

JFRB 2018

*Journées Francophones sur les Réseaux Bayésiens
et les Modèles Graphiques Probabilistes*

31 mai - 1 juin 2018

Toulouse, France

jfrb2018.sciencesconf.org



ProbaYes
Mastering Uncertainty

GdR BiM

MA
TOULOUSE

IMABS

INRA
SCIENCE & IMPACT

Actes des Neuvièmes Journées Francophones sur les Réseaux Bayésiens et les Modèles Graphiques Probabilistes

JFRB 2018

31 Mai-1 Juin 2018, INRA, Toulouse, France

Présidents du comité de programme

Simon de Givry, INRA – MIAT

Nathalie Peyrard, INRA – MIAT

Préface

Les modèles graphiques probabilistes constituent des modèles de connaissance et de raisonnement dans l'incertain. Le principe de base des modèles graphiques probabilistes est d'encoder de façon compacte une distribution de probabilités sur l'ensemble des variables associées aux nœuds du graphe sous forme d'un produit de distributions locales de probabilités conditionnelles. Le nombre croissant de travaux méthodologiques ou appliqués sur ces modèles (en particulier les réseaux bayésiens) depuis une vingtaine d'années atteste de leur intérêt. Ainsi leurs domaines d'applications sont nombreux et variés : robotique, bioinformatique, imagerie, écologie...

Ces journées bisannuelles se déroulent sur deux jours et rassemblent les chercheurs académiques, industriels et autres acteurs autour des modèles graphiques probabilistes, ou plus généralement autour des modèles graphiques de représentation et de raisonnement dans l'incertain. C'est l'occasion pour la communauté d'échanger et débattre à propos des différentes problématiques et verrous identifiés, des méthodes et modèles mis en œuvre et des applications traitées ou potentielles.

Neuvième édition de la série, les JFRB 2018 à Toulouse succèdent à celles de Clermont Ferrand (2016), Paris (2014), Kerkenah en Tunisie (2012), Nantes (2010), Lyon (2008), Valenciennes (2006), Rouen (2003) et Paris (2001).

Les JFRB ont eu le plaisir de recevoir une vingtaine de soumissions, soit sous forme d'article complet, soit sous forme de résumé court, chacune relue par trois experts du comité de programme. Les thèmes abordés concernent l'apprentissage de structure et de modèles relationnels probabilistes, l'inférence probabiliste et possibiliste, l'optimisation combinatoire et les applications en biologie, écologie, génétique et médecine.

Je remercie les auteurs des articles soumis pour leur participation à cet événement bisannuel témoignant de la vitalité du domaine, nos quatre orateurs invités, les membres du comité de programme et enfin les sponsors : GDR BiM, INRA MIA, IMABS et ProbaYes.

Simon de Givry et Nathalie Peyrard, présidents du comité de programme des JFRB 2018

Comité de programme

Président

Simon de Givry (MIAT, INRA, Toulouse, France)

Co-présidente

Nathalie Peyrard (MIAT, INRA, Toulouse, France)

Nahla Ben Amor (LARODEC, ISG Tunis, Tunis, Tunisie)

Salem Benferhat (CRIL, CNRS, Université d'Artois, Lens, France)

Véronique Delcroix (LAMIH, UVHC, Valenciennes, France)

Ghislaine Gayraud (LMAC, Université de Technologie de Compiègne, France)

Christophe Gonzales (LIP6, UPMC, Paris, France)

Engelbert Mephu Nguifo (LIMOS, CNRS, Université Clermont Auvergne, France)

Grégory Nuel (LPMA, CNRS, UPMC, Paris, France)

Philippe Leray (LS2N, Université de Nantes, France)

Ahmed Rebai (LPCMC, CBS, Sfax, Tunisie)

Régis Sabbadin (MIAT, INRA, Toulouse, France)

Mathieu Serrurier (IRIT, Université Paul Sabatier, Toulouse, France)

Pierre-Henri Willemin (LIP6, UPMC, Paris, France)

