



Universidad Veracruzana

Centro de Investigación en Inteligencia Artificial

*Evaluación del operador de intervención en Redes
Bayesianas Causales*

Trabajo de tesis presentado por *Jenny Betsabé Vázquez Aguirre*
para obtener el grado de Maestra en Inteligencia Artificial

Agosto 2019

Dirigido por:
Dr. Nicandro Cruz Ramírez

Resumen

Realizar una estimación causal es posible a través del uso de Redes Bayesianas; para ello, una alternativa es usar un operador de intervención propuesto originalmente por Judea Pearl. Dicho operador actúa manipulando una variable que es candidata a ser causa de otra. Esta manipulación (o intervención) consiste en eliminar de la causa potencial cualquier influencia proveniente de otras variables; i.e., se eliminan todos sus padres directos en la red. Esta herramienta promete ser un método potente para la estimación de causalidad; sin embargo, hasta donde sabemos, no cuenta con una validación que permita conocer sus alcances y limitaciones. Este trabajo presenta la implementación de este operador de intervención así como su evaluación en diferentes bases de datos. Esta última pretende medir el desempeño de dicho operador en términos de la eficiencia para determinar rutas causales y su conjunto de limitaciones. Nuestros resultados nos permiten identificar una serie de mejoras a este operador para que sea usado en un esquema de estimación causal general y no únicamente en Redes Bayesianas que cumplan ciertas características.

Índice general

1. Introducción	5
2. Marco Teórico	10
2.1. Redes Bayesianas	10
2.1.1. Construcción del modelo probabilista de una RB	13
2.1.2. Inferencia Bayesiana	15
2.2. Redes Bayesianas Causales	16
2.2.1. Intervención de variables (Operador-do)	17
2.3. Ajustes al modelo de intervención	18
2.3.1. Criterio de Puerta trasera	20
2.3.2. Criterio de Puerta delantera	20
2.4. Cálculos de intervención	21
2.4.1. Reglas de inferencia	21
2.4.2. Efectos Causales	23
2.5. Antecedentes	24
2.5.1. El software TETRAD	24
2.5.2. El software BayesiaLab	27
3. Fundamentación	29
3.1. Planteamiento del problema	29
3.2. Justificación	30
3.3. Hipótesis	30
3.4. Objetivos	30
3.4.1. Objetivo general	30

3.4.2. Objetivos específicos	30
4. Materiales y métodos	32
4.1. Materiales	32
4.2. Métodos	33
4.2.1. Pre-procesamiento de los datos	33
4.2.2. Implementación del algoritmo	35
5. Metodología	39
5.1. Diseño experimental	39
5.2. Análisis estadístico	42
5.2.1. Factor de Bayes	43
6. Resultados	44
6.1. Corridas experimentales	44
6.1.1. Otros resultados	58
7. Discusión	62
8. Conclusiones y trabajo futuro	64
Bibliografía	66

Capítulo 1

Introducción

El estudio de la causalidad tiene sus orígenes hace aproximadamente 300 años con los filósofos Kant y Hume, quienes trataron de explicar cómo se adquiere conocimiento causal de manera natural. Las teorías propuestas por ambos, dieron origen a diversas investigaciones que a lo largo de los años han tratado de entender la causalidad y algunas veces replicarla, como es el caso de la Inteligencia Artificial (IA). La IA es un área interesada en el estudio de los procesos mentales, intentando crear máquinas que puedan reproducirlos; uno de esos procesos es la estimación causal [27].

En 2018 Judea Pearl en su libro “The Book of Why?” menciona la inferencia causal como nueva ciencia, argumenta que el uso y diversidad de su potencial se encuentra afectando la vida misma. Indica que una forma de lograr el entendimiento de la inferencia causal es a través de la comprensión del aprendizaje causal natural [23].

De manera intuitiva aseveramos que X es causa de Y , pero, no siempre tenemos la capacidad de identificar las relaciones correctas, en muchos de los casos esas relaciones son espurias o contienen factores de confusión que parecen imperceptibles a la observación.

Sabemos que no siempre se tiene la posibilidad de realizar experimentos aleato-

riamente controlados; en la vida cotidiana existe una infinidad de estudios observacionales en los que las unidades de estudio se recolectan, sí, bajo algún método de muestreo probabilista, pero sin la posibilidad de someterse a un control aleatorio para la aplicación de tratamientos. La mayoría de estos estudios tiene como objetivo identificar la causa de una variable sobre otra y el análisis estadístico de los datos es utilizado para encontrar esa causa -en muchas ocasiones por los mismos estadísticos-, siendo un error común tanto para la búsqueda de causalidad, como para las conclusiones que surgen a partir de esos análisis, ya que la mayoría de las veces, basta solo con una correlación para asegurar causalidad.

Pero ¿cómo se puede hacer inferencia sobre las intuiciones causales o sobre algo que no tiene manera de ser medido dado que es observado? esta es una pregunta que estadísticamente no puede responderse, por ello la interpretación causal es muy difícil de asimilar para algunos estadísticos. Entonces, ¿qué herramienta estadística usar para estimar la causalidad? la respuesta a esta pregunta está en la intervención de variables.

Desde hace miles de años el hombre ha desarrollado la capacidad de observar cómo un evento causa otro, incluso de realizar ciertas modificaciones al primero y ver cómo éste repercute en la último. Pearl sugiere que este tipo de capacidad no se comparte con el resto de las especies y atribuye su desarrollo al planteamiento de la pregunta ¿por qué? [23].

Tomar en serio la pregunta ¿por qué? es uno de los principales ingredientes del aprendizaje de la inferencia causal. Pearl plantea que el mejor camino para reproducir inferencia causal es a través de la computadora; no sin antes entender la lógica del pensamiento causal [23].

Para describir el proceso causal natural Pearl hace uso de una representación gráfica, que muestra una escalera denominada “escalera de la causalidad”, en ésta trata de explicar cómo es que se lleva a cabo el proceso causal natural y cómo podría mapearse artificialmente [23].

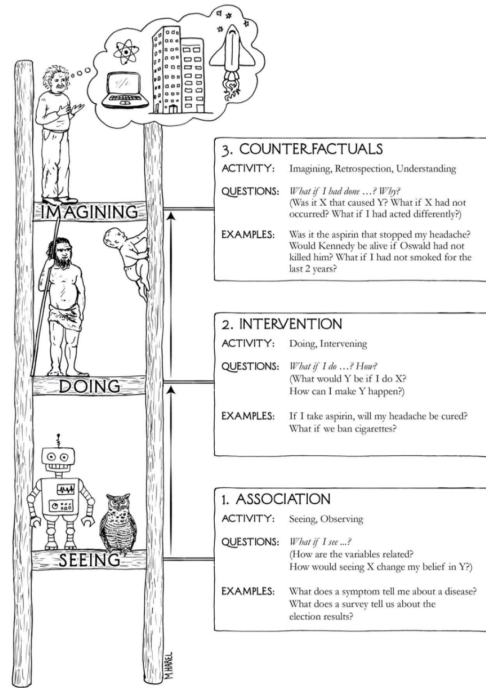


Figura 1.1: Escalera de la causalidad, propuesta por Judea Pearl en su libro “The Book of Why?” 2018 [23].

La escalera de la causalidad tiene tres niveles distintos de habilidad cognitiva. El primero es la identificación de las relaciones causales (ver u observar), implica extraer regularidades del entorno, y se comparte en muchos animales. El segundo nivel se relaciona con el hacer; capacidad que solo algunas especies pueden reproducir. Se refiere a las intervenciones y a la predicción de los efectos a partir de la intervención deliberada del entorno, también a la capacidad de elegir de las alteraciones la que produce mejores resultados o los resultados esperados. Pearl asegura que no todos los organismos capaces de realizar intervenciones pueden explicar porqué la herramienta usada para producir la intervención funciona, ni cómo es que lo hace. A esto último es a lo que hace referencia el nivel tres; a la imaginación, y se cree que este nivel es el que preparó al hombre para producir un impacto drástico de la especie humana en el planeta [23].

En 1995 Judea Pearl realizó una propuesta de investigación que se sitúa en el segundo nivel de la escalera de la causalidad. En ésta, Pearl propone una intervención a las variables que se encuentran en una RB, extrayendo, a través de un operador denominado *do* o *set*, una nueva probabilidad con la que se hará la estimación causal [17].

En este trabajo se realiza la validación del operador, a partir de un conjunto de bases de datos de las que previamente se sabe contienen relaciones causales y con las cuales se construyen las RB's. Los resultados obtenidos permitieron comprender claramente las diferencias entre realizar una observación a los datos y una intervención, también, encontrar las condiciones óptimas para la intervención, la estimación de probabilidad causal y una posible interpretación a partir de ésta.

A continuación, se realiza una breve explicación de los apartados que contiene el documento.

1. Introducción. Se realiza una presentación del trabajo, introduciendo el tema de la causalidad y el enfoque principal del trabajo realizado.
2. Marco Teórico. Presenta los fundamentos teóricos relacionados con el trabajo de investigación. Se presentan las bases y teorías relacionadas con el tema, introduciendo a la importancia de la realización.
3. Fundamentación. Se presenta el problema y se justifica su aporte e importancia a la investigación, asimismo se presentan los objetivos e hipótesis planteadas.
4. Materiales y métodos. Presenta el conjunto de unidades experimentales (bases o conjuntos de datos) y cómo fueron obtenidas, así como las herramientas utilizadas para realizar la implementación del algoritmo.
5. Metodología. Contiene el detalle del diseño experimental bajo el que se llevó a cabo la investigación.

6. Resultados. Presenta un compilado de los resultados a partir de las corridas experimentales, perfilando el documento a las conclusiones y trabajo futuro.
7. Discusión. Se presenta una interpretación general de los resultados, que perfila a dar respuesta a la hipótesis planteada.
8. Conclusiones. Describe el conjunto de ventajas y desventajas del método. Explica las implicaciones de la implementación y los posibles trabajos futuros que podrían complementar el presente, a fin de tener un modelo de aprendizaje causal completo que pueda incluir más niveles del aprendizaje causal.
9. Bibliografía. Contiene un conjunto de referencias bibliográficas que sustentan el marco teórico y la investigación.

Capítulo 2

Marco Teórico

En esta sección se dan a conocer los conceptos básicos relacionados con el tema de investigación. Se presentan los fundamentos teóricos que sustentan el trabajo perfilando la implementación y validación del método.

2.1. Redes Bayesianas

Las Redes Bayesianas (RB's) fueron desarrolladas y presentadas por Judea Pearl a principios de la década de los 80's, con la finalidad de facilitar las tareas de predicción y abducción en los sistemas inteligentes de IA [14].

Las RB's son modelos que combinan la teoría de grafos y probabilidad bayesiana, se representan por Grafos Acíclicos Dirigidos (DAG por sus siglas en inglés) que permiten conocer la estructura de las variables de manera jerárquica, así como identificar los padres e hijos en su estructura y la relación que hay entre ellos. En este tipo de modelos gráficos los nodos representan las variables en los datos, y las conexiones (arcos) representan las relaciones de dependencia entre las variables. La estructura de una red brinda información sobre la dependencia probabilista de las variables, o la independencia condicional de una variable dada otra (o conjunto de éstas) [29].

La fuerza de influencia entre las conexiones está contenida en las probabilidades

condicionales y se representan por cada nodo dado el conjunto de sus padres [18].

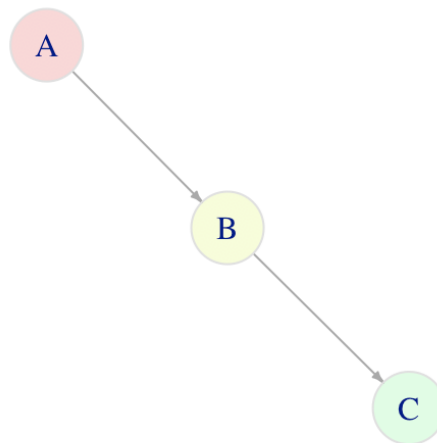


Figura 2.1: Estructura de una RB típica.

A partir de la estructura de una RB como la de la Figura 2.1 se pueden realizar consultas de asociación (inferencia bayesiana). Por ejemplo, si observamos B, ¿qué se puede esperar de A?. La respuesta a esta pregunta se resuelve con el conocimiento probabilista contenido en la red y formalmente se expresa por: $p(A|B)$. También, es posible identificar las relaciones de independencia condicional, por ejemplo, C es condicionalmente independiente de A dado B.

Para verificar la independencia condicional se usa el criterio de d-separación, éste permite determinar para cualquier par de nodos si son d-conectados (existe una ruta de conexión entre ellos) o d-separados (no existe una ruta de conexión entre ellos); cuando dos nodos son d-separados las variables que representan son independientes [22].

Antes de hacer una definición formal del criterio d-separación es indispensable identificar las siguientes posibles conexiones en una RB [29].

- Nodos en secuencia: $A \rightarrow B \rightarrow C$
- Nodos divergentes: $A \leftarrow B \rightarrow C$
- Nodos convergentes: $A \rightarrow B \leftarrow C$

Definición 2.1 (*d-separación*) [19].

Se dice que una ruta p está *d-separada* por un conjunto de nodos Z sí y solo sí:

- p contiene una conexión en secuencia o una conexión divergente, de modo que el nodo B esté en Z o,
- p contiene una conexión convergente y el nodo B no está en Z y no hay descendientes de B en Z .

Un conjunto de nodos Z se dice que *d-separa* X de Y sí y solo sí Z bloquea cada ruta de un nodo X a un nodo Y .

Si al menos una de las dos condiciones anteriores se cumple, entonces X y Y están *d-separados* por Z .

Teorema 2.1 (*Implicaciones probabilistas de la d-separación*) [19].

