$  не сепаруються, то неможливо ідентифікувати вказане вістря за допомогою правила  $\mathfrak{R}0$ . (Включення в модель додаткового ребра  $J * \rightarrow Z$  не допоможе.) У генеративній моделі ребро  $Z \leftrightarrow W$  є біорієнтованим, тому жодне його вістря не може бути виведено правилом  $\mathfrak{R}1$ . Чи можна досягти мети за допомогою правил  $\mathfrak{R}2^{(N)}$  або  $\mathfrak{R}3$ ? У трикутнику з вершинами  $Z, Y, W$  правило  $\mathfrak{R}2^{(N)}$  [14] потенційно здатне орієнтувати тільки праве вістря ребра  $Z \leftrightarrow W$ , але не ліве. Отже, треба сконструювати інший трикутник з додатковою парою ребер вигляду  $Z \leftarrow T \leftarrow W$ . Але тоді утвориться циклон  $Z \rightarrow Y \rightarrow W \rightarrow T \rightarrow Z$  і сепарувати  $X$  та  $Y$  буде неможливо.

Перевіримо, чи можна вивести вістря  $Z \leftarrow * W$  за допомогою правила  $\mathfrak{R}3$  (7). Для цього потрібно додати в генеративну модель фрагмент  $Z \leftarrow * T * - * W * - * Q \leftrightarrow Z$ . Ця ідея дає структуру, відображену на рис. 6, а. Щоб спрацювало правило  $\mathfrak{R}3$  (і вивело  $Z \leftarrow * W$ ), необхідно мати факт  $W \in \text{Sep}_{\min}(Q, T)$ . Але оскільки існує оршлях  $Z \rightarrow Y \rightarrow W$ , кондиціонування змінної  $W$  дистанційно відкриває колізор  $T \rightarrow Z \leftrightarrow Q$ . Отже, неможливо сепарувати  $Q$  від  $T$ . Отже, правило  $\mathfrak{R}3$  у цьому разі не спрацює і не допоможе вивести проблемне вістря ребра  $Z \leftarrow * W$ .

Дослідимо останній шанс вивести ліве вістря ребра  $Z \leftarrow * W$ , а саме за допомогою правила  $\mathfrak{R}4_{(1)}^{(LC)}$ . Ідея полягає в тому, щоб правило (14) розпізнало колізорний стик ребра  $Z \leftarrow * W$  з якимось іншим ребром. Підхожу структуру отримуємо, доєднавши до базової конфігурації (див. рис. 3, з) фрагменти  $S \rightarrow V \rightarrow W$  та  $Z \leftrightarrow V$ . Тобто беремо для аналізу генеративну модель, зображену на рис. 6, б. Для того щоб правило (14) спрацювало для конструкції з вершинами  $S, V, Z, W$ , необхідно знайти сепаратор для пари вершин  $S, W$ . Припустимо, такий сепаратор  $\text{Sep}_{\min}(S, W)$  існує. Очевидно, що  $V \in \text{Sep}_{\min}(S, W)$ . Кондиціонування змінної  $V$  відкриває колізор  $S \rightarrow V \leftrightarrow Z$ . У результаті формується відкритий шлях від  $S$  через  $V, Z, Y$  до  $W$ . Для перекриття цього шляху треба кондиціонувати  $Y$ . Але тоді дистанційно відкриється колізор  $V \leftrightarrow Z \leftrightarrow W$  (див.

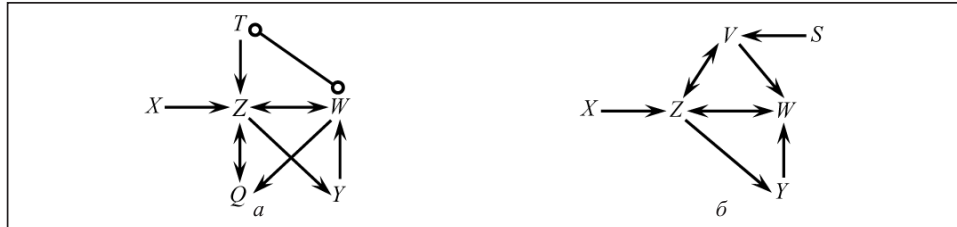


Рис. 6. Структури для ілюстрації: конструкція для застосування правила  $\mathfrak{R}3$  (а); конструкція для застосування правила  $\mathfrak{R}4$  (б)

рис. 6, б). Унаслідок цього утвориться відкритий шлях від  $S$  до  $W$  через  $V$ ,  $Z$ . Отже,  $S$  та  $W$  неможливо сепарувати, а тому не вдасться застосувати (14) так, щоб отримати проблемне вістря ребра  $Z \leftarrow^* W$ .

