【统计】Causal Inference

张楚珩
清华大学 交叉信息院博士在读

学习一下因果推断，做一个笔记。

原文传送门

stat.cmu.edu/~larry/=sm...

过程

一、Prediction 和 causation 的区别

Prediction: Predict Y after **observing** $X = x$
Causation: Predict Y after **setting** $X = x$.

Prediction: Predict health given that a person takes vitamin C
Causation: Predict health if I give a person vitamin C

现实中遇到的很多问题实际上是因果问题，而不是预测。

因果问题分为两种：一种是 causal inference，比如给定两个变量 X、Y，希望找到一个衡量它们之间因果关系的参数 theta；另一种是 causal discovery，即给定一组变量，找到他们之间的因果关系。对于后面这种 causal discovery，notes 里面说它在统计上是不可能的。

数据有两种产生途径：一种是通过有意控制、随机化的实验得到的；一种是通过观测数据得到的。前一种方式能够直接做 causal inference；后一种方式需要另外知道一些先验知识，才能在上面做 causal inference。

对因果关系描述的数学语言：一种是 counterfactuals，一种是 causal graph；还有一种和 causal graph 相近的 structural equation models。

Correlation is not causation

预测问题可以写为

$$\mathbb{P}(Y \in A | X = x)$$

它表示的是，如果我们观察到 X=x，预测 Y。而因果推断关系的是

$$\mathbb{P}(Y \in A | \text{set } X = x)$$

它表示我们如果把某个变量 X 设置为 x，那么 Y 会是多少。数学上表示出来就是

$$\mathbb{P}(Y \in A | X = x) \neq \mathbb{P}(Y \in A | \text{set } X = x).$$

一个简单的例子『睡眠超过 7 小时的人』（X）『生病少』（Y)，只是代表 X 和 Y 之间有关联性，并不代表如果强制一个人睡眠超过 7 小时，ta 就能够生病少。因为可能『身体好的人』容易『睡眠超过 7 小时』，同时 ta 也『生病少』；但是一个本来身体不好的人，强制 ta 睡眠多，ta 可能也生病不会少。

Notes 里面想要说明的结论是：***因果关系可以从随机化的实验中得到；但是很难从观察到的数据中得到。***

另外一个例子说明 correlation 和 causation 的区别

考虑数据是由一段程序生成的：

$$\begin{aligned}
\text{For } i &= 1, \ldots, n: \\
x_i &<- p_X(x_i) \\
y_i &<- p_{Y|X}(y_i|x_i) \\
z_i &<- p_{Z|X,Y}(z_i|x_i, y_i)
\end{aligned}$$

估计 correlation $P(Z=z|Y=y)$ 时，我们会统计 Z=z & Y=y 的样本占 Y=y 样本的多大比例，它等价于

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(Z=z|Y=y) &= \frac{\mathbb{P}(Y=y, Z=z)}{\mathbb{P}(Y=y)} = \frac{p(y,z)}{p(y)} \\
&= \frac{\sum_x p(x,y,z)}{p(y)} = \frac{\sum_x p(x)\, p(y|x)\, p(z|x,y)}{p(y)} \\
&= \sum_x p(z|x,y) \frac{p(y|x)\, p(x)}{p(y)} = \sum_x p(z|x,y) \frac{p(x,y)}{p(y)} \\
&= \sum_x p(z|x,y)\, p(x|y).
\end{aligned}$$

当我们研究因果关系的时候，我们是想知道，如果『设置』Y=y，会怎样引起 Z 的分布；该过程可以用如下程序模拟

$$\begin{aligned}
\text{set } Y &= y \\
\text{for } i &= 1, \ldots, n \\
x_i &<- p_X(x_i) \\
z_i &<- p_{Z|X,Y}(z_i|x_i, y)
\end{aligned}$$

在这种情况下，我们再统计 Z=z 占总体样本的比例，即

$$\text{p(z|set Y=y)=} \; p^*(z) = \sum_x p^*(x,z) = \sum_x p(x) p(z|x,y).$$

二、Counterfactuals

考虑一个 treatment X，和一个 outcome Y。我们能观察到的是一些数据 $\{(X_i,Y_i)\}$ ，但是我们无法知道如果对于某一个数据点 (X_i,Y_i) ，如果改变 X 的值，Y 会怎么变。这件事情就叫做 counterfactual。Notes 里面给了一个图（下图），从数据上看，X 和 Y 是正相关的，但其实对于每一个 样本来说，如果增大 X，会引起 Y 的减小。这一点最开始看的时候并不好理解。举一个例子。研究航空公司票价（X）对销量（Y）的影响，显然，对于某一个客户来说，增加票价（X 变大）会降低客户购买意愿，即使得销量将达（Y 变小）。但是实际中的情况是，在节假日人们出行意愿大导致销量高（Y 大），定价也会相应变高（X 大），从而从数据上看，形成左边图的情形。