Si X y Y están *d-separados* por el conjunto Z en un DAG G , entonces X es condicionalmente independiente de Y dado Z ($X \perp Y|Z$) para cada distribución compatible con G .

Este teorema queda formalmente expresado de la siguiente manera:

Teorema 2.2 [19].

Para cualquier subconjunto de nodos (X, Y, Z) en un DAG G y para todas las funciones de probabilidad P , se tiene que:

- $(X \perp Y|Z)_G \Rightarrow (X \perp Y|Z)_P$ siempre que G y P sean compatibles; y
- si $(X \perp Y|Z)_P$ se mantiene en todas las funciones compatibles con G , se deduce que $(X \perp Y|Z)_G$.

2.1.1. Construcción del modelo probabilista de una RB

En términos generales, mediante las relaciones condicionales de cada nodo en la red, es posible especificar las probabilidades requeridas.

Aplicando la regla de la cadena y las independencias condicionales, se puede extraer la probabilidad conjunta a partir de las probabilidades condicionales. En general, la probabilidad conjunta se especifica por el producto de las probabilidades de cada variable dado sus padres [29]. Lo anterior queda aclarado y definido formalmente a continuación:

Definición 2.2 *Padres Markovianos* [19].

Sea $V = X_1, \dots, X_n$ un conjunto ordenado de variables y el conjunto $P(v)$ la distribución de probabilidad conjunta de esas variables. Un conjunto de variables PA_j es llamado padres Markovianos de X_j , si PA_j es un conjunto mínimo de predecesores de X_j que hace que X_j sea independiente de todos sus otros predecesores. En otras palabras, cualquier subconjunto de $\{X_1, \dots, X_{j-1}\}$ satisface:

$$P(x_j|pa_j) = P(x_j|x_1, \dots, x_n) \quad (2.1)$$

La definición 2.2 asigna en la red a cada variable X_j un conjunto de variables predecesoras (padres del nodo) PA_j suficientes para determinar su probabilidad. Por ejemplo, retomando la Figura 2.1, se tiene que:

- $P(A) = P(A)$
- $P(B) = P(B|A)$
- $P(C) = P(C|B)$

La construcción implícita que se encuentra en 2.2 define la RB como portadora de relaciones de independencia condicional, por lo que todas las distribuciones que satisfagan la ecuación 2.1 pueden descomponerse usando la regla de la cadena [19].

La regla de la cadena del cálculo de probabilidad permite descomponer P como un producto de n distribuciones de probabilidad condicional.

$$P(x_1, \dots, x_n) = \prod_j P(x_j | x_1, \dots, x_n) \quad (2.2)$$

Por lo tanto, la probabilidad conjunta de la RB puede obtenerse a través de la ecuación 2.3:

$$P(x_1, \dots, x_n) = \prod_j P(x_j | pa_j) \quad (2.3)$$

Volviendo al ejemplo de la Figura 2.1 el modelo de probabilidad que representa ese DAG, queda como la ecuación 2.4:

$$P(a, b, c) = P(a)P(b|c)P(c|b) \quad (2.4)$$

Definición 2.3 Compatibilidad de Markov [19]

Si la función de probabilidad P admite la factorización de la ecuación 2.3 a partir de un DAG G , se puede decir que G representa P , es decir:

- P y G son compatibles o,
- P es Markov relativa de G .

Teorema 2.3 Condición ordenada de Markov [19].

Una condición necesaria y suficiente para que una distribución de probabilidad P sea Markov relativa a un DAG G es que, condicional a sus padres en G , cada variable es independiente de todos sus predecesores en algunos ordenamientos de las variables que concuerdan con las flechas de G .

Teorema 2.4 Condición paternal de Markov [19].

Una condición necesaria y suficiente para que una distribución de probabilidad P sea Markov relativa a un DAG G es que, cada variable es independiente de todos sus no antecesores (en G), condicional a sus padres.

Teorema 2.5 Equivalencia observacional [19].

Dos DAG son observacionales equivalentes sí y solo sí tienen los mismos esqueletos y los mismos conjuntos de estructuras en V .

2.1.2. Inferencia Bayesiana

Los métodos bayesianos proporcionan formalismo para razonar sobre creencias parciales en condiciones de incertidumbre. En el formalismo bayesiano los valores de las creencias obedecen a los tres axiomas básicos de la teoría de probabilidad (ecuaciones 2.5, 2.6 y 2.7) [15].

$$0 \leq P(A) \leq 1 \quad (2.5)$$

$$P(\text{Evento cierto}) = 1 \quad (2.6)$$

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) \text{ si } A \text{ y } B \text{ son mutuamente excluyentes.} \quad (2.7)$$

Bajo el cumplimiento de estos axiomas se pueden realizar consultas a una RB. Las consultas probabilistas que se realizan se pueden denominar: razonamiento probabilista o propagación de probabilidades. Éstas consisten en propagar los efectos de la observación (evidencia) a través de la red, para conocer la probabilidad *a posteriori* de las variables. La observación consiste en fijar valores a ciertas variables y obtener la probabilidad de las demás variables conocidas [29].

Existen diferentes algoritmos para realizar el cálculo de las probabilidades posteriores. Algunos de estos se mencionan a continuación:

- Método de paso de mensaje [12][14].
- Método para la propagación de árboles combinados y método de acondicionamiento de conjunto de corte [10][15].
- Método de aproximación (Simulación estocástica) [15].

2.2. Redes Bayesianas Causales

Como se mencionó en la sección 2.1, las RB's contienen relaciones de dependencia condicional en sus conexiones, por esto, el uso e interpretación que se les dé, debería estar en términos de probabilidades únicamente y no de causalidad.

Una red causal puede entenderse como una RB, con la propiedad de que los padres de cada nodo son sus causas directas [2]. De acuerdo con la ecuación 2.3, se puede asumir que los padres de la variable x_j son sus causas directas y en caso de no existir padres se debe usar la probabilidad marginal $p(x_j)$ [5].

De acuerdo con Pearl en su libro "Causality" la construcción de DAG causales tiene varias ventajas. La primera es que los juicios requeridos para la construcción de los modelos son más significativos y accesibles, por lo tanto, más confiables. Otra ventaja es su capacidad para responder a cambios externos. Por ejemplo, a partir de una distribución conjunta se puede conocer qué tan probable es un evento y cómo cambia con observaciones posteriores (propagación de probabilidades). Por su parte, los modelos causales además de esta propiedad, también indican cómo cambiarían esas probabilidades al realizar intervenciones externas [19].

La construcción formal de estos modelos se basa en el supuesto de que las relaciones padre-hijo representan mecanismos autónomos, por lo que es posible cambiar esas relaciones sin cambiar o afectar las demás. La conexión entre autonomía e intervención es que, en lugar de especificar una función de probabilidad para cada una de las intervenciones posibles en la red, solamente se especifica el cambio inmediato, resultado de la intervención y en virtud de la autonomía se considera el cambio como local, por lo que éste no se extiende a otros mecanismos en la red. Una vez que se separa el mecanismo intervenido de la red, el efecto general de la intervención se puede predecir con la modificación correspondiente de la ecuación 2.3 y a partir de ello calcular la nueva función de probabilidad [19].

En el siguiente apartado se realiza una explicación formal del operador utili-

zado para realizar la intervención de variables y las modificaciones matemáticas correspondientes.

2.2.1. Intervención de variables (Operador-do)

El operador denominado $do(x)$ simula intervenciones físicas en la red, eliminando algunas funciones del modelo y reemplazándolas por constantes $X = x$, mientras se mantiene el resto del modelo sin cambios. Por ejemplo, retomando el modelo G de la Figura 2.1, para simular la intervención $do(b_0)$ ¹ que mantiene B constante (en $B = b_0$) se reemplaza b en la ecuación 2.4 por $b = b_0$ y se obtiene un nuevo modelo (ecuación 2.8) [21].

$$P(a, do(b) = b_0, c) = P(a)P(c|do(b) = b_0) \quad (2.8)$$

Debido al supuesto de autonomía, la distribución manipulada de la variable intervenida es independiente del resto de las distribuciones en la red, por lo que se puede aplicar el proceso de poda, lo que implica la eliminación de todos los arcos (padres) que recibe la variable intervenida [22].

La diferencia fundamental entre observar e intervenir se puede deducir a partir de esta última propiedad, es decir, si deseáramos observar el efecto de $B = b_0$, la probabilidad la obtendríamos a través del condicionamiento tradicional Bayesiano $P(A, C|B = b_0)$, sin embargo, una vez aplicados los supuestos de autonomía y poda, la conexión $B \rightarrow C$ debe ser eliminada, quedando la ecuación 2.8.

La capacidad de las Redes Bayesianas Causales (RBC) y su intervención requiere un conjunto más sólido de supuestos basados en conocimiento causal y que aseguren la respuesta del sistema a las intervenciones, para ello se formaliza la definición para Redes Bayesianas Causales [19] y teoría causal [18].

Definición 2.4 Redes Bayesianas Causales [19].

Sea $P(v)$ una distribución de probabilidad del conjunto de variables V , y sea $P_x(v)$ la distribución resultante de la intervención $do(X = x)$ que establece un

¹Entiéndase b_0 como un valor específico de la variable B .

conjunto de variables en la constante x . Se denota por P_* el conjunto de todas las distribuciones intervenidas $P_x(v)$, $X \subseteq V$ incluido $P(v)$ que representa la no intervención.

Un DAG es una Red Bayesiana compatible con P_* sí y solo sí satisface las siguientes condiciones para $P_x \in P_*$:

1. La distribución de probabilidad P_x es Markov relativa con el DAG G [30].
2. La probabilidad de todas las variables que forman parte de una intervención es igual a 1 para el valor que se establece en: $P_x(v_j) = 1$ para todo $V_j \in X$ siempre que v_j sea consistente con $X=x$ [30].
3. La probabilidad de todas las variables restantes que no se establecen en la intervención es igual a la probabilidad original (la variable dado sus padres). $P_x(v_j|pa_j) = P(v_j|pa_j)$ para todo $V_j \notin X$ siempre que pa_j es consistente con $X = x$ [30].

A partir de la definición 2.4 se pueden calcular las distribuciones truncadas $P_x(v)$ para cualquier intervención $do(X = x)$. Quedando formalmente como la ecuación 2.9:

$$P_x(v) = \prod_{\{j|V_j \notin X\}} P(v_j|pa_j) \quad \text{para todo } v \text{ consistente con } x. \quad (2.9)$$

2.3. Ajustes al modelo de intervención

Una vez definido el modelo de causalidad (ecuación 2.9) puede realizarse la siguiente definición para la teoría causal.

Definición 2.5 Teoría causal [18]

Una teoría causal es una 4-tupla

$$T = \langle V, U, P(u), \{f_j\} \rangle$$

donde,

- $V = \{X_1, \dots, X_n\}$ es un conjunto de variables observadas.
- $U = \{U_1, \dots, U_m\}$ es un conjunto de variables no observadas que representan distribuciones anormales o asunciones.
- $P(u)$ es una función de distribución sobre U_1, \dots, U_m , y
- $\{f_j\}$ es un conjunto de n funciones deterministas, cada una de la forma,

$$X_j = f_j(pa_j, u) \quad j = 1, \dots, n \quad (2.10)$$

donde,

pa_j es un subconjunto de V que no contiene a X_j

A partir de lo anterior, es posible interpretar la intervención de variables como una fuerza externa F_j dentro del modelo, que ocurre al alterar la función f_j , es decir, la relación entre X_j y sus padres [16].

Los cambios producidos por la alteración de f_j pueden reescribirse como:

$$X_j = f'_j(pa_j, F_j, u) \quad (2.11)$$

donde,

$f'_j(a, b, c) = f(a, c)$ cuando $b = f_j$.

La intervención externa F_j que causa alteraciones en f_j se representa gráficamente por los padres de X_j y el efecto de ésta puede calcularse con condicionamiento Bayesiano, es decir, agregando los padres de X_j apropiadamente a f_j [20].

Independiente que se decida utilizar la Teoría causal sin ajuste (2.5) o ajustada (2.11), el cálculo de probabilidades causales puede seguir obteniéndose por la factorización truncada dada por la ecuación 2.9. Asimismo, calcular la influencia de las variables intervenidas sobre sus efectos.

El problema que pretende atacar el ajuste está dado por la posible existencia

de "factores de confusión" (Z). En las siguientes secciones se presenta una solución general a este problema.

2.3.1. Criterio de Puerta trasera

Este criterio sirve para determinar si un conjunto $Z \subseteq V$ es suficiente para identificar $P(y|\hat{x})$.

Definición 2.6 (Puerta trasera) [19].

Un conjunto de variables Z satisface la puerta trasera en relación con un par ordenado (X_i, Y_i) en un DAG, sí:

1. Ningún nodo en Z es descendiente de X_i ; y
2. Z bloquea cada ruta entre X_i y Y_i que contiene un arco hacia X_i .
En otras palabras, solamente se bloquean las rutas con arcos que apuntan a X_i .

Teorema 2.6 Ajuste de la puerta trasera [19].

Si un conjunto de variables Z satisface el criterio de puerta trasera para (X, Y) , entonces el efecto causal de X y Y está dado por la ecuación:

$$P(y|\hat{x}) = \sum_z P(y|x, z)P(z) \quad (2.12)$$

2.3.2. Criterio de Puerta delantera

Este criterio es el segundo componente para identificar efectos causales.

Definición 2.7 Puerta delantera [19].

Un conjunto de variables Z satisface el criterio de la puerta delantera con relación a un par ordenado de variables (X, Y) sí:

1. Z intercepta todas las rutas de X a Y .

2. No hay un camino de puerta trasera de X a Z , y
3. todas las rutas de puerta trasera de Z a Y están bloqueadas por X .