На завершення зазначимо, що ідентифікувати ліве вістря ребра  $Z \leftarrow^* W$  також не допоможе апіорна інформація у формі темпорального порядку змінних. Адже це вістря спрямовано від пізнішої  $W$  до більш ранньої  $Z$ , тобто виглядає так, ніби вістря спрямовано супроти плину часу. (Звісно, вплив не може бути спрямованим «назад» у часі. Вказане вістря створює оманливе враження спрямованості всупереч часу через те, що не відображено спільної причини змінних  $Z$  та  $W$ .) До того ж, якщо задано темпоральний порядок змінних, то згідно зі здоровим глуздом ребра будуть орієнтовані як  $Z \rightarrow^* W$  та  $Y \rightarrow^* W$ , отже, правило  $\mathcal{R}_4$  у цій ситуації стане непотрібним.

Таким чином, показано, що особлива конфігурація (див. рис. 3, з) не створює проблем для правила  $\mathcal{R}_4$ . Правила (11), (13), (14) коректно працюють у процесі виведення неанцестральних моделей із фактів залежності/незалежності.

Варто висвітлити деякі нюанси і ускладнення, пов'язані з особливою конфігурацією. Раніше було показано властивості системи залежностей, які не дають змоги правилам (11), (13) та (14) помилково орієнтувати ребро  $W \circ \rightarrow^* Y$ . Але ці запобіжники можуть не спрацювати в разі використання аналітиком та алгоритмом додаткових засобів. Мається на увазі застосування спеціальних засобів ідентифікації ребра та залучення до виведення моделі предметних (апіорних) знань. Особлива конфігурація (див. рис. 3, з) є такою структурою, яка характеризується стримуванням Верма (функціональне обмеження на сумісний розподіл імовірностей) [1, 16]. Якщо в генеративній структурі присутнє автентичне ребро  $X \rightarrow^* W$ , то стримування Верма буде некоректним у цій структурі. Отже, якщо тестування показало, що для заданого фрагмента стримування Верма виконується, аналітик має підстави дійти висновку, що ребро  $X \rightarrow^* W$  є ілюзорним, і видалити його. Тоді, на відміну від наведеного раніше сценарію, не спрацює правило  $\mathcal{R}_0$  і лівий кінець ребра  $W \circ \rightarrow^* Y$  залишиться невизначеним. (Застосування стримування Верма та його узагальнення описано в [8, 16–18].) Втім, тест на відсутність ілюзорного ребра часто має недостатню потужність. Але рішення про відсутність ребра може базуватися також на предметних знаннях експерта. Якщо експерт заборонить автентичне ребро  $X \rightarrow^* W$ , знов отримаємо ситуацію, де лівий кінець ребра  $W \circ \rightarrow^* Y$  залишиться невизначеним.

Для детального аналізу проблеми розглянемо приклад особливої конфігурації, показаний на рис. 7, а. Нехай алгоритм отримує ззовні вказівку (знання), що ребро  $X \rightarrow^* W$  ілюзорне. Врахувавши це знання, алгоритм виведе структуру, показану на рис. 7, б. Як у цій структурі пояснити несепарабельність змінних  $X$  та  $W$ ? Заборона автентичного ребра  $X \rightarrow^* W$  означає, що залежність між  $X$  та  $W$  має забезпечуватися через посередництво спостережуваних змінних, зокрема, через  $Z$ . Оскільки виведено  $Z \rightarrow Y$ , то кондиціонування  $Z$  перекриває шлях  $X \circ \rightarrow Z \rightarrow Y$ . Отже, умовна залежність між  $X$  та  $W$  безальтернативно має підтримуватися через шлях  $X \circ \rightarrow Z \circ \rightarrow W$ . Це означає, що необхідно орієнтувати ребро як  $Z \leftarrow^* W$ . Далі, якщо припустити, що маємо вістря  $Y \leftarrow^* W$ , то має бути  $DS(X; ; W)$ , — суперечність. Тому потрібно орієнтувати ребро як  $Y \rightarrow W$ . Після цього, врахувавши факт  $DS(X; Z; Y)$  (тобто факт  $W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y)$ ), треба вивести  $Z \leftrightarrow W$ . Отже, всі ребра отримали вичерпні орієнтації (за винятком лівих кінців ребер  $X \circ \rightarrow Z$  та  $Q \circ \rightarrow Z$ ). Таким чином, прийнявши директиву, що ребро  $X \rightarrow^* W$  ілюзорне, і прийнявши за умовчанням, що арки неможливі, матимемо безальтернативний варіант орієнтації ребер для коректного пояснення