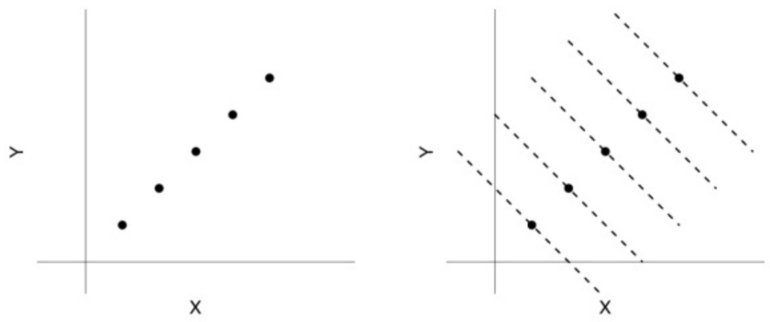


Figure 1: *Left: X and Y have positive association. Right: The lines are the counterfactuals, i.e. what would happen to each person if I changed their X value. Despite the positive association, the causal effect is negative. If we increase X everyone's Y values will decrease.*

假设 X 取值 0 或者 1，Y 也取值 0 或者 1。引入变量 Y_0,Y_1 ，认为

$$Y = \begin{cases} Y_1 & \text{if } X = 1 \\ Y_0 & \text{if } X = 0. \end{cases}$$

这两个变量也叫做 potential outcome 或者 counterfactuals，因为如果在数据中观察到 X=0，就只能观察到 $Y=Y_0$ ，而此时的 Y_1 就没法观察到了。比如，一个观察到的数据集长这样：

X	Y	Y_0	Y_1
1	1	*	1
1	1	*	1
1	0	*	0
1	1	*	1
0	1	1	*
0	0	0	*
0	1	1	*
0	1	1	*

而我们关心的 $p(Y|\text{set } X=0)=p(Y_0)$ ， $p(Y|\text{set } X=1)=p(Y_1)$ 。而由于这些未知的 * 的存在，使得我们没有办法估计到它们。但是，显然有

$$\mathbb{E}[Y_1] \neq \mathbb{E}[Y|X=1] \quad \text{and} \quad \mathbb{E}[Y_0] \neq \mathbb{E}[Y|X=0].$$

定义

$$\theta = \mathbb{E}(Y_1) - \mathbb{E}(Y_0) = \mathbb{E}(Y|\text{set } X=1) - \mathbb{E}(Y|\text{set } X=0).$$

为 mean treatment effect，它可以被看做是一个衡量因果关系的参数；如果它大于零，表示我们设置 X=1 会在期望上增大 Y（这是一个因果推断）。

文章下面给出了一个定理，说明不可能从数据里面估计出 θ 。

Theorem 2 *In general, there does not exist a uniformly consistent estimator of* θ.

其中 uniformly consistent estimator 的定义是

The observed data are $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n) \sim P$. Let $\theta(P) = \mathbb{E}[Y_1] - \mathbb{E}[Y_0]$. An estimator \hat\theta_n is uniformly consistent if, for every $\epsilon > 0$,

$$\sup_{P \in \mathcal{P}} P(|\widehat{\theta}_n - \theta(P)| > \epsilon) \to 0$$

as $n \to \infty$.

其实这很好理解，可以构造两个数据集，它们有不同的 $p(X,Y_0,Y_1)$ 分布，使得它们 θ 不同，但是形成的数据 X,Y 是一样的。这可以通过任意设置前面例子中的 * 来实现。

那么应该如何估计 θ 呢？下面介绍两种方法：一种方法就是使用 randomization，另一种方法叫做 adjusting for confounding。

三、用随机化来估计因果关系

如果我们能够随机设定 X 的值，使得 X 和 Y_0,Y_1 相互独立，就能有办法估计 θ ，即

$$\text{random treatment assignment implies}: \ (Y_0, Y_1) \overset{\text{独立}}{\perp\!\!\!\perp} X.$$

Theorem 3 *If X is randomly assigned, then $\theta = \alpha$ where*

$$\alpha = \mathbb{E}(Y|X=1) - \mathbb{E}(Y|X=0).$$

A uniformly consistent estimator of α (and hence θ) is the plug-in estimator

$$\widehat{\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i}{\sum_{i=1}^n X_i} - \frac{\sum_{i=1}^n (1-X_i) Y_i}{\sum_{i=1}^n (1-X_i)}.$$

That is, for every $\epsilon > 0$,

$$\sup_{P \in \mathcal{P}} P(|\widehat{\alpha} - \theta| > \epsilon) \to 0$$

as $n \to \infty$.

