cours 4
Apprentissage de structure de réseau bayésien

Aix*Marseille université Initiative d'excellence

Master SID — Raisonnement dans l'incertain

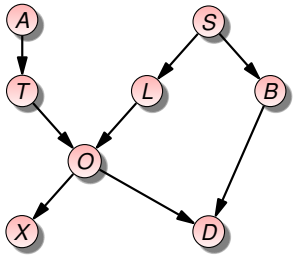
1. Algorithme fondé sur les contraintes

L'algorithme PC – Phase 1 : le squelette

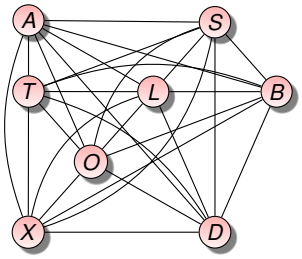
Apprentissage du squelette

1 $\mathcal{G} \leftarrow$ graphe non orienté complet
2 $d \leftarrow 0$ // taille de l'ensemble de conditionnement
3 $SepSet_{XY} \leftarrow \emptyset$ pour tout couple de nœuds X, Y
4 **répéter**
5 **pour chaque** *couple* (X, Y) *t.q.* $X - Y \in \mathcal{G}$ *et* $|\mathbf{Adj}(X)\backslash\{Y\}| \geq d$ **faire**
6 **répéter**
7 Choisir un $\mathbf{Z} \subseteq \mathbf{Adj}(X)\backslash\{Y\}$ t.q. $|\mathbf{Z}| = d$
8 **si** $X \perp\!\!\!\perp_P Y | \mathbf{Z}$ **alors**
9 Supprimer l'arête $X - Y$ de $\mathcal{G}$
10 $SepSet_{XY} \leftarrow \mathbf{Z}$
11 break
12 **jusqu'à** *Tous les* $\mathbf{Z}$ *de taille* d *ont été testés*;
13 $d \leftarrow d + 1$
14 **jusqu'à** $|\mathbf{Adj}(X)| \leq d$ *pour tout nœud* X;

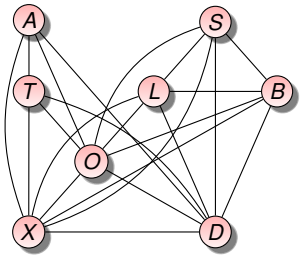
Exemple d'application (1/3)



RB réel



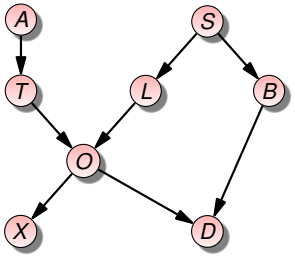
$\mathcal{G}$ complet



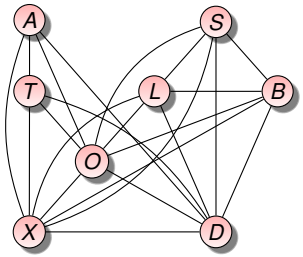
$\perp\!\!\!\perp$ ordre $d = 0$

- $A \perp\!\!\!\perp B$, $A \perp\!\!\!\perp L$, $A \perp\!\!\!\perp S$
- $B \perp\!\!\!\perp T$
- $L \perp\!\!\!\perp T$
- $S \perp\!\!\!\perp T$

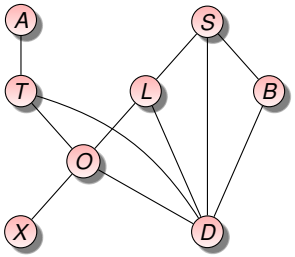
Exemple d'application (2/3)



RB réel



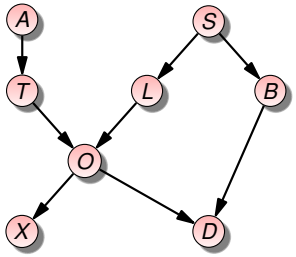
$\perp\!\!\!\perp$ ordre $d = 0$



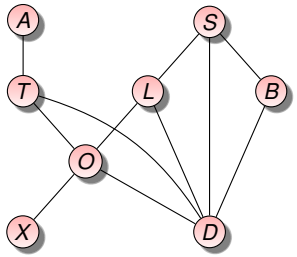
$\perp\!\!\!\perp$ ordre $d = 1$

- $A \perp\!\!\!\perp D | T$, $A \perp\!\!\!\perp O | T$
- $A \perp\!\!\!\perp X | T$, $B \perp\!\!\!\perp L | S$
- $B \perp\!\!\!\perp O | S$, $B \perp\!\!\!\perp X | S$
- $D \perp\!\!\!\perp X | O$, $L \perp\!\!\!\perp X | O$
- $O \perp\!\!\!\perp S | L$, $S \perp\!\!\!\perp X | L$
- $T \perp\!\!\!\perp X | O$