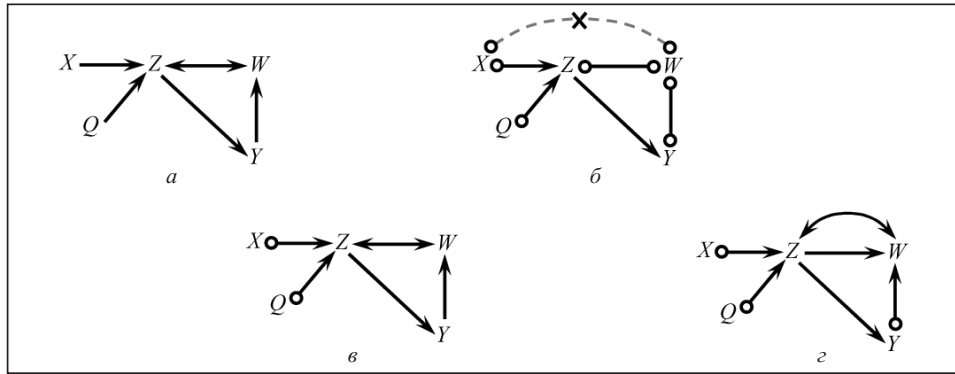


Рис. 7. Ілюстрація виведення орієнтацій ребер для моделі з майже-циклоном: генеративна модель (а); виведені моделі (б, в, з)

несепарабельності змінних  $X$  та  $W$  (див. рис. 7, в). Наведена аргументація, по суті, утворює нову версію правила  $\mathcal{R}4$ . Але перш ніж формулювати це правило, необхідно підкреслити вагу твердження, що ребро  $X \ast \ast W$  є ілюзорним. Адже це твердження не підтримано емпіричними свідченнями, бо немає сепаратора для змінних  $X$  та  $W$ . Це твердження означає, що заперечуються усі можливі асоціації між  $X$  та  $W$  через будь-які приховані змінні в обхід всіх наявних змінних. Це надзвичайно жорстке і претензійне твердження, яке важко або неможливо тестувати. Попри це, нехай аргументація щодо відсутності автентичного ребра  $X \ast \ast W$  визнана переконливою. Тобто вирішено, що стійка залежність між  $X$  та  $W$  забезпечується через посередництво наявних змінних. Позначимо знання про ілюзорність ребра  $X \ast \ast W$  за допомогою терму  $[(X \ast \ast W)_{is\_illusory}]$ . Для описаної ситуації можна сформулювати відповідне нове правило орієнтації. Якщо арки заборонені, то чинне екстраправило  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(e)}$ :

$$[(X \ast \ast W)_{is\_illusory}] \ \& \ (\text{Sep}_{\min}(X, W) \text{ is\_absent}) \ \& \\ \& \ X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \ast \rightarrow W \circ \rightarrow Y \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow Z \leftrightarrow W \leftarrow Y. \quad (20)$$

Звертаємо увагу, що екстраправило (20) виводить структуру з майже-циклоном у явному вигляді. (Жодне інше відоме правило цього не робить.) А головне — правило (20) виводить каузальне ребро.

Якщо допустити існування арок, то виникає інший варіант пояснення зазначеної комбінації апріорного знання і статистичних свідчень. Тобто можна прийняти гіпотезу, що безумовна залежність між  $X$  та  $W$  передається крізь коротший шлях  $X \ast \rightarrow Z \ast \ast W$  (а не обов'язково крізь  $Z$  та  $Y$ ). Отже, має бути орієнтація ребра  $Z \rightarrow W$ . Водночас, для підтримки умовної залежності між  $X$  та  $W$  (за кондиціонування  $Z$ ) має бути орієнтація ребра  $Z \leftrightarrow W$ . Таким чином, між  $Z$  та  $W$  мусить бути два ребра одночасно, тобто арка. Для виконання такого виведення потрібно нове розширене екстраправило. Воно охоплює варіант (20) і додає новий варіант з аркою. Нове розширене правило  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(ea)}$  формулюється у наступній формі. Якщо арки дозволені, то екстраправило має вигляд

$$[(X \ast \ast W)_{is\_illusory}] \ \& \ (\text{Sep}_{\min}(X, W) \text{ is\_absent}) \ \& \\ \& \ X \ast \rightarrow Z \rightarrow Y \ \& \ Z \ast \rightarrow W \circ \rightarrow Y \ \& \ W \notin \text{Sep}_{\min}(X, Y) \Rightarrow \\ \Rightarrow Z \leftrightarrow W \leftarrow Y \text{ OR } \{Z \leftrightarrow W \ \& \ Z \rightarrow W \leftarrow Y\}. \quad (21)$$