Teorema 2.7 Ajuste de la puerta delantera [19].

Si Z satisface el criterio de la puerta delantera relativa a (X, Y) y si $P(x, z) > 0$, entonces, el efecto causal de X en Y es identificable y viene dado por la ecuación:

$$P(y|x) = \sum_z P(z|x) \sum_{x'} P(y|x', z)P(x') \quad (2.13)$$

2.4. Cálculos de intervención

En esta sección se establece el conjunto de reglas para determinar las expresiones de probabilidad que involucran intervención.

Suponga que a partir de cierta estructura G algunos nodos son observables y otros no lo son. El problema principal será encontrar la expresión causal que permita llegar a $P(y|\hat{x})$, donde X y Y denotan el conjunto de variables observadas.

Notación preliminar [17]. Sean X , Y y Z conjuntos disjuntos en un DAG G , y sea $G_{\bar{X}}$ el grafo obtenido por eliminar todos los arcos de entrada a X , asimismo, sea $G_{\underline{X}}$ el grafo obtenido por eliminar todos los arcos que emergen de los nodos en X , entonces puede representarse la eliminación de los arcos entrantes y salientes por la notación $G_{\bar{X}\underline{Z}}$ (ver Figura 2.2). Finalmente, la $P(y|\hat{x}, z) = P(y, z|\hat{x})/P(z|\hat{x})$ denota la probabilidad de $Y = y$ dado que $Z = z$ se observa y X se mantiene constante en x .

2.4.1. Reglas de inferencia

En este apartado se presentan las reglas de inferencia básicas para el cálculo *do*.

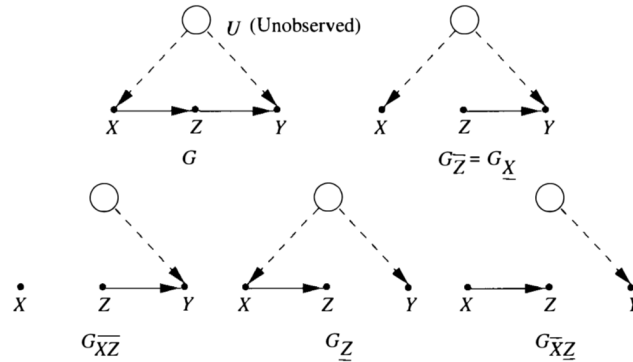


Figura 2.2: Grafos G usados para la derivación de efectos causales [19].

Teorema 2.8 Reglas del cálculo-do [17].

Sea G un DAG asociado con un modelo causal definido en la ecuación 2.5 y sea $P(\cdot)$ la distribución de probabilidad generada por ese modelo. Para cualquier subconjunto de variables X, Y, Z y W se tienen las siguientes reglas.

Regla 1 (inserción/eliminación de observaciones). Ecuación 2.14:

$$P(y|\hat{x}, z, w) = P(y|\hat{x}, w) \quad \text{si } (Y \perp\!\!\!\perp Z|X, W)_{G_{\bar{X}}} \quad (2.14)$$

Regla 2 (acción/observación intercambio). Ecuación 2.15:

$$P(y|\hat{x}, \hat{z}, w) = P(y|\hat{x}, z, w) \quad \text{si } (Y \perp\!\!\!\perp Z|X, W)_{G_{\overline{XZ}}} \quad (2.15)$$

Regla 3 (inserción/eliminación de acciones). Ecuación 2.16:

$$P(y|\hat{x}, \hat{z}, w) = P(y|\hat{x}, w) \quad \text{si } (Y \perp\!\!\!\perp Z|X, W)_{G_{\bar{X}, \overline{Z(W)}}} \quad (2.16)$$

donde $Z(W)$ es el conjunto de nodos Z que no son ancestros de ningún nodo W en G .

De estas reglas de inferencia se deduce la interpretación básica de \hat{x} como reemplazo del mecanismo causal que conecta a X con sus padres y el nuevo mecanismo $X = x$ introducido por la fuerza de la intervención. El resultado es un nuevo grafo G denominado grafo manipulado y se representa por $G_{\bar{X}}$.

La demostración para el uso de las reglas que derive todos los efectos causales a partir del grafo G y sus correspondientes subgrafos (Figura 2.2), pueden verse con detalle en [19] sección 3.4.3.

2.4.2. Efectos Causales

Siempre que la reducción de $P(y|\hat{x})$ sea factible, se dice que el efecto X sobre Y es identificable.

Definición 2.8 Identificabilidad [17].

Un efecto causal X sobre Y es identificable si la cantidad $P(y|\hat{x})$ se puede calcular de forma única a partir de cualquier distribución positiva de las variables observadas que sean compatibles con G .

Entonces, el efecto causal de una variable X sobre otra variable Y queda definido formalmente como:

Definición 2.9 Efectos causales [19].

Dados dos conjuntos disjuntos de variables, el efecto causal de X sobre Y se encuentra denotado por $P(y|\hat{x})$ o $P(y|do(x))$ que es una función de X al espacio de probabilidad de Y . Para cada valor de x en X , $P(y|\hat{x})$ es la probabilidad de $Y = y$ incluyendo la eliminación por el modelo de la ecuación 2.3 y todas las ecuaciones que corresponden a variables en X y la sustitución de $X = x$ en los modelos restantes.

Finalmente, el cálculo del efecto causal (o efecto causal promedio) que una variable tiene sobre otra, puede calcularse a partir de la ecuación 2.17.

$$EC = P(Y = y|do(\hat{x})) - P(Y = y|do(\hat{x}')) \quad (2.17)$$

donde,

$Y = y$ es un valor específico del efecto.

\hat{x} es un valor específico de la variable intervenida.

\hat{x}' es otro valor de la variable intervenida para el mismo valor de y .

Esta última ecuación es la que permite extraer la estimación real de la intervención de variables en la red, marcando la diferencia con la simple observación.

Los ECs pueden ser interpretados de la siguiente manera: Si $EC > 0$ podríamos decir que existe una causa generativa del efecto; si $EC < 0$ entonces podemos decir que la causa es preventiva; y si $EC = 0$ no existe una causa.

2.5. Antecedentes

Como se mencionó en el apartado anterior las RBC son un derivado de las RB's convencionales. A pesar de que el algoritmo propuesto por Pearl es utilizado para realizar cálculo de causalidad entre variables, ha sido poco usado y con poca aplicación. Únicamente se han encontrado dos software que tratan de estimar causalidad a partir de los datos.

2.5.1. El software TETRAD

TETRAD es un software gratuito con un módulo que tiene como objetivo estimar, probar y predecir, a través de modelos causales y estadísticos. Presenta un conjunto amplio de algoritmos que describen los modelos causales en tres etapas: un grafo, la especificación de familias de distribuciones de probabilidad con sus parámetros asociados y la especificación numérica de esos parámetros [28].

Es importante destacar que el módulo de causalidad implementado en TETRAD está enfocado en la búsqueda de relaciones causales y para lo cual hace uso de un conjunto de métodos no intuitivos que utiliza para representar las relaciones entre las variables. A continuación, se explican brevemente los diferentes tipos de arcos propuestos por TETRAD para definir las relaciones causales:

- A es una causa de B.

Puede ser una causa directa o indirecta y podría incluir otras variables medidas. Además, puede haber un factor de confusión no medido entre A y B.

Se representa por:

$$A \rightarrow B$$

- Hay un factor de confusión no medido (llámese L) entre A y B.

Puede haber variables medidas a lo largo de la ruta causal de L a A o de L a B.

Se representa por:

$$A \longleftrightarrow B$$

- A es una causa de B ($A \rightarrow B$) o hay un factor de confusión no medido entre A y B ($A \longleftrightarrow B$) o ambos.

Se representa por:

$$A \circ \rightarrow B$$

- Cumple de las siguientes afirmaciones:

1. A es una causa de B
2. B es una causa de A
3. Hay un confusor no medido entre A y B
4. Tanto a y c
5. Tanto b y c

Se representa por:

$$A \circ - \circ B$$

A pesar de contar con una amplia gama de algoritmos y métodos para estimar causalidad, ninguna de sus implementaciones contiene la intervención de variables propuesta por Pearl.

Por tratarse de una aplicación libre, existe una gran variedad de estudios para estimar causalidad que hacen uso de él, algunos de ellos se presentan a continuación:

- Combining Experiments to Discover Linear Cyclic Models with Latent Variables [4]. Presenta un algoritmo para inferir relaciones causales entre un conjunto de variables medidas sobre una base de experimentos. El algoritmo supone que las relaciones causales son lineales; proporciona estimaciones consistentes cuando la verdadera estructura causal contiene ciclos de retroalimentación y variables latentes, mientras que los experimentos pueden involucrar intervención o intervenciones 'suaves' en una o múltiples variables a la vez.
- Actual Causation: a stone soup essay [8]. Basado en la hipótesis que las discusiones actuales de los criterios para la causalidad real están mal planteados, bosquejan 6 puntos o sub hipótesis, proponiendo no una explicación correcta de la causalidad real; argumentando que los métodos estándar no conducen a tal cálculo y proponiendo un enfoque diferente.
- Six problems for causal inference from fMRI [25]. En este trabajo a través de datos de neuroimagen intentan identificar regiones cerebrales de interés (ROI) especialmente activas durante la percepción, cognición y acción, y también las relaciones causales cualitativas entre la actividad en estas regiones (conocida como conectividad efectiva). Para encontrar relaciones efectivas de conectividad, los métodos de búsqueda deben acomodar mediciones indirectas de dependencias de series de tiempo no lineales, retroalimentación, múltiples sujetos -posiblemente variando en regiones de interés identificadas-, y variaciones desconocidas posibles dependientes de la ubicación en demoras de respuesta. El modelado realizado en este trabajo, hace referencia a una representación abstracta del cerebro usando grafos acíclicos dirigidos, donde los nodos representan regiones del cerebro y los ejes la influencia causal directa de una región cerebral en otra. Esta representación gráfica intenta capturar la composición cerebral y la

estructura causal del cerebro.

2.5.2. El software BayesiaLab

BayesiaLab es un software francés no libre que tuvo su lanzamiento en el año 2002, con el principal objetivo de trabajar de manera iterativa con RB's. Este software permite reflejar un entorno de "laboratorio" para resolver algunas preguntas de investigación, como las que están relacionadas con la causalidad [2].

El software cuenta con una implementación para la estimación causal a través del operador de intervención de variables en Redes Bayesianas propuesto por Judea Pearl. A través de una interfaz gráfica permite al usuario realizar intervención de variables y observar el efecto causal. En su libro "Bayesian networks and BayesiaLab: A practical introduction for researchers" los autores de BayesiaLab realizan una introducción de todos los métodos y algoritmos implementados en su software para la construcción de RB's y para el conjunto de análisis que se pueden realizar en él, incluyendo el cálculo de efectos causales.

Es importante mencionar que si bien, BayesiaLab incluye un conjunto amplio de algoritmos para la construcción de RB's, para la estimación causal al igual que Pearl recomienda que la validación de las relaciones causales sea realizada por expertos. Incluso propone la construcción de las redes con algún algoritmo tradicional de la IA y previo a la intervención de variables se realice la validación de la red por los expertos que proporcionaron los datos. En esta misma edición los autores del libro pretenden mostrar las limitaciones y condiciones bajo las que se debe realizar la estimación causal con el operador de intervención de variables, presentando un ejemplo "de juguete" (denominado de esta manera por ellos) que permite realizar una estimación causal de manera rápida y sin complicaciones para la selección de los nodos a intervenir.

Finalmente, otra revisión de trabajos encontrados y que pueden guardar cierta relación con el objeto de estudio de este trabajo, se presentan a continuación:

- Statistical Causality Analysis of INFOSEC Alert Data [24]: Se estudia el pro-

blema de la correlación de alertas de seguridad con un énfasis en el análisis de escenarios de ataque. Utilizando técnicas de agrupación para procesar datos de alerta de bajo nivel en alertas agregadas de alto nivel, y se realizan análisis causales basados en pruebas estadísticas para descubrir nuevas relaciones entre los ataques. El enfoque de causalidad estadística que presentan complementa otros métodos que usan conocimientos previos codificados para la coincidencia de patrones.

- Using Bayesian networks to analyze expression data [7]. Propone un nuevo marco para las interacciones entre genes basados en mediciones de expresiones múltiples. Se basa en el uso de Redes Bayesianas para representar dependencias estadísticas, mostrando como éstas pueden describir interacciones entre genes; después se presenta un algoritmo capaz de aprender las redes y finalmente un método estadístico para validar la confianza de las características.
- Advances to Bayesian network inference for generating causal networks from observational biological data [31]. Se utiliza un enfoque de simulación para hacer avances en su algoritmo de inferencia de Red Bayesiana Dinámica (DBN), especialmente en el contexto de cantidades limitadas de datos biológicos. Se prueba una nueva puntuación de influencia para los DBN que intenta estimar tanto el signo (activación o represión) como la magnitud relativa de las interacciones entre las variables. Los avances permitieron que los algoritmos de inferencia DBN sean más efectivos en la recuperación de redes biológicas a partir de datos recolectados experimentalmente.

Capítulo 3

Fundamentación

3.1. Planteamiento del problema

La intervención de variables en Redes Bayesianas a través del operador-do promete estimar causalidad. La teoría relacionada con estas intervenciones asegura encontrar la fuerza bajo la que se da la causalidad a partir de las relaciones causales contenidas en la red.