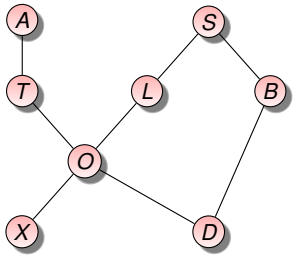
Exemple d'application (3/3)



RB réel



$\perp\!\!\!\perp$ ordre $d = 1$



$\perp\!\!\!\perp$ ordre $d = 2$

- $D \perp\!\!\!\perp L | \{O, B\}$
- $D \perp\!\!\!\perp S | \{O, B\}$
- $D \perp\!\!\!\perp T | \{O, S\}$

L'algorithme PC – Phase 2 : l'orientation (1/2)

Définition

- unshielded triple : triplet $\langle X, Z, Y \rangle$ de nœuds de $\mathcal{G}$ t.q. :
  - $X - Z - Y \in \mathcal{G}$
  - $X - Y \notin \mathcal{G}$
- équivalent non orienté d'une v-structure

Orientation des arêtes

1 // 1. Orientation des v-structures
2 $\mathcal{G}_{PDAG} \leftarrow \mathcal{G}$
3 **pour chaque** *unshielded triple* $\langle X, Z, Y \rangle$ *de* $\mathcal{G}$ **faire**
4 **si** $Z \notin SepSet_{XY}$ **alors**
5 $R0$: dans $\mathcal{G}_{PDAG}$, remplacer $X - Z$ et $Z - Y$ par $X \rightarrow Z$ et $Z \leftarrow Y$

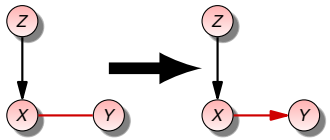
$\Longrightarrow \mathcal{G}_{PDAG}$ = squelette + v-structures = pattern

L'algorithme PC – Phase 2 : les propagations (1/2)

4 règles de propagation :

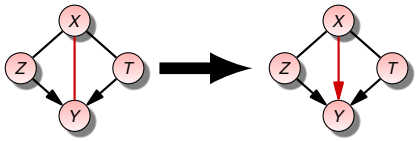
pas de v-structure :

R1 :



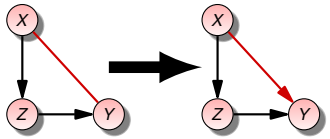
ni circuit ni v-structure :

R3 :



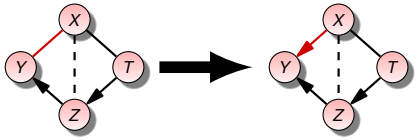
pas de circuit :

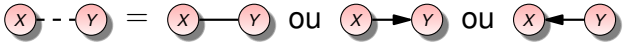
R2 :



ni circuit ni v-structure :

R4 :





L'algorithme PC – Phase 2 : les propagations (2/2)

- CPDAG = completed partially directed acyclic graph
  = représentant de la classe d'équivalence de Markov

Théorème – Orientation soundness – Meek(95)

- Les règles R1 à R4 sont sûres (soundness) :
  pas respectées $\Longrightarrow \exists$ nouvelle v-structure ou un circuit

Théorème – Orientation completeness – Meek(95)

- Appliquer R1, R2, R3 sur un pattern $\Longrightarrow$ CPDAG

Théorème – Completeness with background knowledge – Meek(95)

- Background knowledge $\mathcal{K}$: ensemble d'arcs interdits + ensemble d'arcs oblogatoires
- Appliquer R1 à R4 sur un pattern et orienter les arêtes selon $\mathcal{K} \Longrightarrow$ CPDAG

L'algorithme PC – Phase 2 : l'orientation (2/2)