可以这么做最主要的原因就是当 X 和 Y_0, Y_1 相互独立时， $\mathbb{E}(Y_i|X=i) = \mathbb{E}(Y_i)$ ，因此， $\alpha = \theta$ ，即

$$\begin{aligned} \alpha &= \mathbb{E}(Y|X=1) - \mathbb{E}(Y|X=0) \\ &= \mathbb{E}(Y_1|X=1) - \mathbb{E}(Y_0|X=0) \quad \text{since } Y = XY_1 + (1-X)Y_0 \\ &= \mathbb{E}(Y_1) - \mathbb{E}(Y_0) = \theta \quad \text{since } (Y_0, Y_1) \perp\!\!\!\perp X. \end{aligned}$$

总结来说，在完全随机的情况下（X 和 Y_0, Y_1 相互独立），correlation=causation。

【注】Randomization 并不意味着 X 的选取要是 uniformly random（比如一半选 0，一半选 1），可以令 X 为任意分布，只要它和 Y_0, Y_1 相互独立即可。

四、Adjusting for Confounders

有些时候我们没法做实验，只能从可以观察的数据中来估计。比如，研究抽烟（X）和肺癌（Y）之间的因果关系，不可能故意选人去让他抽烟或者不抽烟。那么应该如何找到其中的因果关系呢？

Causal inference in observational studies is not possible without subject matter knowledge

注意到，观察到的数据中不能假设 X 和 Y_0, Y_1 相互独立。这里考虑一个例子，服用 VC（X）对于健康与否（Y）的关系。一个健康的人不论吃不吃 VC，理应都是健康的，但是健康的人喜欢吃 VC；一个不健康的人无论吃不吃 VC，他都不健康。因此，我们可能观察到如下数据（X=1 表示吃 VC，Y=1 表示健康）。

X	1	1	1	1	0	0	0	0
Y_0	1	1	1	1	0	0	0	0
Y_1	1	1	1	1	0	0	0	0

因此，实际情况是吃 VC 和健康之间没有因果关系，即 $\theta = 0$ ；但是从数据中的估计来看，这二者之间有很强的关联，即 。

Use confounding variables

虽然在数据中 X 和 Y_0, Y_1 不相互独立，但是如果我们能够找到共同影响 X 和 Y 的因素，并把它通过某种统计方式排除的话，也可以可以做因果推断的。这里的共同因素就是 confounding variables Z，即希望找到一个 $Z=(Z_1,\cdots,Z_k)$ ，使得 there is ***no unmeasured confoundings*** or ***ignorability holds***。

$$X \amalg (Y_0, Y_1) \;\Big|\; Z.$$

下面的定理就是说，如果 能够观察到这样的 confounding variable，那么也能够做因果推断。

Theorem 4 *Suppose that*

$$X \amalg (Y_0, Y_1) \;\Big|\; Z.$$

Then

$$\theta \equiv \mathbb{E}(Y_1) - \mathbb{E}(Y_0) = \int \mu(1,z)p(z)dz - \int \mu(0,z)p(z)dz \qquad (2)$$

where

$$\mu(x,z) = \mathbb{E}(Y|X=x, Z=z).$$

A consistent estimator of θ *is*

$$\widehat{\theta} = \frac{1}{n}\underbrace{\sum_{i=1}^{n}}^{\text{对不同 Z 的取值 Zi}}\widehat{\mu}(1,Z_i) - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widehat{\mu}(0,Z_i)$$

where $\widehat{\mu}(x,z)$ *is an appropriate, consistent estimator of the regression function* $\mu(x,z) = \mathbb{E}[Y|X=x, Z=z]$.