Actualmente, no existe un estudio que evalúe el operador de intervención. Las investigaciones que hacen uso de éste no presentan la implementación del modelo, impidiendo validar su eficiencia para estimar causalidad cuando ésta realmente existe en las relaciones contenidas en la red. Las implementaciones del modelo que se han presentado por otros investigadores, realizan únicamente pruebas de escritorio, es decir, no presentan una implementación computacional que permita ver su rendimiento. Además, las pruebas presentadas incluyen máximo 5 variables, por lo que no permiten observar cómo son aplicadas las reglas de inferencia del operador a través de la Red Bayesiana cuando busca la Ruta Causal. El único sistema que presenta una implementación completa, explica el método a partir de una RB de juguete y no contiene en su documentación el detalle sugerido por el creador del método para la búsqueda y cálculo de las estimaciones causales.

3.2. Justificación

Si bien Pearl indica que la intervención de variables se encuentra en el segundo peldaño del conocimiento causal y para hacer uso del método adecuadamente es necesario contar con el apoyo del experto que valide las relaciones causales. Éste no presenta una validación del resultado de la intervención que permita identificar su efectividad. Por ello, tener certeza de su eficiencia al estimar causalidad, puede abrir la puerta para la implementación segura de un modelo que pueda estimar o predecir causalidad de manera similar a la que se hace naturalmente. Además, de encontrar que el modelo es adecuado, podría proponerse su complementación con el aprendizaje de las relaciones causales, a fin de tener un método que aprenda causalidad y pueda dotar entes artificiales de ese conocimiento, siendo así, un gran aporte para la investigación y la IA.

3.3. Hipótesis

La intervención de variables en Redes Bayesianas a través del operador-do permite determinar si una variable es causa potencial de su efecto.

3.4. Objetivos

3.4.1. Objetivo general

Validar la precisión del operador-do para estimar causalidad a partir de la intervención de variables en Redes Bayesianas.

3.4.2. Objetivos específicos

- Validar con los expertos las Redes Bayesianas obtenidas con los algoritmos tradicionales de IA, para determinar la congruencia de las relaciones causales.

- Extraer las rutas causales de cada RB y calcular las probabilidades causales a partir de ellas.
- Comparar las probabilidades no causales (observacionales) con las nuevas probabilidades (causales) para determinar la posible existencia de causas potenciales a partir de la intervención.
- Identificar los casos en los que la intervención de variables detecta correctamente causalidad.
- Proponer mejoras al método para que el aprendizaje causal se realice lo más parecido al que se realiza de manera natural.

Capítulo 4

Materiales y métodos

Esta sección se describe el diseño estadístico bajo el que se realizó la investigación. Para hacerlo más claro se dividió en dos etapas; la primera hace referencia a la recolección de las unidades de estudio; la segunda, al diseño experimental, donde se especifica el planteamiento detallado bajo el cual se realizó el experimento.

4.1. Materiales

La estrategia de muestreo bajo la que se recolectaron las unidades de estudio se denomina por conveniencia, y el tipo de muestreo es no probabilista. La selección de las unidades experimentales se conformó por un conjunto de bases de datos "causales", que por conocimiento experto se sabe contienen relaciones causales entre algunas de las variables. La validación de las relaciones causales en las RB's estuvo a cargo de los expertos que proporcionaron la información y/o literatura donde se explicaba la existencia de éstas.

Para fines de la investigación no se incluyó el análisis arbitrario de datos, ya que a sugerencia del autor del método [23] es indispensable la validación de las relaciones causales contenidas en las RB's; lo anterior, debido a que las técnicas tradicionales de IA utilizadas para su construcción, no contienen aprendizaje causal.

El colectivo de estudio se conformó por un total de 8 bases que se describen en la Tabla 4.1.

No.	Base	Variables	Casos	Variables a intervenir	Efectos
1	Integridad ecológica	23	290,687	6	4
2	Integridad ecológica-municipios	22	2,457	6	4
3	Cáncer de mama-prospectiva	12	322	3	1
4	Cáncer de mama-retrospectiva	12	692	3	1
5	Niveles de expresión genética	12	31	3	1
6	Búsqueda de solución óptima	6	567	2	1
7	SEWELL & SHAH	5	101318	1	1
8	Datos sintéticos BayesiaLab	3	1000	1	1

Tabla 4.1: Bases de datos utilizadas para generar Redes Bayesianas Causales.

Debe considerarse cada variable a intervenir como una unidad experimental, por lo que la muestra total fue de 61 unidades y, cada corrida experimental se realiza fijando un valor de la variable intervenida (ver Tabla 4.1).

4.2. Métodos

En este apartado se presentan los paquetes y librerías que se utilizaron para llevar a cabo el experimento.

4.2.1. Pre-procesamiento de los datos

La estrategia de pre-procesamiento consistió en la discretización de las variables de tipo cuantitativo; para ello, se hizo uso del software Weka versión 3.8.2. Éste es un software gratuito implementado en Java y presenta al usuario una amplia gama de algoritmos para pre-procesamiento, clasificación, agrupación, asociación y visualización de datos. Las herramientas que se usaron para el pre-procesamiento se describen a continuación.

4.2.1.1. Discretize

Algoritmo de discretización basado en Minimum Description Length (MDL), para convertir un conjunto de datos cuantitativos en nominales.

- Discretize supervisado: Toma en cuenta el número de atributos de la clase y su distribución sobre el conjunto de datos. Para determinar el tamaño óptimo de las categorías hace uso de la ecuación 4.1 [6]:

$$Gain(A, T; S) > \frac{\log_2(N - 1)}{N} + \frac{\Delta(A, T; S)}{N} \quad (4.1)$$

donde,

A atributos de tipo cuantitativo.

T punto de corte.

S sub-conjunto de ejemplos para la partición.

N número de ejemplos.

- Discretize no supervisado: Toma en cuenta el número de categorías especificadas por el usuario para llevar a cabo la discretización.

4.2.1.2. CAIM

Discretizador para análisis supervisado; diseñado para maximizar la interdependencia de los atributos de clase y generar un número mínimo de intervalos discretos. No requiere la definición del número de categorías [13].

Algoritmo CAIM. (Pseudocódigo)

Entrada. M conjunto de datos, C clases y F_i atributos continuos.

Para cada F_i realizar.

Paso 1.

- Encontrar en valor mínimo (d_0) y el valor máximo (d_n).
- Formar un conjunto de todos los valores distintos de F_i , en orden ascendente.

- Crear una variable B que contenga: el mínimo (d_0), el máximo (d_n) y todos los valores intermedios sin repetir.
- Crear una variable $D : [d_0, d_n]$ para contener el esquema de discretización.
- Establecer la variable $GlobalCaim = 0$.

Paso 2.

- Iniciar $K = 1$.
- Provisionalmente agregar un límite de B que no se encuentren ya en D y calcular su correspondiente valor CAIM.
- Aceptar el límite que posea el valor de CAIM más alto.
- Si ($CAIM > GlobalCAIM$ o $K < C$) actualiza D con el límite aceptado en el paso anterior y establece $GlobalCAIM = CAIM$, sino terminar el proceso.
- Establecer $K = K + 1$.

Salida. Variable D con los valores discretizados.

La ecuación 4.2 muestra el cálculo del valor de CAIM.

$$CAIM(C, D|F) = \frac{\sum_{r=1}^n \frac{max_r^2}{M_{+r}}}{n} \quad (4.2)$$

4.2.2. Implementación del algoritmo

La implementación detallada del algoritmo propuesto en este trabajo de tesis, se presenta en el diseño experimental. Se llevó a cabo en el lenguaje de programación R, haciendo uso de las librerías y funciones descritas en las tablas 4.2 y 4.3.

Librerías	Funciones	Uso
bnlearn	hc	Crea la estructura de la RB utilizando Hill Climbing.
	bn.fit	Ajusta los parámetros de la RB dada la estructura.
	modelstring	Construye el modelo de la RB (expresión de probabilidad conjunta).
igraph	plot	Genera la RB gráfica.
	graph.data.frame	Construye un grafo a partir de un listado de nodos y relaciones.
causaleffect	arcs	Extrae listado de las relaciones causales de la RB.
	causal.effect	Calcula la expresión de probabilidad causal vía reglas de inferencia causal.
gRain	querygrain	Calcula vía propagación, la probabilidad de una variable dada otra.

Tabla 4.2: Librerías y funciones R.

Funciones	Parámetros	Uso
hc	score	Indica la métrica para la construcción de la RB (BIC o K2).
	whitelist	Listado de relaciones permitidas en la RB.
	blacklist	Listado de relaciones no permitidas en la RB.
bn.fit	method	Método para la estimación de las tablas de probabilidad (mle).
querygrain	type	Indica el tipo de probabilidad que se desea consultar.

Tabla 4.3: Funciones y parámetros R.

En las siguientes secciones se presentan los algoritmos, métodos y métricas utilizados en las funciones y parámetros descritos en las tablas 4.2 y 4.3.

4.2.2.1. Algoritmo Hill-Climbing

Es un algoritmo de búsqueda que intenta encontrar el valor óptimo de una función, para lo que realiza una evaluación de todos los vecinos de un estado actual y toma aquel con mejor puntuación, continuando con la búsqueda de soluciones con mejor puntuación [26].

Hill-Climbing. (Pseudocódigo)

Entrada. Función a optimizar $f(x)$ y valor inicial x_i .

- Seleccionar un valor vecino x_j del espacio de búsqueda y evaluarlo $f(x)$.
- Si el punto evaluado x_j es mejor que el punto inicial x_i , se sustituye por el original, sino, se selecciona otro vecino del espacio de búsqueda y se evalúa.
- Repetir el proceso hasta que ya no haya mejorías en $f(x)$ o hasta que se alcance un número predefinido de iteraciones.

Salida. $f(x)$ optimizada.

4.2.2.2. Métrica BIC

El Criterio de Información Bayesiano (BIC) es una métrica para la selección de modelos entre un conjunto finito de estos. Se basa, en parte, en la función de probabilidad. Cuando se ajustan modelos, es posible aumentar la probabilidad agregando parámetros, pero hacerlo puede resultar en un sobreajuste. El BIC resuelve este problema introduciendo un término de penalización para el número de parámetros en el modelo.

Algunas características de la métrica BIC son:

- Puede medir la eficiencia del modelo parametrizado en términos de predicción.
- Penaliza la complejidad del modelo, en términos del número de parámetros.
- Es aproximadamente igual al MDL pero con signo negativo.

La ecuación 4.3 muestra el cálculo del valor BIC.

$$BIC(M|D) = -2\log p(D|M, \hat{\theta}) + K_M \log N \quad (4.3)$$

donde,

M es el modelo.

D los datos.

$\hat{\theta}$ número de parámetros a ser estimados.

K_M es la dimensionalidad θ para el modelo M .

4.2.2.3. Métrica K2

El algoritmo K2 se derivó como resultado de un enfoque bayesiano para aprender una RB a partir de los datos. Se obtiene al asumir distribuciones a priori uniformes en los valores de un atributo, para cada instancia de sus padres [1].

La ecuación 4.4 muestra la estimación de $K2$.

$$K2(x_i|pa_i) = \prod_{j=1}^{q_i} \frac{(r_i - 1)!}{N_{ij} + r_i - 1} \frac{k = 1}{r_i} N_{ijk!} \quad (4.4)$$

donde,

Cada variable aleatoria x_i puede tomar r_i posibles valores.

pa_i son los padres de x_i .

N_{ijk} número de casos en la base para el que x_i está en su k -ésimo valor y pa_i en su j -ésima instancia.

4.2.2.4. Estimador de máxima verosimilitud - MLE

Es un método general muy potente para hallar estimadores puntuales. El estimador puntual de máxima verosimilitud se define como el valor de α que hace máxima la función de verosimilitud L [9].

Sea $f(x, \alpha)$ la función de probabilidad de una variable aleatoria X , y sea X la distribución de probabilidad de la población. La distribución de probabilidad conjunta de una muestra de tamaño n de la población, se denota por la ecuación 4.5.

$$L(X_1, X_2, \dots, X_n; \alpha) = f(X_1, X_2, \dots, X_n; \alpha) = f(X_1, \alpha)f(X_2, \alpha)\dots f(X_n, \alpha) \quad (4.5)$$

Donde cada X_i es independiente del resto y representa cada elemento de la muestra.

Capítulo 5

Metodología

En este apartado se presenta la metodología bajo la que se llevó a cabo el proyecto de investigación, iniciando por la descripción detallada para la selección de la muestra, los algoritmos, funciones, librerías, el planteamiento del diseño experimental y la propuesta de análisis estadístico de los datos.

5.1. Diseño experimental

Se diseñó un solo tratamiento para el experimento y se aplicó a todas las unidades experimentales. El tratamiento cuenta con un solo nivel que consiste en la intervención a una variable en la red, fijando para cada corrida un valor específico ($do(x)$) de la variable intervenida.

Cada corrida experimental se llevó a cabo en tres etapas. La primera consistió en la construcción de la RB, la segunda en la búsqueda de la posible ruta causal y la tercera en la estimación de la probabilidad causal. A continuación, se describe el diseño del algoritmo y las etapas en las que se corrió el experimento ¹.

Fase 1. (Generación de Redes Bayesianas).

¹Totas las librerías mencioandas en esta sección se describen en la Tabla 4.2.

El modelo de intervención de variables que se implementó, es un método diseñado únicamente para variables discretas. En caso de contar con variables de tipo cuantitativo, se requiere realizar un pre-proceso de discretización (4.2.1).

- La entrada del algoritmo es un conjunto de datos discretos separados por comas en formato *CSV*.
- La construcción de la RB se realiza con la librería *hc*, indicando: el conjunto de datos, la métrica y las restricciones (estas últimas son opcionales para generar la RB).

La generación de las tablas de probabilidad condicional, el modelo y la impresión de la red, se realiza con las siguientes librerías: *bn.fit*, *modelstring* y *plot*.

- Una vez obtenida la RB y previo a la intervención, se realiza la validación de las relaciones causales con el experto.