Table des matières

Information theoretic model selection criteria in score-based Bayesian network structure learning.....	1
<i>Tomi Silander, Naver Labs Europe, Grenoble – présentation invitée</i>	
A Bayesian estimator for the multifractal analysis of multivariate images.....	2
<i>Herwig Wendt, IRT - ENSEIHT, University of Toulouse – présentation invitée</i>	
Maximizing the likelihood under incomplete data.....	3
<i>Inés Couso, University of Oviedo, Spain – présentation invitée</i>	
Exact and Approximate Inference in Graphical Models – Variable Elimination and beyond.....	4
<i>Régis Sabbadin, MIAT, INRA Toulouse – présentation invitée</i>	
Réseaux Bayésiens à Densités Conditionnelles.....	5
<i>Santiago Cortijo, Marvin Lasserre and Christophe Gonzales</i>	
Fast Bayesian Network Structure Learning using Quasi-Determinism Screening.....	14
<i>Thibaud Rahier, Sylvain Marié, Stephane Girard and Florence Forbes</i>	
Réseau Bayésien Dynamique étiqueté pour l'apprentissage de réseau écologique d'arthropodes dans les cultures....	25
<i>Etienne Auclair, Nathalie Peyrard, Régis Sabbadin and Bohan David</i>	
Generalizations of Markov blankets to understand dependence.....	34
<i>Victor Cohen and Axel Parmentier</i>	
Tractable relaxations for Limited Memory Influence Diagrams.....	35
<i>Victor Cohen, Axel Parmentier, Guillaume Obozinski, Vincent Leclerc and Joseph Salmon</i>	
Computing derivatives of the likelihood using polynomial arithmetic in Bayesian networks. Application to genetic linkage analysis.....	36
<i>Alexandra Lefebvre and Grégory Nuel</i>	
Arbres de Jonction Hiérarchiques pour l'inférence de génotypes dans les pedigrees complexes.....	38
<i>Damien Leroux and Sylvain Jasson</i>	
A DBN model to study the influence of epidemic surveillance networks on phytosanitary treatments.....	39
<i>Nathalie Peyrard, Régis Sabbadin, Marie-Josée Cros, Sabrina Gaba, Jean-Noël Aubertot and Xavier Reboud</i>	
Réseaux Bayésiens Dynamiques : Méthodologie pour l'inférence sur les Schémas de Mode d'Action en Toxicologie..	47
<i>Wang Gao, Frédéric Bois and Ghislaine Gayraud</i>	
Apport des approches phylogénétiques pour expliquer l'origine des génomes mosaïques, exemple chez le Riz.....	58
<i>Charles-Elie Rabier, Vincent Berry, Fabio Pardi and Céline Scornavacca</i>	
Révision d'une base d'informations personnelles avec gestion du vieillissement des informations.....	59
<i>Salma Chaieb, Véronique Delcroix, Ali Benmrad, Brahim Hnich and Emmanuelle Grislin</i>	
Classification non supervisée de graphes orientés : SBM ou LBM?.....	68
<i>Gilles Celeux and Yann Vasseur</i>	
Inferring causal directed acyclic structures in gene regulatory networks using MC3 and the Laplace approximation..	76
<i>Gregory Nuel, Gilles Monneret, Pascal Fieth, Alexander Hartmann, Andrea Rau and Florence Jaffrézic</i>	
Apprentissage de modèles relationnels probabilistes à partir d'ontologies de processus de transformation.....	77
<i>Melanie Munch</i>	
Optimisation de la compilation de règles métier probabilistes à l'aide de PRM.....	85
<i>Gaspard Ducamp, Pierre-Henri Wuillemin, Christophe Gonzales, Philippe Bonnard and Christian De Sainte Marie</i>	
Un réseau bayésien pour le diagnostic des compétences non-techniques en situation critique.....	93
<i>Yannick Bourrier, Francis Jambon, Catherine Garbay and Vanda Luengo</i>	
Prévention de la chute chez les personnes âgées: d'une modélisation ontologique du domaine au raisonnement avec réseau bayésien.....	101
<i>Fatma Essghaier, Véronique Delcroix and Kathia de Oliveira</i>	
Bibliothèque de calcul « ProBT » dédiée aux Réseaux Bayésiens et la modélisation probabiliste.....	104
<i>Kamel Mekhnacha, ProBayes</i>	