Orientation des arêtes

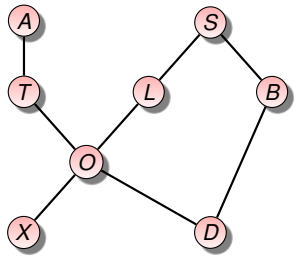
1 // Orientation des v-structures
2 $\mathcal{G}_{PDAG} \leftarrow \mathcal{G}$
3 **pour chaque** *unshielded triple* $\langle X, Z, Y \rangle$ *de* $\mathcal{G}$ **faire**
4 **si** $Z \notin SepSet_{XY}$ **alors**
5 R0 : dans $\mathcal{G}_{PDAG}$, remplacer $X - Z$ et $Z - Y$ par $X \rightarrow Z$ et $Z \leftarrow Y$
6 // Propagations
7 **répéter**
8 **pour chaque** *arête* $X - Y \in \mathcal{G}_{PDAG}$ **faire**
9 **si** $(X - Y)$ *arête rouge d'une règle R1, R2, R3 ou R4* **alors**
10 Orienter l'arête selon la règle
11 **jusqu'à** *ce que plus aucune arête ne puisse être orientée*;

Exemple d'application (1/2)

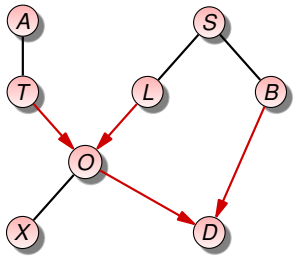
1 **pour chaque** *unshielded triple* $\langle X, Z, Y \rangle$ *de* $\mathcal{G}$ **faire**
2 **si** $Z \notin SepSet_{XY}$ **alors**
3 R0 : dans $\mathcal{G}_{PDAG}$, remplacer $X - Z$ et $Z - Y$ par $X \rightarrow Z$ et $Z \leftarrow Y$

Sepsets :

- $S_{AB} = S_{AL} = S_{AS} = \emptyset$ $S_{AD} = S_{AO} = S_{AX} = \{T\}$
- $S_{BT} = \emptyset$ $S_{BL} = S_{BO} = S_{BX} = \{S\}$
- $S_{DL} = S_{DS} = \{O, B\}$ $S_{DT} = \{O, S\}$ $S_{DX} = \{O\}$
- $S_{LT} = \emptyset$ $S_{LX} = \{O\}$ $S_{OS} = \{L\}$
- $S_{ST} = \emptyset$ $S_{SX} = \{L\}$ $S_{TX} = \{O\}$



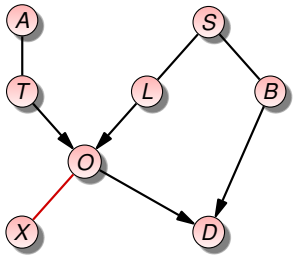
Après phase 1



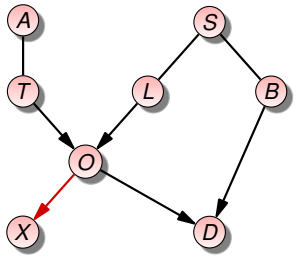
Après *R*0

Exemple d'application (2/2)

1 // Propagation sans rajouter de v-structure
2 **pour chaque** *arête* $(X, Y) \in \mathcal{G}_{PDAG}$ **faire**
3 **si** $(X - Y)$ *arête rouge de R1* $(Z \rightarrow X$ *et* $X - Y)$ **alors**
4 remplacer $X - Y$ par $X \rightarrow Y$



Après *R*0



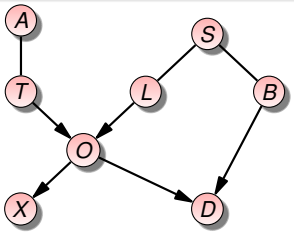
Après *R*1

Résultat : représentant de la classe d'équivalence de Markov

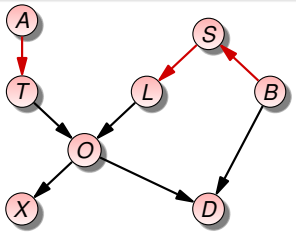
- CPDAG : completed partially directed acyclic graph

Phase 3 : compléter les orientations sans créer de v-structure

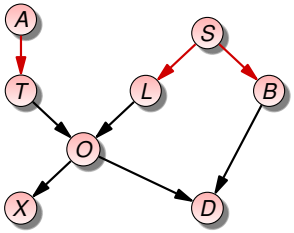
6 possibilités :



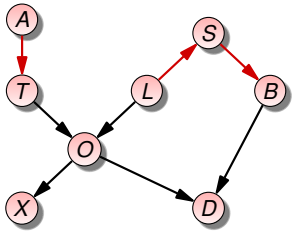
Après $R1$



1ère possibilité



2ème possibilité



3ème possibilité

- 3 autres possibilités similaires mais avec $T \rightarrow A$

Tests d'indépendance conditionnelle (1/2)