En caso de que las relaciones en la red no reflejen una coincidencia causal de acuerdo con el conocimiento del experto, se pueden ajustar los parámetros (Tabla 4.3), ya sea la métrica con la que se construye la RB o bien, indicar las relaciones causales a partir de una lista de restricciones (*blacklist* y *whitelist*).

- La salida de esta fase es la RB validada.

Fase 2. (Búsqueda de Rutas Causales).

- La entrada de esta parte del algoritmo es la RB generada en la Fase 1.
- La función *arcs* crea el listado de relaciones (arcos) en la RB, con *graph.data.frame* se le da formato al listado para usarlo como fórmula a la siguiente entrada.
- La Ruta Causal se extrae con la función *causal.effect*, indicando la variable a intervenir (causa), la variable efecto ² y el conjunto de las relaciones en

²La causa y el efecto son variables declaradas en el algoritmo.

la RB (extraídos en el punto anterior).³

- En caso de existir Ruta Causal (RC), ésta se presenta de acuerdo a la ecuación 5.1:

$$"sum_{\{x_i, x_j\}} P(y|x_k, x_i, x_j) P(x_j|x_k) P(x_i|x_k)" \quad (5.1)$$

Donde x_i, x_j, x_k denotan variables de la RBC, que no son el efecto; el efecto lo representa la variable y .

- Si se desea visualizar el DAG G mutilado se usa la función *plot*, eliminando todos los arcos que llegan a la variable intervenida y coloreando los nodos que se encuentran en la expresión 5.1.

A partir del grafo es posible observar los nodos que se encuentran involucrados en la RC, además hace visible el cumplimiento de autonomía de los mecanismos, mencionado en la sección 2.2.⁴

- La RC 5.1 es la salida de esta fase⁵.

Fase 3. (Cálculo de las probabilidades causales).

- La entrada para esta parte del algoritmo es la RC obtenida en la Fase 2 (ecuación 5.1) y el valor que se va a intervenir $do(X = x)$ ⁶.
- Para calcular las tablas de probabilidad causal, se descompone la expresión causal (ecuación 5.1). Separando las probabilidades condicionales y la suma sobre las que correrá el cálculo.
- Calcular -a partir de los datos- las tablas de probabilidad condicional para cada elemento de la expresión causal (ecuación 5.1).

³La búsqueda de la Ruta Causal corresponde a la definición descrita en la sección 2.4.1

⁴En algunos casos aparecen nodos desconectados, esto se debe al ajuste del modelo (sección 2.3). Los nodos desconectados son los padres de la variable intervenida, definida en la ecuación F_i (2.11) como la fuerza de la intervención.

⁵En esta fase del algoritmo no se hace uso de los datos con los que se generó la red.

⁶El valor $do(X = x)$ es un valor específico de la variable declarada para intervenir.

- Generar tablas intervenidas. Eliminar de las tablas de probabilidad -donde aparece la variable intervenida- los renglones diferentes al valor de intervención $do(X = x)$.
- Realizar la normalización de cada tabla intervenida.
- Con las tablas normalizadas y la suma representada en la RC se calculan las probabilidades causales.

Éstas se obtienen para todos los valores del efecto y la suma debe ser igual a 1.

- A partir de este punto se realiza el cálculo de los efectos causales y el Factor de Bayes.

El cálculo de los efectos se realiza de acuerdo con la ecuación 2.17.

El Factor de Bayes se calculó tomando como Modelo 1 el valor izquierdo del efecto causal y Modelo 2 el valor derecho.

Con la función *querygrain* se extrae, vía propagación, la probabilidad de observación para $P(\text{efecto}|\text{causa} = x)$ fijando a la causa el valor que se dio para intervenir la variable.

5.2. Análisis estadístico

Con la finalidad de realizar un análisis adecuado que permita obtener conclusiones válidas, es necesario describir el análisis de datos.

Se realizaron gráficos univariados para explorar el comportamiento de los datos, basados en gráficos de barras para las variables cualitativas, que permitieron visualizar las diferencias entre las probabilidades observacionales y causales.

El análisis para la comparación de las probabilidades causales se llevó a cabo

con el cálculo del Factor de Bayes y los Efectos Causales. Estos últimos fueron definidos en la sección 2.9 y el Factor de Bayes se describe a continuación.

5.2.1. Factor de Bayes

El Factor de Bayes (FB) es la relación que existe entre la probabilidad de una hipótesis y otra. Puede ser interpretado como una medida de fuerza a favor de una hipótesis (modelo) sobre dos hipótesis que están en competencia, y está denotado por la ecuación 5.2 [11].

$$FB = \frac{P(D|H_1)}{P(D|H_0)} \quad (5.2)$$

El FB puede tomar cualquier valor positivo y una forma de interpretarse está dada por lo indicado en la Tabla 5.1 [11]:

Factor de Bayes	Interpretación
>100	Evidencia extrema para H1
30 – 100	Evidencia muy fuerte para H1
10 – 30	Evidencia fuerte para H1
3 – 10	Evidencia moderada para H1
1 – 3	Evidencia anecdótica para H1
1	Sin evidencia
1- 0.33	Evidencia anecdótica para H0
0.33 – 0.1	Evidencia moderada para H0
0.1 – 0.03	Evidencia fuerte para H0
0.03 – 0.01	Evidencia muy fuerte para H0
<0.01	Evidencia extrema para H0

Tabla 5.1: Valores de corte para interpretación del FB.

Capítulo 6

Resultados

6.1. Corridas experimentales

En esta sección se presentan los resultados de las intervenciones realizadas a las variables propuestas por los expertos.

Base Integridad ecológica

Para realizar el análisis de esta base de datos primero se discretizaron las variables cuantitativas. A solicitud del experto se realizaron 5 categorías por variable; para la construcción de la RB se utilizó Hill-Climbing y BIC, la RB obtenida se muestra en la Figura 6.1. Las variables propuestas por el experto para intervenir son:

- landtrans
- hactapex
- hsavoid
- roadavoid
- highavoid
- henvapex

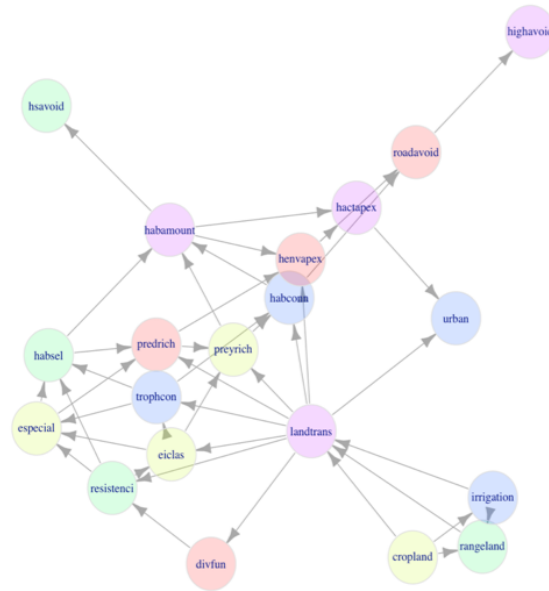


Figura 6.1: RB de la base Integridad Ecológica.

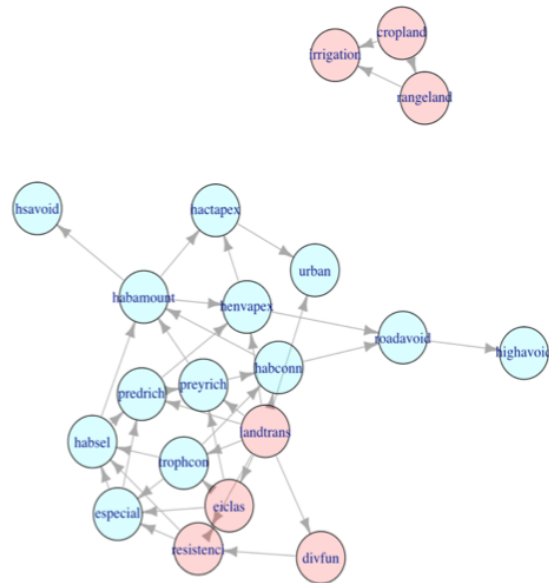


Figura 6.2: RB de la base Integridad Ecológica interviniendo la variable landtrans. Los nodos en rosa muestran la RC

Los resultados que se presentan a continuación corresponden a la intervención de la variable *landtrans* y los valores que puede tomar ésta son los siguientes:

- $(-inf - 0,2)$
- $(0,2 - 0,4)$
- $(0,4 - 0,6)$
- $(0,6 - 0,8)$
- $(0,8 - inf)$

En la Figura 6.2 se presenta una RBC intervenida para la variable “*landtrans*” y el efecto “*intecol*”, donde los nodos en color rosa representan la RC. A partir de esta red, es posible comprobar el supuesto de autonomía, ya que al realizar la mutilación de la RB y buscar a través de los criterios de inferencia, el modelo asegura contener únicamente los nodos involucrados, sin afectar el resto de las conexiones. Otra característica a resaltar de esta RBC son los 3 nodos que se encuentran desconectados; hay que recordar que esto se debe al ajuste del modelo presentado en la sección 2.3.

La nueva expresión de probabilidad obtenida a partir de la RBC de la Figura 6.1 es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 & “\sum_{\{divfun, resistenci\}} P(eiclas | cropland, rangeland, irrigation, landtrans, \\
 & divfun, resistenci) P(resistenci | cropland, rangeland, irrigation, landtrans, \\
 & divfun) P(divfun | cropland, rangeland, irrigation, landtrans)” \\
 & \hspace{15em} (6.1)
 \end{aligned}$$

A partir de la expresión (6.1) se extrajeron las probabilidades causales, fijando los valores para $do(landtrans)$.

La Tabla 6.1 presenta las probabilidades antes y después de la intervención para un valor $do(landtrans = (-inf - 0,2))$, donde se puede apreciar una igualdad al observar e intervenir la variable, lo que puede dar indicios de que el valor intervenido no es una causa potencial de la variable *intecol*. Se intervinieron el resto de valores que toma la variable *landtrans*. Los resultados se muestran en las tablas 6.2, 6.3, 6.4 y 6.5.

eiclas	Probabilidad RB	Probabilidad RC
high	0.49	0.49
low	0.06	0.06
medium	0.18	0.18
transformed	0.27	0.27

Tabla 6.1: Probabilidades observadas y causales para la variable causa $landtrans = (-inf - 0,2)$ y el efecto eiclas.

eiclas	Probabilidad RB	Probabilidad RC
high	0.04	0.02
low	0.10	0.06
medium	0.07	0.03
transformed	0.79	0.89

Tabla 6.2: Probabilidades observadas y causales para la variable causa $landtrans = (0,2 - 0,4)$ y el efecto eiclas.

eiclas	Probabilidad RB	Probabilidad RC
high	0.01	0.00
low	0.06	0.02
medium	0.02	0.00
transformed	0.91	0.98

Tabla 6.3: Probabilidades observadas y causales para la variable causa $landtrans = (0,4 - 0,6)$ y el efecto eiclas.

eiclas	Probabilidad RB	Probabilidad RC
high	0.01	0.00
low	0.02	0.01
medium	0.01	0.00
transformed	0.96	0.99

Tabla 6.4: Probabilidades observadas y causales para la variable causa $landtrans = (0,6 - 0,8)$ y el efecto eiclas.

eiclas	Probabilidad RB	Probabilidad RC
high	0.00	0.00
low	0.00	0.00
medium	0.01	0.01
transformed	0.99	0.99

Tabla 6.5: Probabilidades observadas y causales para la variable causa *landtrans* = (0,8 – inf) y el efecto eiclas.

En la Figura 6.3 se muestran las diferencias entre la probabilidad observada y la probabilidad causal, como se puede apreciar en ella, la variable *landtrans* produce cambios en la variable *inecol* únicamente cuando toma valores entre 0,2 y 0,8, siendo más fuertes en el rango 0,6 – 0,8.

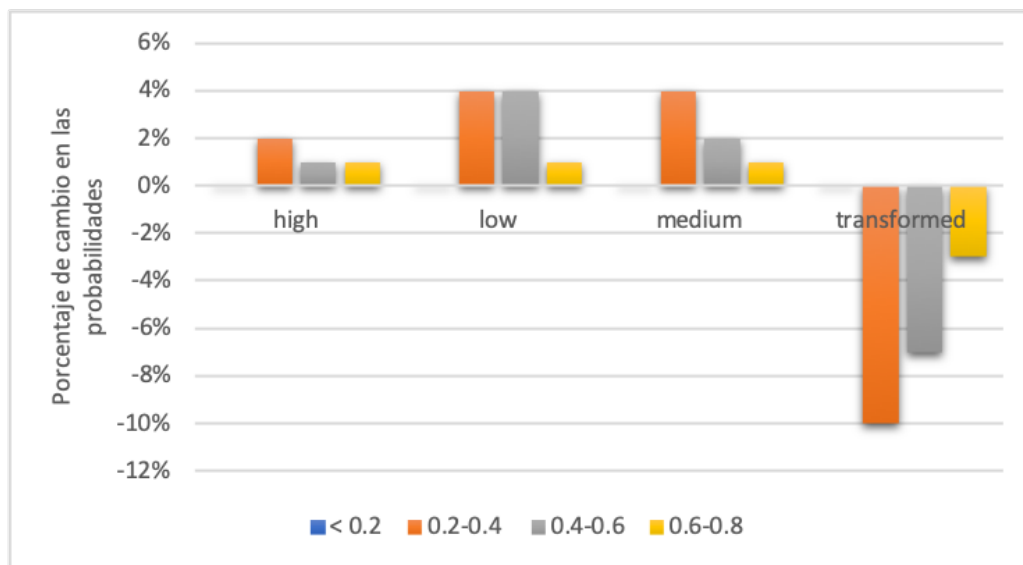


Figura 6.3: Distribución de valores donde la variable *landtrans* causó cambios al intervenir *inecol*.