Правило (21), на відміну від інших, має два альтернативні варіанти висновку (диз'юнкція). Згідно з другим варіантом виводиться арка  $Z \rightarrow W, Z \leftrightarrow W$ . Цієї арки достатньо, щоб пояснити несепарабельність  $X$  та  $W$ . У цьому варіанті з аркою  $(Z \xrightarrow{\sim} W \leftarrow \circ Y)$  збережено невизначений правий кінець ребра  $W \leftarrow \circ Y$ . Тим самим утримано два підваріанти структури: згідно з першим безумовна залежність між  $X$  та  $W$  забезпечується тільки через один шлях (крізь арку), згідно з другим — через два шляхи паралельно (рис. 7, з). Марковські властивості та вказаний апіорний факт не дають змоги розрізнити ці підваріанти структури.

Тепер констатуємо, що виведення каузального ребра правилом (20) побудовано за нетрадиційним принципом. За вказаних обставин, коли директивно заборонені арки і ребро  $X * \rightarrow W$ , каузальне ребро стає єдиною безальтернативною можливістю забезпечити механізм (шлях) для залежності між  $X$  та  $W$ . Невипадково, що факт ілюзорності ребра (особливо за можливості арок) має апіорний характер. Проблема тестування ілюзорності ребра еквівалентна проблемі тестування інструментальної змінної (а остання проблема не має загального розв'язку).

Звертаємо увагу на особливість конструкції з аркою, утвореною з ребер  $A \rightarrow B, B \rightarrow C, B \leftrightarrow C$ . За наявності такої конструкції неможливо перекрити залежність між  $A$  та  $C$ . Хоча ця залежність передається саме через  $B$  (через шлях  $A * \rightarrow B * \rightarrow C$ ), вона передається (утримується) як за кондиціонування  $B$ , так і без нього. Такий стик ребер одночасно є як колізорним, так і неколізорним. Конструкцію  $A * \rightarrow B \xrightarrow{\sim} C$  назовемо «входом в арку» (а конструкцію  $A * \rightarrow B \xleftarrow{\sim} C$  відповідно «виходом з арки»). Вхід в арку завжди відчинений: за кондиціонування змінної  $B$  інформація проходить над аркою, а без кондиціонування  $B$  — під аркою.

Тепер проаналізуємо ефективність правил (20), (21). Одна частина умов  $(X * \rightarrow Z \rightarrow Y)$  успадкована від правил (10)–(19). Тепер, коли використовується апіорний факт про відсутність ребра, чи не можна обійтися без цієї частини умови? Розглянемо наступну ситуацію. Нехай для системи з чотирьох змінних:  $W, X, Y, Z$ , задано, що апіорі заборонено ребро  $X * \rightarrow W$ , апіорі заборонені арки, чинна тільки одна незалежність  $DS(X; Z; Y)$ . З цієї інформації можна вивести наслідки. Застосування правила  $\mathfrak{R}0^{(c)}$  (4) дає  $X \circ \rightarrow \circ Z \circ \rightarrow \circ Y$ . Факт  $DS(X; Z; Y)$  означає, що за кондиціонування змінної  $Z$  інформація від  $X$  не проходить через  $Z$  до  $Y$ . Отже, інформація не дійде і до  $W$  по довшому шляху  $X * \rightarrow Z * \rightarrow Y * \rightarrow W$ . Тому, враховуючи заборону ребра  $X * \rightarrow W$ , констатуємо, що за кондиціонування змінної  $Z$  інформація від  $X$  до  $W$  доходить через стик ребер  $X * \rightarrow Z * \rightarrow W$ . Отже, ідентифікуємо колізор  $X \circ \rightarrow Z \leftarrow \circ W$ . Після цього (отримавши  $X \circ \rightarrow Z$ ) правило  $\mathfrak{R}1$  (5) або  $\mathfrak{R}1^{(+)}$  (6) має орієнтувати  $X \circ \rightarrow Z \rightarrow Y$ . Зіставляючи факти  $X \circ \rightarrow Z \leftarrow \circ W, W \circ \rightarrow \circ Y$  та  $DS(X; Z; Y)$ , доходимо висновку, що  $Z \leftrightarrow W \leftarrow \circ Y$ . Оскільки арки заборонені, а безумовна залежність між  $X$  та  $W$  не може проходити через колізор  $X \circ \rightarrow Z \leftarrow \circ W$ , то ця залежність мусить проходити через шлях  $X \circ \rightarrow Z \rightarrow Y \circ \rightarrow \circ W$ . Отже, має бути