Étude de la complexité de l'inférence dans des réseaux possibilistes.....	105
<i>Salem Benferhat, Amélie Levray and Karim Tabia</i>	
Recherche complète à voisinages variables guidée par la décomposition arborescente pour la minimisation d'énergie dans les modèles graphiques.....	107
<i>David Allouche, A. Ouali, S. de Givry, S. Loudni, Y. Lebbah, F. Eckhardt and L. Loukil</i>	
Contrainte Pondérée d'Acyclicité pour l'Apprentissage de Réseaux Bayésiens.....	114
<i>Fulya Ural, Simon de Givry and George Katsirelos</i>	

Information theoretic model selection criteria in score-based Bayesian network structure learning

Tomi Silander

Naver Labs Europe, Grenoble, France

tomi.silander@naverlabs.com

Invited Talk

Recent development on exact structure learning algorithms allows us to concentrate on studying the Bayesian network structure evaluation criteria. In my talk I will briefly revisit the different senses of quality of Bayesian network structures, review the status of hyper-parameter sensitivity of the recently proposed model selection criteria and discuss merits and problems of hyper-parameter free, information theoretic approaches to Bayesian network structure learning.

A Bayesian estimator for the multifractal analysis of multivariate images

Herwig Wendt
IRIT - ENSEEIHT, University of Toulouse, France
herwig.wendt@irit.fr

Invited Talk

The mathematical framework of multifractal analysis enables to study image texture via the fluctuations of the pointwise regularity of image intensity and has been successfully used in a large panel of applications of very different natures. Yet, despite past successes, the accurate estimation of multifractal parameters still remains a challenging task and requires the availability of images of large size. This work studies a Bayesian framework that makes use of several jointly recorded data components in multivariate images (i.e., collections of image patches, temporal or spectral sequences of images,...) to improve estimation of multifractal parameters. It relies on a statistical model for the logarithm of wavelet leaders that comprises a gamma Markov random field joint prior which acts as a regularizer and counterbalances the statistical variability induced by small image size. The model is specifically designed to lead to an efficient sampler for the estimation of multifractal parameters and yields excellent results on multivariate images with potentially many components.

Recent development on exact structure learning algorithms allows us to concentrate on studying the Bayesian network structure evaluation criteria. In my talk I will briefly revisit the different senses of quality of Bayesian network structures, review the status of hyper-parameter sensitivity of the recently proposed model selection criteria and discuss merits and problems of hyper-parameter free, information theoretic approaches to Bayesian network structure learning.

Maximizing the likelihood under incomplete data

Inés Couso
University of Oviedo, Spain
couso@uniovi.es

Invited Talk

Maximum likelihood is a standard approach to estimate a probability distribution (inside a more or less large parametric family) that best fits a given dataset. However, when datasets are incomplete or contain imprecise data, a major issue is to properly define the likelihood function to be maximised. In this talk, we compare several possible reasonable generalisations of the likelihood function to this case. We consider situations where the coarsening process that transforms the true outcome into an incomplete observation can be modelled by means of a family of conditional probability distributions. We illustrate with examples how ignoring this coarsening process may produce misleading estimations.

Exact and Approximate Inference in Graphical Models – Variable Elimination and beyond

Régis Sabbadin
MIAT – UR 875, INRA Toulouse
regis.sabbadin@inra.fr

Invited Talk

In this (supposedly) didactic talk, I will introduce the framework of stochastic graphical models, which is widely used for uncertain knowledge representation and handling. This very general model encompasses most well-known finite-domain variables stochastic reasoning frameworks: (Hidden) Markov chains, Bayesian networks, Markov fields... I will introduce the classical inference problems associated to this framework (marginals computation, maximum a posteriori). Then, I will describe the basic exact (variable elimination) and approximate (loopy belief propagation) inference algorithms used to solve these problems.