- X, Y : 2 variables aléatoires, $\mathbf{Z}$: ensemble de variables
- $N_{xy\mathbf{z}}$: nombre d'occurrences de $(X = x, Y = y, \mathbf{Z} = \mathbf{z})$ dans $\mathbf{D}$
- $N_{x\mathbf{z}} = \sum_{y \in \Omega_Y} N_{xy\mathbf{z}}$ $\quad N_{y\mathbf{z}} = \sum_{x \in \Omega_X} N_{xy\mathbf{z}}$ $\quad N_{\mathbf{z}} = \sum_{x \in \Omega_X} N_{x\mathbf{z}}$

Test du χ^2

$$\chi^2_{statistics}(X, Y|\mathbf{Z}) = \sum_{x \in \Omega_X} \sum_{y \in \Omega_Y} \sum_{\mathbf{z} \in \Omega_\mathbf{Z}} \frac{\left(N_{xy\mathbf{z}} - \frac{N_{x\mathbf{z}} N_{y\mathbf{z}}}{N_\mathbf{z}}\right)^2}{\frac{N_{x\mathbf{z}} N_{y\mathbf{z}}}{N_\mathbf{z}}}$$

- Nb degrés de liberté : $df = (|\Omega_X| - 1) \times (|\Omega_Y| - 1) \times |\Omega_\mathbf{Z}|$
- α : niveau de risque (souvent 5%)
- Si $\chi^2_{statistics}(X, Y|\mathbf{Z}) \leq \chi^2(df, \alpha)$ alors $X \perp\!\!\!\perp Y|\mathbf{Z}$

⚠ Règle usuelle : ne faire le test que si $N_{xy\mathbf{z}} \geq 5$ pour tout $x, y, \mathbf{z}$

Tests d'indépendance conditionnelle (2/2)

Test du G^2

$$G^2_{statistics}(X, Y|\mathbf{Z}) = 2 \sum_{x \in \Omega_X} \sum_{y \in \Omega_Y} \sum_{\mathbf{z} \in \Omega_\mathbf{Z}} N_{xy\mathbf{z}} \ln \frac{N_{xy\mathbf{z}} N_\mathbf{z}}{N_{x\mathbf{z}} N_{y\mathbf{z}}}$$

- Nb degrés de liberté : $df = (|\Omega_X| - 1) \times (|\Omega_Y| - 1) \times |\Omega_\mathbf{Z}|$
- α : niveau de risque (e.g. 5%)
- Si $G^2_{statistics}(X, Y|\mathbf{Z}) \leq \chi^2(df, \alpha)$ alors $X \perp\!\!\!\perp Y|\mathbf{Z}$

- En pratique, tests du G^2 plus robustes que ceux du χ^2

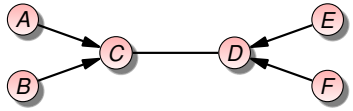
Problèmes de l'algorithme PC

- Résultat dépendant de l'ordre des calculs :

```
1 pour chaque arête X − Y t.q. |Adj(X)\{Y}| ≥ d faire
2     ...
3     Supprimer l'arête X − Y de G
4     ...
```

  $\Longrightarrow$ PC-stable, variante de Colombo et Maathuis (2014)

- $|\mathbf{D}|$ petite $\Longrightarrow$ tests χ^2 et G^2 peu fiables
- Phase 3 : pas d'orientation possible :



  - cause 1 : pas de DAG-faithfulness (relations déterministes ?) Luo (2006), Rodrigues de Morais *et al.* (2008), Mabrouk *et al.* (2014)
  - cause 2 : erreurs dans les tests statistiques
  - cause 3 : présence de variables latentes (non observées)
    $\Longrightarrow$ IC* Verma (1993), FCI Spirtes, Glymour et Scheines (2000)

❷ Apprentissage à base de scores

Apprentissage fondé sur les scores

Meilleure structure : celle qui colle le mieux aux données

$\Longrightarrow$ ❶ vraisemblance : $\mathcal{G}^* = \text{Argmax}_{\mathcal{G}}\, \mathcal{L}(\mathcal{G} : \mathbf{D})$

❷ $\mathcal{G}^*$ = structure choisie avec le moins de « regret »

$\Longrightarrow$ différents scores

Propriétés souhaitables des scores

- **Rasoir d'Occam :**
  Privilégier les $\mathcal{G}$ simples plutôt que complexes
- **Consistance locale :**
  Ajouter un arc « utile » devrait augmenter le score
  Ajouter un arc « inutile » devrait diminuer le score
- **Score équivalence :**
  2 RB Markov-équivalents devraient avoir le même score
- **Décomposition locale :**
  L'ajout/retrait d'un arc $\Longrightarrow$ score mis à jour en ne regardant que la partie de $\mathcal{G}$ autour de l'arc