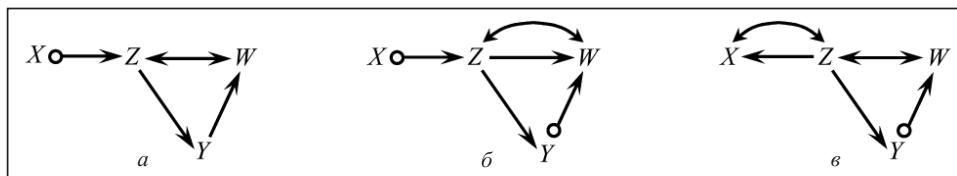


Рис. 8. Структури, узгоджені з фактом  $DS(X; Z; Y)$  і апіорною заборонаю ребра між  $X$  та  $W$ : структура без арок (а); структури з арками (б, в)

орієнтація  $Y \rightarrow W$ . Результат описаного виведення показано на рис. 8, а. (Зазначимо, що орієнтація ребер відбулась без застосування правила  $\mathfrak{R}0$  (3).) Таким чином, порівняно з (20) вдалося послабити умову  $X * \rightarrow Z \rightarrow Y$  на вході і отримати більш потужне правило. Описаний процес можна сформулювати як екстраправило. Запропонуємо чернетку такого правила. Якщо арки заборонені, то чинне екстраправило

$$\begin{aligned} & [(X * \rightarrow W) \text{ is\_illusory}] \ \& \ (\text{Sep}_{\min}(X, W) \text{ is\_absent}) \ \& \\ & \ \& \ X * \rightarrow Z \circ \rightarrow Y \ \& \ Z \circ \rightarrow W \circ \rightarrow Y \ \& \ \text{DS}(X; Z; Y) \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } Q \ (Q \neq W, X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(Q; ; X) \ \& \ \neg \text{DS}(Q; ; W)\} \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } V \ (V \neq W, X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(V; ; Z) \ \& \ \neg \text{DS}(V; ; W)\} \Rightarrow \\ & \Rightarrow X * \rightarrow Z \leftrightarrow W \leftarrow Y, \ Z \rightarrow Y. \end{aligned} \quad (22)$$

У формулювання (22) включено громіздкі умови, які констатують відсутність змінних з певними контактами. Це прямолінійна спроба поширити запропоновану логіку на ситуації, де є більше чотирьох змінних. (Цю частину умови можна замінити більш гнучкою.)

Якщо арки дозволено, то ситуація змінюється, і набір моделей, узгоджених з наявною інформацією, значно розширюється. Зокрема, узгоджені структури з однією аркою показані на рис. 8, б, в.

Висновок про існування арки закономірно виникає після апіорної заборони ребра. Іноді наявність арки в моделі необхідна (арка безальтернативна). Наприклад, нехай маємо систему з трьох змінних:  $X, Y, Z$ , причому жодного сепаратора в цій системі не існує і апіорі заборонено ребро  $X * \rightarrow Z$ . Тоді адекватна модель має включати принаймні одну арку. Узгодженими в цій ситуації є сім структур: чотири варіанти з однією аркою і три варіанти з двома арками. Опишемо ці структури з використанням нового позначення. Структури з однією аркою:  $X \rightarrow Y \rightarrow Z$ ,  $X \leftrightarrow Y \rightarrow Z$ ,  $X \leftarrow Y \leftarrow Z$ ,  $X \leftarrow Y \leftrightarrow Z$ . Структури з двома арками:  $X \rightarrow Y \rightarrow Z$ ,  $X \leftarrow Y \rightarrow Z$ ,  $X \leftarrow Y \leftarrow Z$ . Спільною властивістю всіх варіантів структури у цій ситуації є стійка передача залежності крізь стик ребер на змінній  $Y$ . Уведемо відповідну нотацію для такої властивості моделі.