El Factor de Bayes y los Efectos Causales asociados a estas intervenciones se muestran a continuación (tablas 6.6, 6.7, 6.8 y 6.9).

eiclas = high	H1	H0	FB		EC	
do(landtrans)	(-inf-0.2]	(0.2-0.4]	25	Evidencia fuerte para H_1	0.47	Causa Generativa - Apoya H_1
	(0.4-0.6]	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.49	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.6-0.8]	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.49	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.49	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.4-0.6]	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.02	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.6-0.8]	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.02	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.02	Causa Preventiva - Apoya H_0

Tabla 6.6: FB y EC para los valores de *landtrans* cuando el efecto es igual a *high*.

eiclas = low	H1	H0	FB		EC	
do(landtrans)	(-inf-0.2]	(0.2-0.4]	1	Sin evidencias	0	No es causa
	(-inf-0.2]	(0.4-0.6]	3	Evidencia anecdótica para H_1	0.04	Causa Generativa - Apoya H_1
	(-inf-0.2]	(0.6-0.8]	6	Evidencia moderada para H_1	0.05	Causa Generativa - Apoya H_1
	(0.8-inf)	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.06	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.2-0.4]	(0.4-0.6]	3	Evidencia anecdótica para H_1	0.04	Causa Generativa - Apoya H_1
	(0.2-0.4]	(0.6-0.8]	6	Evidencia moderada para H_1	0.05	Causa Generativa - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.06	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.4-0.6]	(0.6-0.8]	2	Evidencia anecdótica para H_1	0.01	Causa Generativa - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(0.4-0.6]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.02	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(0.6-0.8]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.01	Causa Preventiva - Apoya H_0

Tabla 6.7: FB y EC para los valores de *landtrans* cuando el efecto es igual a *low*.

eiclas = medium	H1	H0	FB		EC	
do(landtrans)	(-inf-0.2]	(0.2-0.4]	6	Evidencia moderada para H_1	0.15	Causa Generativa - Apoya H_1
	(0.4-0.6]	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.18	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.6-0.8]	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.18	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(-inf-0.2]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.18	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.4-0.6]	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.03	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.6-0.8]	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.03	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.8-inf)	(0.2-0.4]	0	Evidencia extrema para H_0	-0.03	Causa Preventiva - Apoya H_0

Tabla 6.8: FB y EC Causales para los valores de *landtrans* cuando el efecto es igual a *medium*.

eiclas = transformed	H1	H0	FB		EC	
do(landtrans)	(-inf-0.2]	(0.2-0.4]	0.30	Evidencia anecdótica para H_0	-0.62	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(-inf-0.2]	(0.4-0.6]	0.27	Evidencia anecdótica para H_0	-0.71	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(-inf-0.2]	(0.6-0.8]	0.27	Evidencia anecdótica para H_0	-0.72	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(-inf-0.2]	(0.8-inf)	0.27	Evidencia anecdótica para H_0	-0.72	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.2-0.4]	(0.4-0.6]	0.90	Evidencia anecdótica para H_0	-0.09	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.2-0.4]	(0.6-0.8]	0.90	Evidencia anecdótica para H_0	-0.09	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.2-0.4]	(0.8-inf)	0.90	Evidencia anecdótica para H_0	-0.10	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.4-0.6]	(0.6-0.8]	0.98	Evidencia anecdótica para H_0	-0.01	Causa Preventiva - Apoya H_0
	(0.4-0.6]	(0.8-inf)	0.98	Evidencia anecdótica para H_0	-0.01	Causa Preventiva - Apoya H_0
		(0.6-0.8]	(0.8-inf)	1	Sin evidencia	0

Tabla 6.9: FB y EC para los valores de *landtrans* cuando el efecto es igual a *transformed*.

A partir de las diferencias entre las probabilidades observadas y causales, así como los resultados del FB y los EC, es posible confirmar que el efecto de la variable *lantrans* sobre *eiclas=transformed* se fortalece cuando ésta toma valores entre 0.2 y 0.8.

Como se mencionó anteriormente, cada intervención de una variable fijando un valor específico de ella se considera una corrida experimental. Para el caso de la base integridad ecológica se realizó una corrida para cada variable sugerida por el experto -mencionadas al inicio de esta sección- como posible causa, encontrando únicamente RC para *landtrans*, que es para la que se presentan todos los resultados. De igual forma se realizaron las corridas para las otras variables sugeridas como efectos (*ai1class*, *ai2class* y *ai3class*), las cuales dieron resultados muy parecidos al que se presenta en esta sección.

Cáncer de mama

La base de datos cáncer de mama únicamente necesitó realizar la discretización de la variable edad. El algoritmo de búsqueda y medición utilizado para crear la RB es el mismo que el usado en la base anterior.

Las variables sugeridas para intervenir son:

- Age
- X3D
- Size

La RB obtenida con esta corrida se muestra en la Figura 6.4. Interviniendo la variable *Size* para el efecto *Outcome* se obtiene la siguiente expresión de probabilidad: $P(\text{Outcome}|\text{Nucleoli},\text{Pleo},\text{Size},\text{Dys})P(\text{Dys}|\text{Nucleoli},\text{Pleo},\text{Size})$ y la RBC que lo representa se muestra en la Figura 6.5:

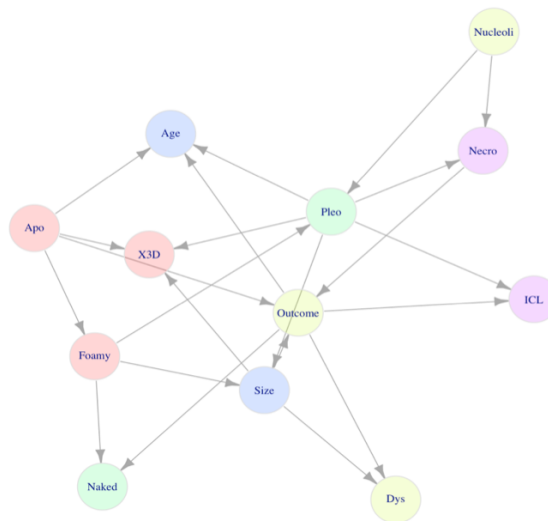


Figura 6.4: RB de la base cáncer de mama muestra prospectiva.

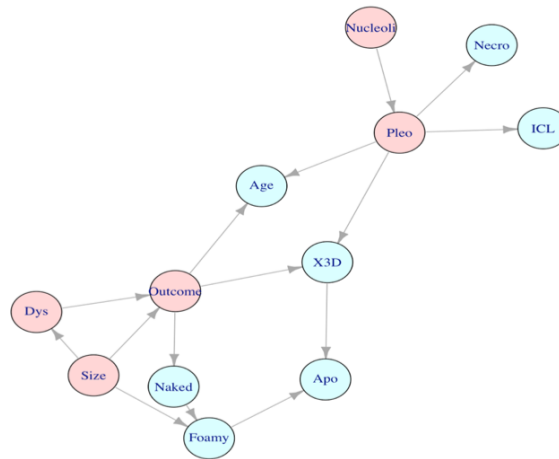


Figura 6.5: RBC de la base cáncer de mama muestra prospectiva interviniendo la variable *Size*. Los nodos en rosa representan la RC

La variable intervenida *Size* toma dos valores en el conjunto de datos, en las tablas 6.10 y 6.11 se muestran los resultados de la intervención para todos los valores del efecto.

Outcome	Probabilidad RB	Probabilidad RC
Benign	0.83	0.55
Malignant	0.17	0.45

Tabla 6.10: Probabilidades observadas y causales para la variable causa *Size = Absent* y el efecto *Outcome*.

Outcome	Probabilidad RB	Probabilidad RC
Benign	0.17	0.18
Malignant	0.83	0.82

Tabla 6.11: Probabilidades observadas y causales para la variable causa *Size = Present* y el efecto *Outcome*.

En la Figura 6.6 se muestran las diferencias relacionadas con la observación y la intervención de la variable *Size*. Como se puede apreciar, cuando el valor de la variable *Size* es *Present* los cambios hacia ambos valores del efecto son

mínimos, por lo que se podría pensar que ésta no es una causa potencial, sin embargo, cuando la variable *Size* toma el valor *Absent* ésta sí muestra cambios notables, lo que puede dar indicios de una posible causa potencial para los valores del efecto.

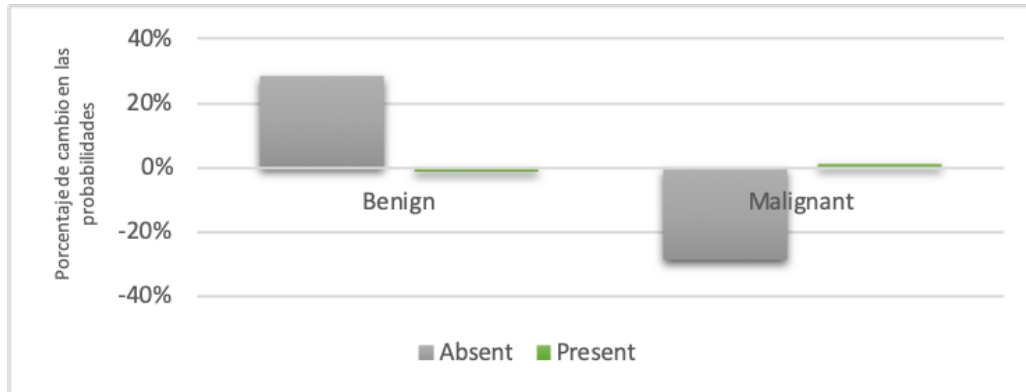


Figura 6.6: Distribución de valores donde la variable *Size* causó cambios al intervenir *Outcome*.

Para identificar qué tan fuerte es el efecto y contrastar la hipótesis para los valores intervenidos, se calcula el Factor de Bayes y los Efectos causales. Los resultados se presentan en las tablas 6.12 y 6.13.

Outcome = Benign	H1	H0	FB		EC	
do(Size)	Present	Absent	0.33	Evidencia anecdótica para H_0	-0.37	Causa Preventiva - Apoya H_0

Tabla 6.12: FB y EC para los valores de *Size* cuando el efecto es igual a *Benign*.

Outcome = Malignant	H1	H0	FB		EC	
do(Size)	Present	Absent	1.82	Evidencia anecdótica para H_1	0.37	Causa Generativa - Apoya H_1

Tabla 6.13: FB y EC para los valores de *Size* cuando el efecto es igual a *Malignant*.

A partir de lo anterior se puede concluir que, el efecto de *Size* sobre *Outcome* toma fuerza cuando *Size* = *Presente* y *Outcome* = *Malignant*, asimismo cuando *Size* = *Absent* el efecto sobre *Outcome* se ve reflejado en el valor *Benign*.

Niveles de expresión genética

Otra base analizada fue Niveles de expresión genética. Para llevar a cabo el análisis con este conjunto de datos, fue necesario realizar la discretización de todas las variables de la base (en Weka con el algoritmo CAIM). Posteriormente se generó la RB correspondiente. Las variables propuestas por el experto para intervenir son las siguientes:

- X205207_at_IL6
- X217904_s_atBACE1
- X201743_at_CD14

La RB de estos datos se muestra en la Figura 6.7 y la RBC resultado de mutilar el grafo para la variable causa X217904_s_atBACE1 y el efecto X212884_x_atAPOE se presenta en la Figura 6.8.

La expresión de probabilidad causal para esta intervención es:

$$\begin{aligned}
 & \text{"sum_X201743_at_CD14}P(X212884_x_atAPOE|X217904_s_atBACE1, \\
 & X201743_at_CD14)P(X201743_at_CD14|X217904_s_atBACE1)\text{"} \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

Las tablas 6.14 y 6.15 muestran la probabilidad para todos los valores del efecto X212884_x_atAPOE.

X212884_x_atAPOE	Probabilidad RB	Probabilidad RC
(319.22-387.64)	0.44	0.50
(387.64-807.86)	0.56	0.50

Tabla 6.14: Probabilidades observadas y causales para la variable causa X217904_s_atBACE1 = (166,94 – 221,33) y el efecto X212884_x_atAPOE.

X212884_x_atAPOE	Probabilidad RB	Probabilidad RC
(319.22-387.64)	0.16	0.15
(387.64-807.86)	0.86	0.85

Tabla 6.15: Probabilidades observadas y causales para la variable causa X217904_s_atBACE1 = (221,33 – 493,43) y el efecto X212884_x_atAPOE.

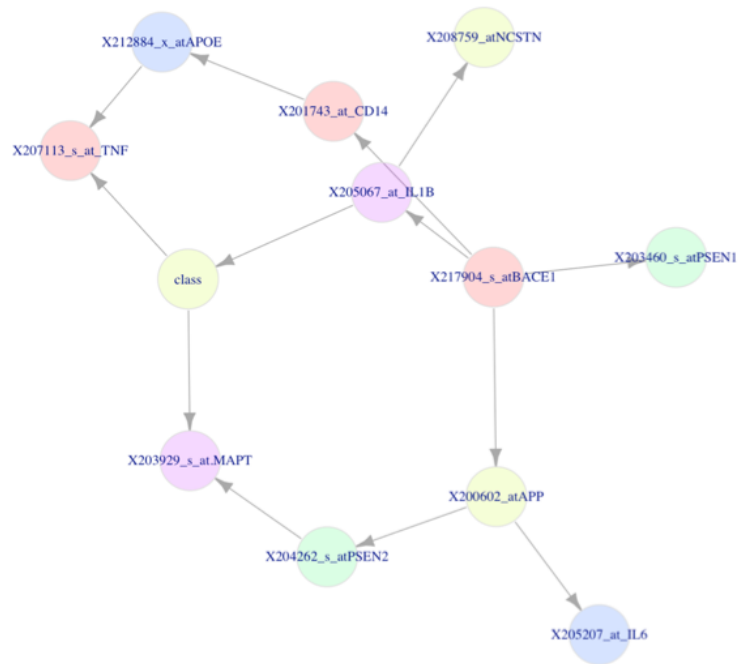


Figura 6.7: RB de la base niveles de expresión genética.