En route vers Greedy Hill Climbing

Voisinage d'un DAG $\mathcal{G}$

Voisinage de $\mathcal{G}$ = ensemble des graphes $\mathcal{G}'$ t.q. :

- $\mathcal{G}'$ est un DAG
- $\mathcal{G}'$ s'obtient en appliquant à $\mathcal{G}$ un opérateur parmi :
  - l'ajout d'un arc
  - la suppression d'un arc
  - le retournement d'un arc

On note $\mathcal{N}(\mathcal{G})$ le voisinage de $\mathcal{G}$

❶ Parcourir l'espace des DAG en partant d'un graphe $\mathcal{G}_0$

❷ en trouvant dans son voisinage le graphe $\mathcal{G}'$ de score plus élevé

❸ en itérant le processus avec $\mathcal{G}'$ jusqu'à un optimum (local)

$\Longrightarrow$ Algorithme « Greedy Hill Climbing »

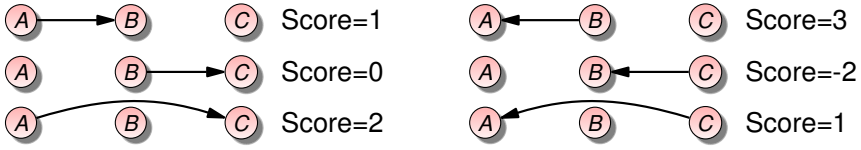
Greedy Hill Climbing

Algorithme d'apprentissage « glouton » :

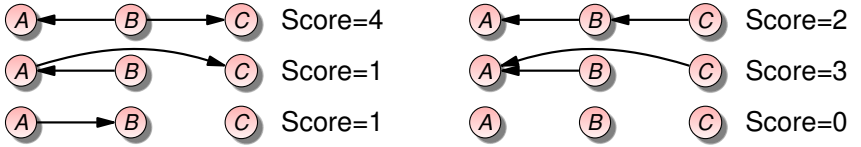
```
1  // étape ❶
2  G_best ← graphe orienté vide (sans arc) // meilleur graphe trouvé
3  sc_best ← Score(G_best) // score du meilleur DAG
4
5  // parcours de l'espace des DAG – étape ❸
6  répéter
7      // recherche du meilleur voisin
8      N ← voisinage de G_best // calcul du voisinage
9      trouvé ← false // meilleur voisin pas encore trouvé
10     // parcours du voisinage – étape ❷
11     pour chaque G' ∈ N faire
12         sc' ← Score(G')
13         si sc' > sc_best alors
14             G_best ← G', sc_best ← sc'
15             trouvé ← true
16 jusqu'à trouvé = false;
17 Retourner G_best // graphe localement optimal
```

Exemple d'application

- Étape 1 : $\mathcal{G}_{best}$ = A B C $sc_{best} = 0$
- Voisinage $\mathcal{N}$:



- Nouveau graphe $\mathcal{G}_{best}$ = A ← B C $sc_{best} = 3$
- Nouveau voisinage $\mathcal{N}$:



- Nouveau graphe $\mathcal{G}_{best}$ = A ← B → C $sc_{best} = 4$
- Nouveau voisinage $\mathcal{N}$:

.....

Le score BD (1/2)

Score BD($\mathcal{G}|\mathbf{D}$) *[Heckerman, Geiger and Chickering (1995)]*

$$\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{q_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ij})}{\Gamma(N_{ij}+\alpha_{ij})} \prod_{k=1}^{r_i} \frac{\Gamma(N_{ijk}+\alpha_{ijk})}{\Gamma(\alpha_{ijk})}$$

- $\Gamma(\cdot)$: généralisation continue de la factorielle

  $\Gamma(n) = (n-1)!$ pour tout $n \in \mathbb{N}^*$

- $\text{Score}_{BD}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}) = \prod_{j=1}^{q_i} \frac{\Gamma(\alpha_{ij})}{\Gamma(N_{ij}+\alpha_{ij})} \prod_{k=1}^{r_i} \frac{\Gamma(N_{ijk}+\alpha_{ijk})}{\Gamma(\alpha_{ijk})}$
- $\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \prod_{i=1}^{n} \text{Score}_{BD}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D})$