Пропонується виражати це як  $X * \rightarrow \widehat{Y} \circ \rightarrow Z$ . На відміну від конструкції  $X * \rightarrow \underline{Y} \circ \rightarrow Z$ , конструкція  $X * \rightarrow \widehat{Y} \circ \rightarrow Z$  позначає, що залежність між  $X$  та  $Z$  стійко (як за кондиціонування  $Y$ , так і без нього) передається крізь вказаний стик ребер на змінній  $Y$ . Тобто залежність передається крізь вказаний стик за всіх умов. На відміну від ситуації, описаної як  $X * \rightarrow \underline{Y} * \rightarrow Z$ , конструкція  $X * \rightarrow \widehat{Y} \circ \rightarrow Z$  виводиться, коли жодного сепаратора для  $X$  та  $Z$  не існує (завдяки латентному конфаундеру). Тоді правило  $\mathfrak{R}0^{(c)}$  (4) не працює. Доцільно запропонувати відповідне екстраправило виведення  $\mathfrak{R}0^{(ce)}$ . Спеціальний варіант такого правила (чернетка) має вигляд

$$\begin{aligned} & [(X * \rightarrow Z) \text{ is\_illusory}] \ \& \ (\text{Sep}_{\min}(X, Z) \text{ is\_absent}) \ \& \ X * \rightarrow Y * \rightarrow Z \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } M \ (M \neq X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(M; ; X) \ \& \ \neg \text{DS}(M; ; Z)\} \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } Q \ (Q \neq X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(Q; ; X) \ \& \ \neg \text{DS}(Q; ; Y)\} \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } V \ (V \neq X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(V; ; Y) \ \& \ \neg \text{DS}(V; ; Z)\} \ \& \\ & \ \& \ \{\text{no\_one } W \ (W \neq X, Z, Y) \text{ exists, such that } \neg \text{DS}(X; Y; W) \ \& \ \neg \text{DS}(W; Y; Z)\} \Rightarrow \\ & \Rightarrow X * \rightarrow \widehat{Y} \circ \rightarrow Z. \end{aligned} \quad (23)$$

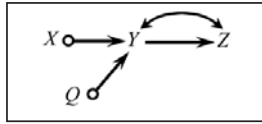


Рис 9. Виведена модель з аркою

Умови правила (23) виключають можливість передачі інформації між  $X$  та  $Z$  в обхід  $Y$ . Вказані умови не охоплюють всіх випадків, коли можна ідентифікувати конструкцію  $X * \circ \hat{Y} \circ * Z$ , але спроба охопити додаткові випадки потребуватиме ще більш громіздких формулювань.

За певних обставин арка ідентифікується однозначно на конкретній позиції. Наприклад, нехай для системи з чотирьох змінних:  $Q, X, Y, Z$ , задано, що апріорі заборонені ребра  $X * \rightarrow Z$  та  $Q * \rightarrow Z$  і чинна тільки одна незалежність  $DS(Q; X)$ . Тоді правило  $\mathcal{R}0$  орієнтує  $X \circ \rightarrow Y \leftarrow \circ Q$ . Оскільки два ребра заборонено, то несепарабельність  $X$  та  $Z$  означає, що і безумовна, і умовна залежності між  $X$  та  $Z$  мають передаватися крізь стик ребер  $X * \rightarrow Y * \rightarrow Z$ . Тобто необхідно констатувати конструкцію  $X \circ * \hat{Y} \circ \circ Z$ . (Аналогічно, констатуємо  $Q \circ * \hat{Y} \circ \circ Z$ .) Цю конструкцію виведе правило (23). Зіставляючи факти  $X * \rightarrow Y$  та  $X \circ * \hat{Y} \circ \circ Z$ , доходимо безальтернативного висновку, що існує арка  $Y \hat{\rightarrow} Z$  (див. рис. 9). Можуть існувати ще одна або дві арки, але вони не змінять марковських властивостей (зайве ускладнення).