证明过程也比较好理解，因为在 Z 给定之后 X 和 Y_0, Y_1 是相互独立的（箭头标注的那一步）。

$$\begin{aligned}
\theta &= \mathbb{E}(Y_1) - \mathbb{E}(Y_0) \\
&= \int \mathbb{E}(Y_1|Z=z)p(z)dz - \int \mathbb{E}(Y_0|Z=z)p(z)dz \\
&= \int \mathbb{E}(Y_1|X=1, Z=z)p(z)dz - \int \mathbb{E}(Y_0|X=0, Z=z)p(z)dz \\
&= \int \mathbb{E}(Y|X=1, Z=z)p(z)dz - \int \mathbb{E}(Y|X=0, Z=z)p(z)dz \qquad (3)
\end{aligned}$$

这个方法叫做 adjusting for confounders，同时也把这上面的 θ 叫做 adjusted treatment effect。

Intuitive 地来说，拿航空公司票价（X）和销量（Y）的例子来说，它们可能受到节假日（Z）的影响，节假日的时候（Z=1）票价高，销量也大。要搞清楚其中的因果关系，就需要分别在是节假日

（Z=1）和非节假日的时候（Z=0）统计 X、Y 的关系。

The usual bias-variance tradeoff does not apply

Notes 里面提到，在估计 $\hat{\mu}(x,z)$ 的时候要特别小心，在因果推断里面 bias 的危害会更大，因此拟合的时候会尽量更『平滑』。这一块有特别的一些方法来解决该问题，叫 semiparametric inference 以及后面会讲的 matching。

对于前面这个离散的例子来说，可以对 $\mu(x,z)=\mathbb{E}[Y|X=x,Z=z]$ 做线性拟合，即 。我们可以看到，这种情况下，线性回归中 x 前面的系数就代表了 x 的 causal effect。

$$\theta = \int [\beta_0 + \beta_1 + \beta_2^T z] dP(z) - \int [\beta_0 + \beta_2^T z] dP(z) = \beta_1.$$

对于连续的情形类似地，有

$$\begin{aligned}\theta(x) &= \mathbb{E}[Y(x)] = \mathbb{E}[Y(x)|Z=z]dP(z) = \int \mathbb{E}[Y(x)|Z=z, X=x]dP(z) \\ &= \int \mathbb{E}[Y|Z=z, X=x]dP(z) = \int m(x,z)dP(z)\end{aligned}$$

总结：如果 1）线性模型正确；2）所有的 confounding variables 都包含到回归方程中了，那么 x 前面的系数就表示 x 的 causal effect。

五、Causal Graphs

Causal graph 是一个有向无环图（DAG），表明了各个变量之间的联合概率分布

$$p(y_1,\ldots,y_k) = \prod p(y_j|\text{parents}(y_j))$$

下面举例说明，在给定一个 causal graph 之后，如何做因果推断。考虑下面一个 causal graph，目标是求 $p(y|\text{set } X=x)$ 。

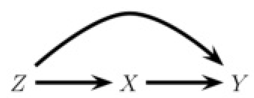


Figure 2: A basic causal graph. The arrows represent the effect of interventions. For example, the arrow from X to Y means that changing X effects the distribution of Y.

首先，可以看出该 causal graph 提供的信息为 $p(x,y,z)=p(z)p(x|z)p(y|x,z)$ 。

接下来，由于考虑的是设定 X 的数值的影响，因此构建一个新图 G_* ，移除掉所有指向 X 的边，得到新的联合概率分布 $p_*(y,z)=p(z)p(y|x,z)$ 。

最后，该概率分布下的数值就是因果推断的结果

$$p(y|\text{set } X=x) \equiv p_*(y) = \int p_*(y,z)dz = \int p(z)p(y|x,z)dz.$$

在 $X=\{0,1\}$ 情形下，

$$p(y|\text{set } X=1) - p(y|\text{set } X=0) = \int p(y|1,z)p(z)dz - \int p(y|0,z)p(z)dz.$$

和 adjusting for confounder 方法的等价性

比如还是在 $X=\{0,1\}$ 情形下，从上述方法出发计算 θ

$$\begin{aligned}\theta &= \mathbb{E}[Y|\text{set } X=1] - \mathbb{E}[Y|\text{set } X=0] \\ &= \int yp(y|1,z)p(z)dz - \int yp(y|0,z)p(z)dz = \mathbb{E}[Y|X=1,Z=z]p(z)dz - \mathbb{E}[Y|X=0,Z=z]p(z)dz \\ &= \int \mu(1,z)p(z)dz - \int \mu(0,z)p(z)dz\end{aligned}$$

其结果和 adjusting for confounder 方法一致。

和 randomized experiment 方法的等价性

当 X 的选取是随机时，就没有从 Z 到 X 的箭头了，因此直接在概率图上计算可以得到 $\theta = \mathbb{E}(Y|X=1) - \mathbb{E}(Y|X=0)$ ，和这里得到的一致。