Le score BD (2/2)

⚠ En pratique, on calcule plutôt $\log(\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D}))$

Score BD($\mathcal{G}|\mathbf{D}$) *[Heckerman, Geiger and Chickering (1995)]*

- $\log(\text{Score}_{BD}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}))$
  $= \sum_{j=1}^{q_i} \log\Gamma(\alpha_{ij}) - \log\Gamma(N_{ij}+\alpha_{ij}) + \sum_{k=1}^{r_i} \log\Gamma(N_{ijk}+\alpha_{ijk}) - \log\Gamma(\alpha_{ijk})$
- $\log(\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D})) = \sum_{i=1}^{n} \log(\text{Score}_{BD}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}))$

Le score K2

Score K2 *[Cooper et Herskovits (1992)]*

- $\text{Score}_{K2}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \log(\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D}))$ avec :

  $\alpha_{ijk} = 1$ pour tout i, j, k

  $\Longrightarrow$ revient à rajouter 1 dans chaque cellule des tableaux de contingence (de comptage)

  $\Longrightarrow$ revient à rajouter $r_i q_i$ observations dans $\mathbf{D}$

- $\text{Score}_{K2}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{q_i} \left[\log\left(\frac{(r_i-1)!}{(N_{ij}+r_i-1)!} \right) + \sum_{k=1}^{r_i} \log(N_{ijk}!) \right]$
- $\text{Score}_{K2}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \sum_{i=1}^{n} \text{Score}_{K2}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D})$

Exemple d'application (1/2)

$$\text{Score}_{K2}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i),\mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{q_i}\left[\log\left(\frac{(r_i-1)!}{(N_{ij}+r_i-1)!}\right)+\sum_{k=1}^{r_i}\log(N_{ijk}!)\right]$$

A B C

A	B	C
a_1	b_1	c_1
a_1	b_1	c_2
a_1	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_1	c_1

- $\mathbf{D} \Longrightarrow r_i = 2$ pour tout i ($|\Omega_A| = |\Omega_B| = |\Omega_C| = 2$)
- $\mathcal{G} \Longrightarrow q_i = 1$ (pas de parent) et $N_{ij} = |\mathbf{D}| = 7\ \forall i$
- $i = 1$ (A) :

a_1	a_2
3	4

$r_1 = |\Omega_A| = 2$
$\mathbf{Pa}(A) = \emptyset \Longrightarrow q_i = 1$

$$\text{Score}_{K2}(A) = \log\left(\frac{(2-1)!}{(7+2-1)!}\right) + \log(3!) + \log(4!) \approx -5,6348$$

- $i = 2$ (B) :

b_1	b_2
3	4

$\text{Score}_{K2}(B) \approx -5,6348$

- $i = 3$ (C) :

c_1	c_2
4	3

$\text{Score}_{K2}(C) \approx -5,6348$

- $\text{Score}_{K2}(\mathcal{G}) \approx -5,6348 - 5,6348 - 5,6348 = -16.9044$

Exemple d'application (2/2)

$$\text{Score}_{K2}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i),\mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{q_i}\left[\log\left(\frac{(r_i-1)!}{(N_{ij}+r_i-1)!}\right)+\sum_{k=1}^{r_i}\log(N_{ijk}!)\right]$$

A — B C

A	B	C
a_1	b_1	c_1
a_1	b_1	c_2
a_1	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_1	c_1

- $\text{Score}_{K2}(B)$ et $\text{Score}_{K2}(C)$ inchangés $\approx -5,6348$
- $(A|B)$:

	a_1	a_2	N_{ij}
b_1	2	1	3
b_2	1	3	4

$N_{ij} = \sum$ sur chaque ligne

$$\text{Score}_{K2}(A|B) = \log\left(\frac{(2-1)!}{(3+2-1)!}\right) + \log(2!) + \log(1!) \quad \text{(ligne } b_1\text{)}$$
$$+ \log\left(\frac{(2-1)!}{(4+2-1)!}\right) + \log(1!) + \log(3!) \quad \text{(ligne } b_2\text{)}$$
$$\approx -6,1738$$

- $\text{Score}_{K2}(\mathcal{G}) \approx -6,1738 - 5,6348 - 5,6348 = -17.4434$

$\Longrightarrow$ Graphe moins probable que celui du slide précédent

Le score BDeu

- Problème : Score K2 non score-équivalent :
  2 RB Markov-équivalents n'ont pas forcément le même score !