This presentation is based on the following article:

N. Peyrard et al. *Exact and approximate inference in graphical models: variable elimination and beyond*, 2017. [<https://arxiv.org/pdf/1506.08544.pdf>]

Réseaux Bayésiens à Densités Conditionnelles

Santiago Cortijo, Marvin Lasserre, Christophe Gonzales

Sorbonne Université, CNRS, Laboratoire d'Informatique de Paris 6, LIP6.

F-75005 Paris, France

prenom.nom@lip6.fr

RÉSUMÉ. Nous proposons dans cet article un modèle graphique probabiliste fondé sur les réseaux bayésiens permettant de raisonner avec des variables aléatoires continues et discrètes. Il s'agit d'une variante du modèle ctdBN (Cortijo, Gonzales, 2018). Nous montrons qu'il préserve le bon compromis entre précision et complexité de l'inférence atteint par les ctdBNs, tout en résolvant des problèmes soulevés par l'apprentissage de structure des ctdBNs. Dans cet article, nous introduisons notre nouveau modèle et présentons un algorithme d'apprentissage de sa structure.

ABSTRACT. We propose in this paper a Bayesian network-based probabilistic graphical model for reasoning over both continuous and discrete random variables. Our model is a variant of the ctdBN model (Cortijo, Gonzales, 2018). We show that it preserves the good trade-off between faithfulness and inference complexity reached by ctdBNs, while addressing some issues raised by ctdBN structure learning. In the paper, we introduce our new model and present an algorithm for its structure learning.

MOTS-CLÉS : Réseaux bayésiens, Variables aléatoires continues, inférence, apprentissage

KEYWORDS: Bayesian network, Continuous random variable, inference, learning

DOI:10.3166/RIA.0.1-9 © 2018 Lavoisier

1. Introduction

Depuis leur introduction dans les années 80, les réseaux bayésiens (RB) sont devenus l'un des modèles les plus populaires pour manipuler les incertitudes (Pearl, 1988). De par leur définition, ils souffrent cependant d'une limitation importante: ils ne peuvent gérer que des variables discrètes. Malheureusement, dans la réalité, il n'est pas rare que certaines variables soient de nature continue. Aussi, d'autres modèles ont été proposés dans la littérature, tels que les modèles gaussiens conditionnels (CG) et leurs extensions aux variables discrètes (Lauritzen, 1992 ; Lerner *et al.*, 2001), les mixtures d'exponentielles tronquées (MTE) (Moral *et al.*, 2001 ; Cobb *et al.*, 2006 ; Rumí, Salmerón, 2007), les mixtures de fonctions de bases tronquées (MTBF) (Langseth *et al.*, 2012), les mixtures de polynômes (MOP) (Shenoy, West, 2011) et les réseaux bayésiens à densités conditionnelles tronquées (ctdBN) (Cortijo, Gonzales, 2018).

Modéliser des distributions de probabilité mixtes nécessite un compromis entre pouvoir expressif du modèle et complexité des algorithmes d'apprentissage et d'inférence. Ainsi, les modèles CG ne sont pas très *expressifs* dans la mesure où les dépendances entre variables qu'ils encodent sont uniquement linéaires. En revanche, ils sont très efficaces en termes d'inférence et d'apprentissage. À l'inverse, les MTEs, MTBFs et MOPs peuvent être très précis mais au prix d'une inférence complexe. Entre ces deux extrêmes, les ctdBNs, qui combinent un RB classique avec des densités conditionnelles tronquées, présentent un bon compromis entre expressivité et complexité d'inférence. En effet, ils sont presque aussi expressifs qu'un MTE mais leur inférence est aussi rapide que celle des modèles CG. Leur principal défaut réside dans l'apprentissage conjoint de leur structure et des discrétisations nécessaires aux densités tronquées, qui engendre des effets de bord indésirables. Afin de pallier cela, nous introduisons ici une variante des ctdBNs, composée d'un RB classique et de densités de probabilité conditionnelles non tronquées, nommée “réseau bayésien à densités conditionnelles” (cdBN). Outre leurs bonnes propriétés en apprentissage, les cdBNs sont plus expressifs que les ctdBNs, tout en offrant des inférences aussi rapides.