Успіх щойно описаної логіки виведення орієнтації є показовим і нетривіальним: здійснена ідентифікація конфаундованого каузального зв'язку (між  $Y$  та  $Z$ ). Жодне з відомих правил цього не робить. Таке виведення нагадує правило  $\mathcal{R}1^{(+)}$ . Можна зафіксувати останній крок продемонстрованого виведення у формі нового правила  $\mathcal{R}1^{(+e)}$ :

$$X * \rightarrow \hat{Y} \circ * Z \Rightarrow X * \rightarrow Y \hat{\rightarrow} Z. \quad (24)$$

Особливість (24) полягає в тому, що виводиться безпосередній каузальний зв'язок під прикриттям латентного конфаундера. Втім, головний внесок у ідентифікацію такого каузального зв'язку робить екстраправило (23) (або його узагальнена версія), коли виводить конструкцію  $X \circ * \hat{Y} \circ \circ Z$ , тобто з'ясовує, що залежність між  $X$  та  $Z$  стійко передається крізь стик ребер  $X * \rightarrow Y * \rightarrow Z$ . А цей крок виведення критично ґрунтується на жорстких апріорних припущеннях про відсутність певних автентичних ребер.

Запропоновані правила  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(LC)}$ ,  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(e)}$ ,  $\mathcal{R}4_{(1)}^{(ea)}$ , (22) подані у формулюваннях, призначених для простого контексту (де дискримінаційний шлях має три ребра). Це спрощення не звужує результатів. Формулювання правил можна розширити і узагальнити.

## ВИСНОВКИ

У статті запропоновано розгорнуте означення конфаундера та латентного конфаундера. Висвітлено властивості латентних конфаундерів, майже-циклів та арок у каузальних мережах. Арка відображає існування жорсткого латентного конфаундера для автентичного каузального ребра. Запропоновано модифікації правил орієнтації ребер, необхідні для коректного виведення в класах моделей з дозволенними латентними конфаундерами. Сформульовано нові правила орієнтації ребер для розширеного класу моделей з латентними конфаундерами і арками.

За відсутності апріорних обмежень каузальне відношення можна ідентифікувати трьома правилами. В правила (15) та (18) (тобто у нові версії правила  $\mathcal{R}4$ ) закладено той самий принцип ідентифікації каузального зв'язку, що і в традиційному правилі  $\mathcal{R}1$ . Фіксується, що змінна-причина є необхідним членом сепаратора

для інструментальної змінної та змінної-наслідку. Але на відміну від правила  $\mathcal{R}1$ , у правилі (15) змінна-причина в генеративній структурі безумовно незалежна від інструментальної змінної (між ними розташовано колізори), і тільки після кондіціонування відповідної змінної змінна-причина стає необхідною для сепарації інструментальної змінної та змінної-наслідку. Ідентифікацію каузального відношення екстраправилом (20) побудовано за нетрадиційним принципом. Ребро розпізнається як каузальне, оскільки тільки воно безальтернативно може забезпечити механізм (шлях) спостережуваної залежності між  $X$  та  $W$  після того, як директивно (апріорі) були заборонені автентичне ребро  $X \ast \ast W$  і арки.

Арка ідентифікується на підставі факту про стійку (що не блокується) задачу залежності через стик ребер. Такий стик є одночасно як колізори, так і неколізори. Стик ребер з такими властивостями утворюється, коли маємо конструкцію типу «вхід в арку» або конструкцію з двох сусідніх арок, односпрямовані ребра яких утворюють неколізорний стик. Локалізувати стик, який за всіх умов передає залежність, можна на підставі факту відсутності відповідних автентичних ребер (а цей факт не відображається марковськими властивостями). Показано можливість ідентифікації конфаундованого каузального відношення. Для ідентифікації конфаундованого каузального зв'язку запропоновано (як початковий варіант) правила (23), (24). Ідентифікація арок та конфаундованих каузальних зв'язків потребує жорстких апріорних припущень про відсутність автентичних ребер.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Pearl J. Causality: Models, reasoning, and inference. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. 526 p.
2. Spirtes P., Glymour C., Scheines R. Causation, prediction and search. New York: MIT Press, 2001. 543 p.
3. Verma T., Pearl J. Causal networks: Semantics and expressiveness. *Proc. of the 4th Annual Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI)*. 1988. P. 352–359. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1304.2379>.
4. Spirtes P., Meek C., Richardson T. An algorithm for causal inference in the presence of latent variables and selection bias. In: *Computation, Causation, and Discovery*. Glymour C., Cooper G. (Eds.). Menlo Park, CA: AAAI Press, 1999. P. 211–252.
5. Zhang J. On the completeness of orientation rules for causal discovery in the presence of latent confounders and selection bias. *Artificial Intelligence*. 2008. Vol. 172, Iss. 16–17. P. 1873–1896. <https://doi.org/10.1016/j.artint.2008.08.001>.
6. Colombo D., Maathuis M.H. Order-independent constraint-based causal structure learning. *J. Mach. Learn. Res.* 2014. Vol. 15. P. 3921–3962.
7. Meek C. Causal inference and causal explanation with background knowledge. *Proc. of the 11th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence*. Besnard P., Hanks S. (Eds.). San Mateo, CA: Morgan Kaufmann Publ., 1995. P. 403–410.
8. Shpitser I., Evans R.J., Richardson T.S., Robins J.M. Introduction to nested Markov models. *Behaviormetrika*. 2014. Vol. 41(1). P. 3–39.
9. Bhattacharya R., Nagarajan T., Malinsky D., Shpitser I. Differentiable causal discovery under unmeasured confounding. *Proc. of the 24th Intern. Conf. on Artificial Intelligence and Statistics*. PMLR. 2021. Vol. 130. P. 2314–2322.
10. Richardson T., Spirtes P. Ancestral graph Markov models. *The Annals of Statistics*. 2002. Vol. 30, N 4. P. 962–1030. <https://doi.org/10.1214/aos/1031689015>.