Score BDeu *[Buntine (1991)]*

- $\text{Score}_{BDeu}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \log(\text{Score}_{BD}(\mathcal{G}|\mathbf{D}))$ avec :
  $\alpha_{ijk} = \frac{N'}{r_i q_i}$ pour tout i,j,k $\quad N' = \ll$ *effective sample size* $\gg$
  $\Longrightarrow$ revient à rajouter $\frac{N'}{r_i q_i}$ dans chaque cellule des tableaux de contingence (de comptage)
  $\Longrightarrow$ revient à rajouter N' observations dans $\mathbf{D}$
- $\text{Score}_{BDeu}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i),\mathbf{D})$
  $$= \sum_{j=1}^{q_i}\log\Gamma\left(\frac{N'}{q_i}\right) - \log\Gamma\left(N_{ij}+\frac{N'}{q_i}\right) + \sum_{k=1}^{r_i}\log\Gamma\left(N_{ijk}+\frac{N'}{r_i q_i}\right) - \log\Gamma\left(\frac{N'}{r_i q_i}\right)$$
- $\text{Score}_{BDeu}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \sum_{i=1}^{n}\text{Score}_{BDeu}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i),\mathbf{D})$
- BDeu : score équivalent [Heckerman, Geiger, Chickering (1995)]

Scores issus de la théorie de l'information (1/3)

- Score BD($\mathcal{G}$) : $\int_\Theta P(\mathbf{D}|\mathcal{G},\Theta)\pi(\Theta|\mathcal{G})d\Theta$
  $\Longrightarrow$ vraisemblance moyenne sur {RB de structure $\mathcal{G}$}
  $\Longrightarrow$ moyenne sur tous les paramètres
- Et si on utilisait les paramètres optimaux plutôt que la moyenne ?
  Score($\mathcal{G}$) : $\max_\Theta P(\mathbf{D}|\mathcal{G},\Theta)$
  $\Longrightarrow$ Paramètres qui « collent » le plus aux données
  $\Longrightarrow$ Apprentissage de paramètres par max de vraisemblance

Fondement des scores issus de la théorie de l'information

Scores issus de la théorie de l'information (2/3)

- Optimisation des paramètres de $\mathcal{G}$ par max de vraisemblance
  $\Longrightarrow$ score « log-likelihood »

Score log-likelihood (LL)

- $\text{Score}_{LL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \sum_{i=1}^{n} \text{Score}_{LL}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D})$
- $\text{Score}_{LL}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{q_i} \sum_{k=1}^{r_i} N_{ijk} \log\left(\frac{N_{ijk}}{N_{ij}}\right)$

⚠ En pratique, apprend des graphes trop denses
$\Longrightarrow$ « Sur-apprentissage »
$\Longrightarrow$ Rajouter une pénalité s'il y a trop d'arcs

Scores issus de la théorie de l'information (3/3)

Score MDL (minimum description length)

- $\text{Score}_{MDL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \text{Score}_{LL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) - \frac{1}{2}\log(N)|\mathcal{G}|$
- $|\mathcal{G}| = \sum_{i=1}^{n}(r_i - 1) \times q_i$: nb de paramètres θ_{ijk} à choisir
- $-\frac{1}{2}\log(N)|\mathcal{G}|$: pénalité
  Permet de minimiser la taille mémoire pour stocker le RB

Score BIC (Bayesian Information Criterion)

- S'appuie sur le critère BIC [Schwarz (1978)]
- $\text{Score}_{BIC}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \text{Score}_{MDL}(\mathcal{G}|\mathbf{D})$

Score AIC (Akaike Information Criterion)

- S'appuie sur le critère d'information d'Akaike (1973)
- $\text{Score}_{AIC}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \text{Score}_{LL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) - |\mathcal{G}|$

Exemple d'application (1/2)

$\text{Score}_{MDL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \text{Score}_{LL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) - \frac{1}{2}\log(N)|\mathcal{G}|$ $\quad \text{Score}_{LL}(\mathcal{G}|\mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{q_i}\sum_{k=1}^{r_i} N_{ijk}\log\left(\frac{N_{ijk}}{N_{ij}}\right)$

A	B	C
a_1	b_1	c_1
a_1	b_1	c_2
a_1	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_1	c_1