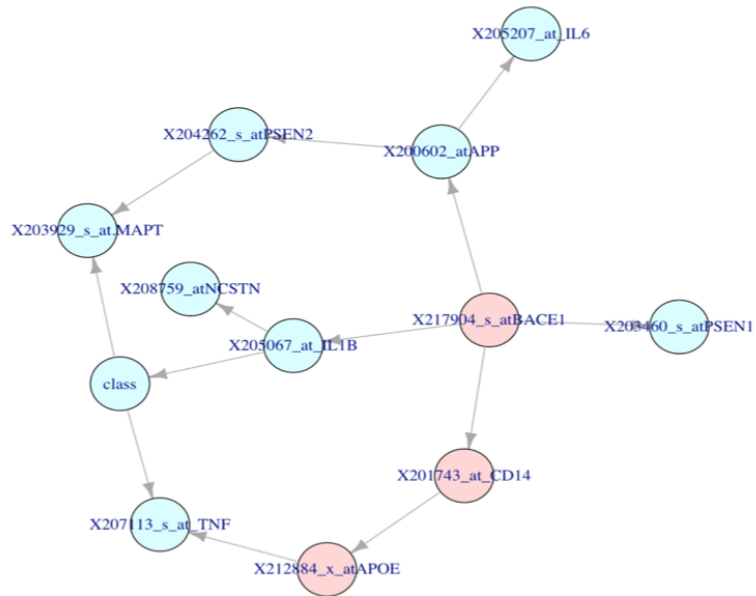


Figura 6.8: RBC interviniendo X217904_s_atBACE1 para el efecto X212884_x_atAPOE. Los nodos en rosa representan la RC.

Los resultados presentados en las tabas 6.14 y 6.15 son un caso en el que los cambios entre la probabilidad observada y la probabilidad causal no son fuertes, por lo que se podría pensar que la variable BACE1 no es una causa potencial de APOE y para corroborarlo se calcula el FB y los EC correspondientes.

APOE = (319.22 - 387.64)	H1	H0	FB		EC	
do(X217904_s_atBACE1)	(166.94 - 221.33)	(221.33 - 493.43)	3.4	Evidencia moderada para H_1	0.4	Causa Generativa - Apoya H_1

Tabla 6.16: FB y EC para los valores de $X_{217904_s_atBACE1}$ cuando el efecto es igual a (319.22 - 387.64).

A partir de la estimación de los EC y el FB se puede decir que la fuerza con la que $X_{217904_s_atBACE1} = (166.94 - 221.33)$ causa $X_{212884_x_atAPOE} = (387.64 - 807.86)$ es moderada.

APOE = (387.64 - 807.86)	H1	H0	FB		EC	
do(X217904_s_atBACE1)	(166.94 - 221.33)	(221.33 - 493.43)	0.6	Evidencia anecdótica para H_0	-0.4	Causa Preventiva - Apoya H_0

Tabla 6.17: FB y EC para los valores de $X_{217904_s_atBACE1}$ cuando el efecto es igual a (387.64 - 807.86).

De la Tabla 6.17 se puede concluir que la evidencia con la que $X_{217904_s_atBACE1} = (221.33 - 493.43)$ causa $APOE = (387.64 - 807.86)$ es anecdótica.

Los resultados anteriores muestran algunos ejemplos de RBC y los valores de probabilidad que se extrajeron a partir de las intervenciones. Pero como se mencionó anteriormente, los algoritmos para crear las RB no tienen alcance sobre el aprendizaje de las relaciones causales, por lo que algunas RB's no son aptas para la intervención. Para ello se analizan algunos ejemplos en el siguiente apartado.

Base de datos Integridad ecológica municipios

La RB que se muestra en la Figura 6.9 fue obtenida al igual que el resto de las redes con un algoritmo tradicional de IA. Esta base no pasó la prueba de validación de las relaciones causales por parte del experto y tampoco cumple con las condiciones para aplicar las reglas de inferencia.

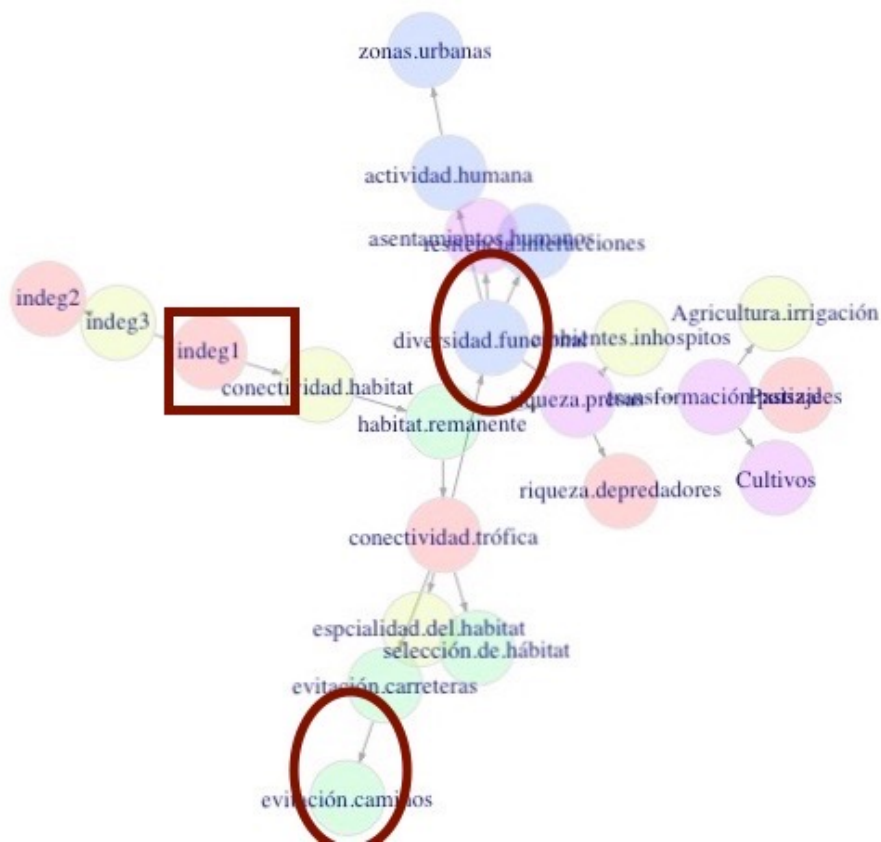


Figura 6.9: RC de la base Integridad ecológica-municipios.

De acuerdo con la propuesta para la intervención de variables, primero es necesario eliminar todas las conexiones que llegan a la variable causa.

En la red se marcan tres variables sugeridas por el experto (dos causas y un efecto). Las limitaciones que presenta esta red se describen a continuación:

1. La variable *evitación.camino*s (nodo verde marcada en óvalo) cuenta con un padre, pero no tiene predecesores, por esta razón al realizar la mutilación no hay una ruta que lleve hacia el efecto *Integer1* (nodo rosa en cuadro rojo).
2. La variable *diversidad.funcional* (nodo azul encerrado en óvalo) cuenta con un padre y 4 hijos, sin embargo, al realizar la mutilación todo el conjunto de nodos descendientes de ésta se desconectan de la red, por lo que no existe ninguna ruta que vaya desde la causa al efecto.
3. Otra limitación es con el efecto *Indeg 1*, para encontrar una ruta adecuada es necesario aplicar las reglas de inferencia. Si observamos la variable efecto (nodo rosa encerrado en cuadro rojo), ésta tiene dos ancestros únicamente, y no hay alguna otra conexión que cree un vínculo entre el nodo efecto y las causas.

A partir de los ejemplos anteriores se puede apreciar cómo la intervención de variables puede ser un método no muy eficiente en la estimación causal ya que en algunos casos requiere de la manipulación de los algoritmos o peor aún, manipulación de la RB para representar las relaciones causales adecuadamente.

6.1.1. Otros resultados

Con la finalidad de validar la implementación del algoritmo para la intervención de variables, se realizaron pruebas con algunas bases de datos en BayesiaLab y se compararon los resultados.

El primer ejemplo corresponde a una base de datos hipotética presentada en el libro *Bayesian Network & BayesiaLab* [2] para mostrar cómo funciona el paquete. La estructura de la RB que se muestra en la Figura 6.10 inciso a) se obtuvo en R y fue necesario indicar las relaciones de manera manual para obtener una red idéntica a la del ejemplo del libro (inciso b).

A partir de la RB se realizó la intervención de la variable *X2_Treatment* en

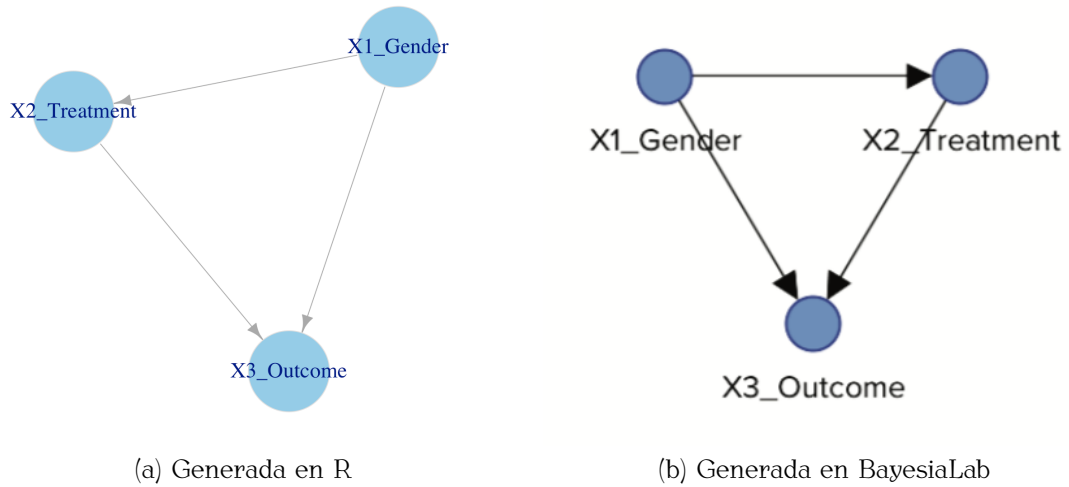


Figura 6.10: RBC generadas en dos implementaciones para la base Datos sintéticos BayesiaLab.

ambos sistemas, obteniéndose los resultados de la Tabla 6.18.

Probabilidades Causales	R		BayesiaLab	
$do(X2_Treatment)$	No (0)	Yes (1)	No (0)	Yes (1)
X3_ Outcome = Patient Did Not Recovered (0)	0.51	0.59	0.51	0.59
X3_ Outcome = Patient Recovered (1)	0.49	0.41	0.49	0.41

Tabla 6.18: Comparación de probabilidades causales en R y BayesiaLab.

Como se puede apreciar en este ejemplo, las probabilidades causales del algoritmo implementado en R y el de BayesiaLab son iguales, por lo que el FB y los EC también lo son.

Para asegurar que los resultados obtenidos con ambas implementaciones siempre son iguales, se probó con otros conjuntos de datos reales. Cabe hacer mención que no se realizaron comparaciones con todas las bases ya que para hacer que las redes coincidan en ambos sistemas deben ser dibujadas a mano, por lo que se probó solo con aquellas que contenían menor número de conexiones.

Las RB's de la Figura 6.11 corresponden una base de datos que mide la probabi-

alidad de que un algoritmo -a partir de ciertas condiciones- encuentre la solución óptima.

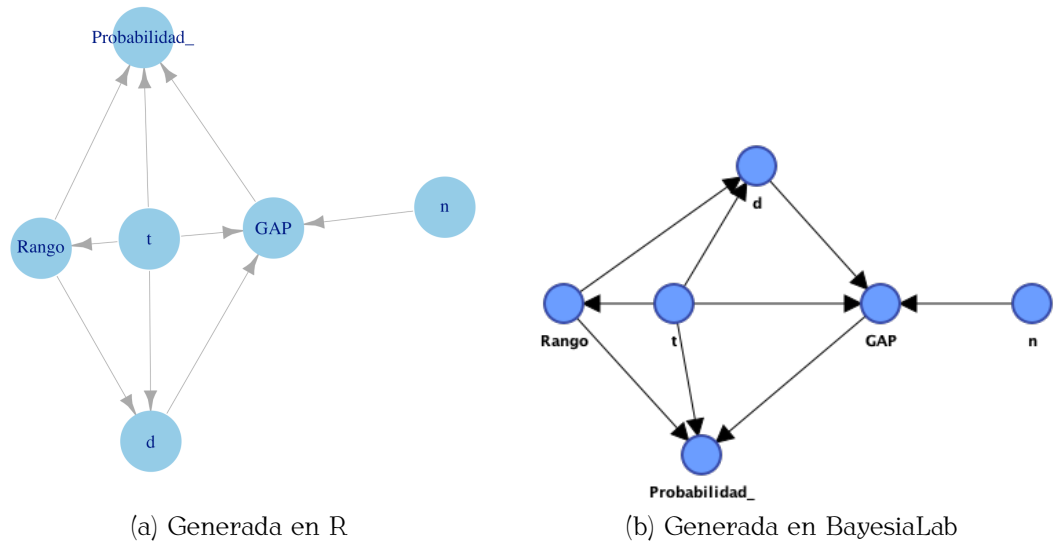


Figura 6.11: RBC generadas en dos implementaciones para la base Búsqueda de solución óptima.