11. Balabanov O.S. Logic of minimal separation in causal networks. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2013. Vol. 49, N 2. P. 191–200. <https://doi.org/10.1007/s10559-013-9499-y>.
12. Balabanov O.S. Acceleration of inductive inference of causal diagram. (Revised January 2013). 6 p. (preprint at ResearchGate) [Electronic resource]. URL: [https://www.researchgate.net/publication/324160860\\_Acceleration\\_of\\_Inductive\\_Inference\\_of\\_Causal\\_Diagrams\\_Proc\\_of\\_the\\_4th\\_Intern\\_Workshop\\_on\\_Inductive\\_Modelling\\_IWIM'2011\\_-\\_Kyiv\\_July\\_4-11\\_2011\\_-\\_P\\_16-21\\_-\\_ISBN\\_978-966-02-6078-8\\_Revised\\_2013](https://www.researchgate.net/publication/324160860_Acceleration_of_Inductive_Inference_of_Causal_Diagrams_Proc_of_the_4th_Intern_Workshop_on_Inductive_Modelling_IWIM'2011_-_Kyiv_July_4-11_2011_-_P_16-21_-_ISBN_978-966-02-6078-8_Revised_2013).
13. Uhler C., Raskutti G., Buhlmann P., Yu B. Geometry of the faithfulness assumption in causal inference. *The Annals of Statistics*. 2013. Vol. 41, N 2. P. 436–463. <https://doi.org/10.1214/12-AOS1080>.
14. Балабанов О.С. Логіка каузального виведення з даних в умовах прихованих спільних причин. *Кібернетика та системний аналіз*. 2022. Т. 58, № 2. С. 10–28.
15. Балабанов О. С. Відтворення каузальних моделей з даних в умовах прихованих причин. Деякі проблеми неадекватності (переглянуте). 2021. 18 р. [Електронний ресурс]. <https://doi.org/0.13140/RG.2.2.25341.69600>.
16. Tian, J., Pearl J. On the testable implications of causal models with hidden variables. *Proc. 18th Conf. on UAI*. San Francisco, CA: Morgan Kaufmann Publ., 2002. P. 519–527.
17. Shpitser I., Richardson T.S., Robins J.M. Testing edges by truncations. *Proc. of the 21st Intern. Joint Conf. on Artificial Intelligence (IJCAI-09)*. Pasadena, California, 2009. Vol. 21. P. 1957–1963.
18. Robins J.M. Testing and estimation of direct effects by reparameterizing directed acyclic graphs with structural nested models. In: *Computation, Causation, and Discovery*. Glymour C., Cooper G. (Eds.). Menlo Park, CA: AAAI Press, 1999. P. 349–405.

**O.S. Balabanov**

#### **CAUSAL DISCOVERY FROM MARKOV PROPERTIES UNDER LATENT CONFOUNDERS**

**Abstract.** We address the problems of causal structure reconstruction given conditional independence facts when latent confounders are allowed. We examine the conditions that allow one to partially or fully identify authentic causal links and latent confounders. The updated implicative rules for orienting edges under confounding are suggested. As demonstrated, it is possible to construct the new rules, which can reveal confounded causal edges and bows. The rules rely on facts of the absence of certain authentic edges (such facts may be justified by non-independence constraints, like Verma constraint, or subject-based requirements).

**Keywords:** causal relation, d-separation, conditional independence, latent confounder, edge orientation, bow (arc).

*Надійшла до редакції 08.06.2023*