Causal graph 和 probability graph 的区别

举例说明，比如下雨（Rain，R）和湿草坪（Wet Lawn，W）是不相互独立的， 即 $p(w,r) \neq p(w)p(r)$ 。

对于下两种 DAG，它们都是合理的 probability graph，即对于任意的联合概率分布 $p(w,r)$ ，都可以写成 $p(w)p(r|w)$ 或者 $p(r)p(w|r)$ 。但显然下雨是因、草坪湿是果，只有左边的图才是正确的 causal graph。

$$\text{Rain} \longrightarrow \text{Wet Lawn} \qquad \text{Rain} \longleftarrow \text{Wet Lawn}.$$

分析 $p(r|\text{set } w=1)$ ，按照应该关系，把草坪弄湿不会影响是否下雨。对左边的图推断 $p(r|\text{set } w=1)$ ，先把指向 W 的边去掉，形成如下图

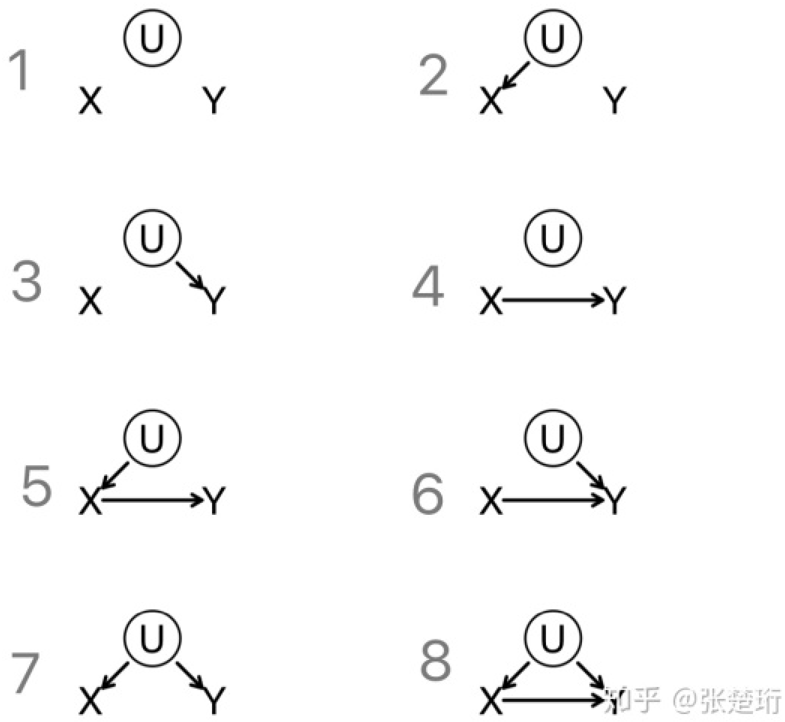
$$\text{Rain} \qquad \boxed{\textbf{set} \ \ \text{Wet Lawn } = 1}$$

因此得到 $p_*(r) = p(r)$ ，由此得出结论 ，即草坪弄湿不引起下雨。

六、Causal Discovery 是不可能的

下面想说明的是在不做 randomized experiment 并且也观察不到所有 confounders 时，研究两个变量之间是否有因果关系是不可能的。

考虑一个最简单的情形，就是研究『 X 是否引起 Y（X、Y 之间是否有因果关系）』；同时能够肯定地排除掉『Y 引起 X 』的情形（比如，时间先后关系，发生在后面的不可能引起发生在前面的）。考虑可能的 confounding variable U，它们之间可能的关系有如下八种。



如果我们只能观察到 X、Y 的数据，能做的是估计 α 。如果 说明 X、Y 之间有关联，因此可能的情况是 4-8，这里面有些情况下 X->Y，有些是没有，因此无法得出什么有效的结论；如果 ，基本上锁定是 1-3 中的情况，我们发现这三种情况中 X 都不引起 Y，于是我们能得出结论 X 和 Y 之间没有因果关系。这是错的！

情况 8 也能够引起 ！比如 X->Y 的影响可能会被 U->Y 的影响抵消，这称作 unfaithfulness，这样的情形记做 $\mathcal{B}$ 。举一个粗俗的例子，比如情况 8 中的关系都是确定性的，Y|U = -U, Y|X,U = X+U，于是乎，按照这样的模型生成的 Y 全部等于零，显然估计出来的 。

因此，要想得出结论得出结论 X 和 Y 之间没有因果关系，还必须限定 faithfulness。

$$\begin{aligned} \alpha \neq 0 \quad &\Longrightarrow \quad \theta \text{ can be } 0 \text{ or nonzero (no conclusion)} \\ \alpha = 0 \text{ and faithfulness} \quad &\Longrightarrow \quad \theta = 0 \text{ (no causal effect).} \end{aligned}$$

Notes 后面还讲了，总存在一个 faithful 的分布使得在样本足够多的时候，产生足够大的 type I error。