- $\mathbf{D} \Longrightarrow r_i = 2$, $\mathcal{G} \Longrightarrow q_i = 1$ (pas de parent)
- $i = 1$ (A) :

a_1	a_2	N_{ij}
3	4	7

  N_{ij} = total ligne $= 3 + 4$

  $\text{Score}_{LL}(A) = 3\log\left(\frac{3}{7}\right) + 4\log\left(\frac{4}{7}\right) \approx -4,78$
- $i = 2$ (B) :

b_1	b_2
3	4

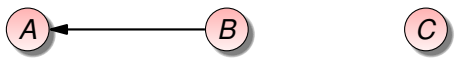
  $\text{Score}_{LL}(B) \approx -4,78$
- $i = 3$ (C) :

c_1	c_2
4	3

  $\text{Score}_{LL}(C) \approx -4,78$
- $|\mathcal{G}| = \sum_{i=1}^{3}(r_i - 1) \times q_i = (1 \times 1) + (1 \times 1) + (1 \times 1) = 3$
- $\text{Score}_{MDL}(\mathcal{G}) \approx -4,78 \times 3 - 0,5 \times \log(7) \times 3 \approx -17.259$

Exemple d'application (2/2)

$\text{Score}_{MDL}(X_i|\mathbf{Pa}(X_i), \mathbf{D}) = \sum_{k=1}^{r_i}\left[N_{ijk}\log\left(\frac{N_{ijk}}{N_{ij}}\right)\right] - \frac{1}{2}\log(N) \times (r_i - 1) \times q_i$



A	B	C
a_1	b_1	c_1
a_1	b_1	c_2
a_1	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_2	c_1
a_2	b_2	c_2
a_2	b_1	c_1

- $\text{Score}_{MDL}(B)$ et $\text{Score}_{MDL}(C) \approx -4,78 - \frac{1}{2}\log(7) \approx -5.753$
- $(A|B)$:

	a_1	a_2	N_{ij}
b_1	2	1	3
b_2	1	3	4

  $N_{ij} = \sum$ sur chaque ligne

  $\text{Score}_{MDL}(A|B) = 2 \times \log\left(\frac{2}{3}\right) + 1 \times \log\left(\frac{1}{3}\right)$ (ligne b_1)
  $+ 1 \times \log\left(\frac{1}{4}\right) + 3 \times \log\left(\frac{3}{4}\right)$ (ligne b_2)
  $- \frac{1}{2}\log(7) \times 1 \times 2 \approx -6,105$ (pénalité)
- $\text{Score}_{MDL}(\mathcal{G}) \approx -6,105 - 5.753 - 5.753 = -17,611$

  $\Longrightarrow$ Graphe moins probable que celui du slide précédent

Bibliographie

- Akaike, H. (1973) « Information theory and an extension of the maximum likelihood principle », Proceedings of the 2nd International Symposium on Information Theory, 267–281
- Buntime W. (1991) « Theory refinement on Bayesian networks », Proceedings of Uncertainty in Artificial Intelligence, 52–60
- Colombo D. et Maathuis M.H. (2014) « Order-Independent Constraint-Based Causal Structure Learning », Journal of Machine Learning Research, 15 :3921–3962
- Geiger D. et Heckerman D. (1997) « A Characterization of the Dirichlet Distribution through Global and Local Parameter Independence », The Annals of Statistics, 25(3) :1344–1369
- Heckerman D., Geiger D. et Chickering D. (1995) « Learning Bayesian Networks : The Combination of Knowledge and Statistical Data », Machine Learning, 20 :197–243

Bibliographie

- Luo W. (2006) « Learning Bayesian networks in semi-deterministic systems », Proceedings of the Canadian Conference on Artificial Intelligence, 230–241
- Mabrouk A., Gonzales C., Jabet-Chevalier K. et Chojnaki E. (2014) « An Efficient Bayesian Network Structure Learning Algorithm in the Presence of Deterministic Relations », Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence, 567–572
- Meek C. (1995) « Causal inference and causal explanation with background knowledge », Proceedings of the Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, 403—410
- Pearl J. et Verma T. (1991) « A theory of inferred causation », Proceedings of the 2nd International Conference on Knowledge Representation and Reasoning, 441–452

Bibliographie

- Rodrigues de Morais, S. Aussem, A. et Corbex M. (2008) « Handling almost-deterministic relationships in constraint-based Bayesian network discovery : Application to cancer risk factor identification », Proceedings of the European Symposium on Artificial Neural Networks, 101–106
- Schwarz, G.E. (1978) « Estimating the dimension of a model », Annals of Statistics, 6(2) :461–464
- Spirtes E., Glymour C. et Scheines R. (2000) Causation, Prediction and Search, 2nd edition, Springer-Verlag
- Verma T. (1993) « Graphical aspects of causal models », Technical report R-191, UCLA, Computer Science Department