Una vez obtenidas las redes en ambos sistemas, se procedió a intervenir un par de variables sugeridas por el experto, para posteriormente calcular y comparar las probabilidades causales. Los resultados mostraron diferencias mínimas que no se consideran alarmantes, ya que pueden atribuirse al método de cálculo usado en BayesiaLab para la estimación de las tablas de probabilidad de la RB (ver Tabla 6.19).

Probabilidades Causales	R		BayesiaLab	
do(GAP)	0.0 - 0.001975	0.001975-0.00348150	0.0 - 0.001975	0.001975-0.00348150
Probabilidad = 0.01 - 0.25	0.44	0.26	0.44	0.27
Probabilidad = 0.26 - 0.50	0.28	0.47	0.29	0.50
Probabilidad = 0.51 - 0.75	0.26	0.21	0.27	0.23

Tabla 6.19: Comparación de probabilidades causales en R y BayesiaLab.

Un último ejemplo para comparar con BayesiaLab se hizo con los datos de la base SEWELL & SHAH [3] (ver Figura 6.12 y la Tabla 6.20).

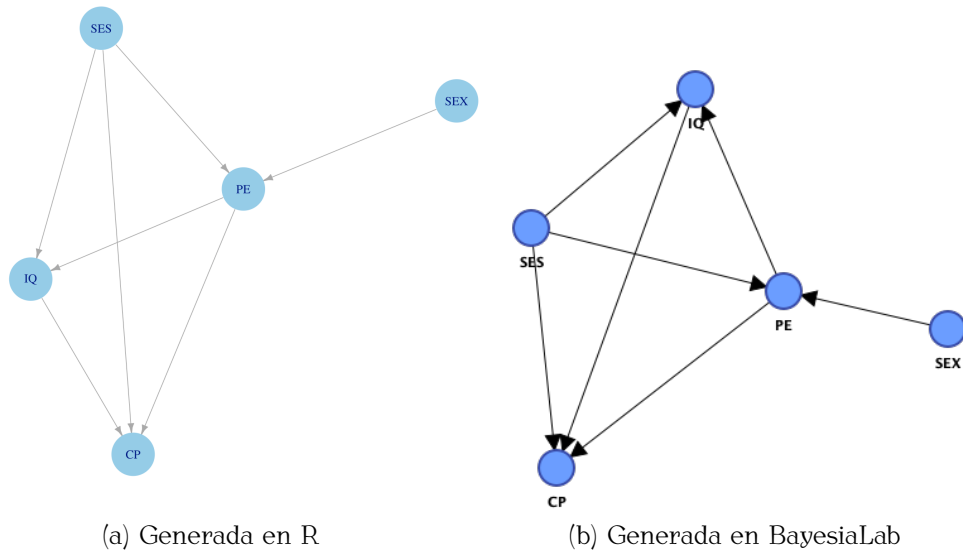


Figura 6.12: RBC generadas en dos implementaciones para la base SEWELL & SHAH.

Probabilidades Causales	R		BayesiaLab	
	low	high	low	high
$do(PE)$	0.92	0.49	0.92	0.48
CP = No	0.08	0.51	0.08	0.52

Tabla 6.20: Comparación de probabilidades causales en R y BayesiaLab.

El EC del efecto $CP = Yes$ es 0.4 en ambos sistemas, asimismo, las probabilidades y el FB son iguales, por lo que se garantiza que los resultados del algoritmo en R y el software BayesiaLab son consistentes.

Capítulo 7

Discusión

El término causalidad puede resultar tan familiar que todos en algún momento creemos entender el tema, este trabajo refleja cómo su estudio y entendimiento puede resultar muy complejo.

Como se observó, el operador de intervención permite realizar el cálculo de la probabilidad causal de un valor, sobre una variable que posiblemente sea su efecto. Se probó cómo ese cálculo se realiza únicamente con las variables involucradas, accediendo a una probabilidad, sin afectar variables fuera de la ruta causal.

Con los resultados de las pruebas se pudo apreciar cómo las probabilidades observadas cambiaban con la intervención, dando indicios de causalidad. Incluso se pudo estimar el efecto causal a partir de la intervención, entendiendo que éste no es otra cosa más que la fuerza con la que la intervención de una variable causa un efecto sobre otra.

No hay que olvidar que el operador siempre requiere del apoyo experto para dar dirección a las relaciones y validarlas, por lo que su uso no está recomendado para la búsqueda de las relaciones o para estimaciones causales en redes no validadas.

TETRAD pudo ser una buena herramienta para encontrar las relaciones causa-

les a partir de los datos, sin embargo, sus algoritmos proporcionan un conjunto de relaciones complicadas que de primera instancia no son amigables, y podrían impedir la intervención de variables a partir del operador, por lo que se descartó como opción para la creación de las redes.

BayesiaLab implementa el operador de intervención y permite acceder a las probabilidades causales, pero en su documentación no se encontraron pruebas de la búsqueda de las rutas y el cálculo de probabilidades causales, por lo que únicamente se utilizó para comparar los resultados, a fin de validar la implementación del algoritmo mas no del operador.

Es importante recalcar que debido a que la construcción de las RB's se realizó con algoritmos tradicionales de IA, no se dio dirección a todas las relaciones en cada red, sino solo a aquellas que el experto consideró altamente importantes, originando que en muchos casos las rutas causales no se pudieran encontrar y las probabilidades no pudieran estimarse.

Apreciar la diferencia entre observar e intervenir, es sin duda un gran aporte del trabajo; estimar la probabilidad causal, en el entendido de que es un nuevo cálculo que matemáticamente requiere del cumplimiento de ciertas condiciones, permitió corroborar cómo obtener una probabilidad de intervención -que el autor considera como causal- es posible.

Finalmente, recordando la escalera de la causalidad presentada en la Figura 1.1, la intervención de variables se encuentra en el segundo nivel del aprendizaje causal, por lo que es necesario apoyarse del conocimiento natural (experto) para poder llegar a éste, dando a las redes las relaciones adecuadas antes de la intervención. Partiendo de esto y de los resultados obtenidos, el operador de intervención no es considerado una herramienta para encontrar causalidad en las redes, sino más bien, el operador es una herramienta para estimar causalidad a partir de RB's con relaciones causales, que asegura encontrar rutas adecuadas que contengan solo las variables que influyan desde la intervención hasta el efecto.

Capítulo 8

Conclusiones y trabajo futuro

La intervención de variables a través del operador-do demostró ser un buen método de estimación causal cuando las condiciones para la intervención se cumplen.

El objetivo principal de la investigación fue la validación del operador; las pruebas realizadas después de la implementación permitieron corroborar su efectividad para estimar probabilidad causal y experimentar las complicaciones para la implementación del método.

Si bien, Judea Pearl es hasta que publica su libro “The Book of why?” en 2018 cuando hace especial énfasis en que la validación de las relaciones causales debe ser realizada por un experto; no pone la lupa en los problemas que pudieran ocasionarse por la manipulación deliberada de las conexiones en la RB. No hay que olvidar que realizar este tipo de manipulaciones puede resultar en RB’s que no estén soportadas por los datos, generando redes que no reflejen la distribución de probabilidad adecuadamente.

Esta complicación no puede ser atribuida a los algoritmos para la construcción de RB’s, ya que las redes con las que se trabaja utilizan para su construcción algoritmos tradicionales de IA, que si bien al cambiarlos pueden generar redes con conexiones adecuadas, su diseño original no incluye el aprendizaje causal de

las relaciones.

Todo este trabajo no solo permitió adentrarse al tema complejo de la causalidad, sino al entendimiento detallado de cómo observar relaciones, realizar estimaciones a partir de esas observaciones e interpretarlas. Lo anterior no debiera ser una tarea difícil, sin embargo, encontrar el conjunto de variables adecuadas que pudieran ser una causa probable y realizar intervenciones que permitan conocer la fuerza causal de un valor sobre otro, sí tiene un grado de dificultad mayor. Estimar causalidad adecuadamente requiere por mucho del conocimiento experto, y requiere también de la intuición, lo que no se puede reflejar en el cálculo de las probabilidades causales.

Una vez probado que es posible estimar la probabilidad de la intervención, se torna interesante buscar la forma de conectar el primer nivel de la escalera de la causalidad con el segundo. Para ello, habrá que voltear hacia las áreas que estudian el proceso en que se da el aprendizaje de las relaciones causales de manera natural, y buscar en estos algoritmos que permitan crear RBC que asemejen el aprendizaje causal, con la misma precisión que se hace naturalmente, pensando en dotar entes artificiales con mecanismos que aprendan causalidad aproximada a como lo hace de manera natural el ser humano.

Bibliografía

- [1] Borgelt, C. and Kruse, R. (2001). An empirical investigation of the k2 metric. In *European Conference on Symbolic and Quantitative Approaches to Reasoning and Uncertainty*, pages 240–251. Springer.
- [2] Conrady, S. and Jouffe, L. (2015). *Bayesian networks and BayesiaLab: A practical introduction for researchers*. Bayesia USA.
- [3] Cruz, R. N. (2001). *Building Bayesian Networks from data: A constraint-based approach*. PhD thesis, Disertación doctoral, Universidad de Sheffield, Sheffield, Gran Bretaña.
- [4] Eberhardt, F., Hoyer, P. O., Scheines, R., et al. (2010). Combining experiments to discover linear cyclic models with latent variables. *Journal of Machine Learning Research*, pages 185–192.
- [5] Eberhardt, F. and Scheines, R. (2007). Interventions and causal inference. *Philosophy of Science*, 74(5):981–995.
- [6] Fayyad, U. M. and Irani, K. B. (1993). Multi-interval discretization of continuous-valued attributes for classification learning. In *IJCAI*, pages 1022–1029.
- [7] Friedman, N., Linial, M., Nachman, I., and Peér, D. (2000). Using bayesian networks to analyze expression data. *Journal of computational biology*, 7(3-4):601–620.
- [8] Glymour, C., Danks, D., Glymour, B., Eberhardt, F., Ramsey, J., Scheines, R.,

- Spirtes, P., Teng, C. M., and Zhang, J. (2010). Actual causation: a stone soup essay. *Synthese*, 175(2):169–192.
- [9] Gorgas, J., Cardiel, N., and Zamorano, J. (2011). Estadística básica para estudiantes de ciencias. *Universidad Complutense de Madrid, España, Edición de Febrero*.
- [10] Jensen, F. V. et al. (1996). *An introduction to Bayesian networks*, volume 210. UCL press London.
- [11] Kass, R. E. and Raftery, A. E. (1995). Bayes factors. *Journal of the american statistical association*, 90(430):773–795.
- [12] Kim, J. and Pearl, J. (1983). A computational model for causal and diagnostic reasoning in inference systems. *International Joint Conference on Artificial Intelligence*, pages 190–193.
- [13] Kurgan, L. and Cios, K. (2004). CAIM discretization algorithm. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 16(2):145–153.
- [14] Pearl, J. (1982). *Reverend Bayes on inference engines: A distributed hierarchical approach*. Cognitive Systems Laboratory, School of Engineering and Applied Science.
- [15] Pearl, J. (1988). *Probabilistic reasoning in intelligent systems: Networks of Plausible Inference*. Morgan Kaufmann Publishers.
- [16] Pearl, J. (1993). [bayesian analysis in expert systems]: comment: graphical models, causality and intervention. *Statistical Science*, 8(3):266–269.
- [17] Pearl, J. (1995). Causal diagrams for empirical research. *Biometrika*, 82(4):669–688.
- [18] Pearl, J. (1998). Graphical models for probabilistic and causal reasoning. In *Quantified representation of uncertainty and imprecision*, pages 367–389. Springer.

- [19] Pearl, J. (2000). *Causality: models, reasoning and inference*, volume 29. Springer.
- [20] Pearl, J. (2011). Graphical models, causality, and intervention. *Department of Statistics Papers*.
- [21] Pearl, J. et al. (2009). Causal inference in statistics: An overview. *Statistics surveys*, 3:96–146.
- [22] Pearl, J., Glymour, M., and Jewell, N. P. (2016). *Causal inference in statistics: A primer*. John Wiley & Sons.
- [23] Pearl, J. and Mackenzie, D. (2018). *The book of why: the new science of cause and effect*. Basic Books.
- [24] Qin, X. and Lee, W. (2003). Statistical causality analysis of infosec alert data. In *International Workshop on Recent Advances in Intrusion Detection*, pages 73–93. Springer.
- [25] Ramsey, J. D., Hanson, S. J., Hanson, C., Halchenko, Y. O., Poldrack, R. A., and Glymour, C. (2010). Six problems for causal inference from fmri. *neuroimage*, 49(2):1545–1558.
- [26] Russell, S. J. and Norvig, P. (2004). *Inteligencia Artificial: un enfoque moderno*. Prentice-Hall Hispanoamericana,.
- [27] Smith, E. E. (2015). *Cognitive psychology: history*. Elsevier.
- [28] Spirtes, P., Glymour, C. N., Scheines, R., Heckerman, D., Meek, C., Cooper, G., and Richardson, T. (2000). *Causation, prediction, and search*. MIT press.
- [29] Sucar, L. E. (2006). Redes bayesianas. *BS Araujo, Aprendizaje Automático: conceptos básicos y avanzados*, pages 77–100.
- [30] Sucar, L. E. (2015). *Probabilistic graphical models*. Springer.
- [31] Yu, J., Smith, V. A., Wang, P. P., Hartemink, A. J., and Jarvis, E. D. (2004). Advances to bayesian network inference for generating causal networks from observational biological data. *Bioinformatics*, 20(18):3594–3603.