L'article est organisé de la manière suivante : dans la prochaine section, nous rappelons le modèle des ctdBNs et expliquons pourquoi, dans le cadre de l'apprentissage conjoint de structure et de discrétisation, l'extension des scores classiques tels que K2, BDeu, BIC, *etc.*, aux distributions mixtes est nécessairement vouée à l'échec. Pour éviter cet écueil, dans la troisième section, nous introduisons les cdBNs et proposons un algorithme d'apprentissage de structure ainsi qu'un algorithme d'inférence et sa complexité. Le lien entre ctdBNs et cdBNs est également discuté. Enfin, une conclusion et des perspectives sont proposées.

2. Modèle ctdBN et verrous d'apprentissage

Dans la suite de l'article, les lettres capitales (possiblement indicées) représentent des variables aléatoires et les symboles en caractères gras des ensembles. Afin de discriminer variables continues et discrètes, nous notons \hat{X}_i une variable continue et X_i une variable discrète. Sans perte de généralité, pour n'importe quelle variable \hat{X}_i , X_i

représente son équivalent discrétisé. Nous notons respectivement $\mathbf{X}_D = \{X_1, \dots, X_d\}$, $\mathbf{\hat{X}}_C = \{\hat{X}_{d+1}, \dots, \hat{X}_n\}$ et $\mathbf{X}_C = \{X_{d+1}, \dots, X_n\}$ l'ensemble des variables discrètes ne provenant pas de discrétisation, l'ensemble des variables continues et l'ensemble des variables discrétisées. Enfin, quels que soient la variable X ou l'ensemble de variables \mathbf{Y} ou $\mathbf{\hat{Y}}$, Ω_X (resp. Ω_Y ou $\Omega_{\hat{Y}}$) correspond à son domaine.

Dans les ctdBNs, les variables aléatoires continues sont d'abord discrétisées :

DÉFINITION 1 (Discrétisation). — Une discrétisation d'une variable \hat{X}_i est une fonction $\Delta_{\hat{X}_i} : \Omega_{\hat{X}_i} \rightarrow \{0, \dots, g_i\}$ définie par une suite croissante de g_i cutpoints $\{t_1, t_2, \dots, t_{g_i}\} \subset \Omega_{\hat{X}_i}$ telle que :

$$\Delta_{\hat{X}_i}(\hat{x}_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } \hat{x}_i < t_1, \\ k & \text{si } t_k \leq \hat{x}_i < t_{k+1}, \text{ pour tout } k \in \{1, \dots, g_i - 1\} \\ g_i & \text{si } \hat{x}_i \geq t_{g_i} \end{cases}$$

Ainsi, la variable discrétisée X_i correspondant à \hat{X}_i possède un domaine fini $\{0, \dots, g_i\}$ et, après discrétisation de toutes les variables continues, l'incertitude sur l'ensemble des variables discrètes et discrétisées peut être représentée par un RB classique. L'idée clef des ctdBNs est d'augmenter la précision du modèle en incorporant dans ce RB des densités conditionnelles tronquées capturant l'information contenue dans les variables aléatoires \hat{X}_i qui est perdue dans leur version discrétisée X_i :

DÉFINITION 2 (Densité conditionnelle tronquée). — Soit \hat{X}_i une variable aléatoire continue. Soit $\Delta_{\hat{X}_i}$ une discrétisation de \hat{X}_i avec l'ensemble de cutpoints $\{t_1, t_2, \dots, t_{g_i}\}$. Enfin, soit X_i une variable aléatoire discrète avec pour domaine $\Omega_{X_i} = \{0, \dots, g_i\}$. Une densité conditionnelle tronquée est une fonction $f(\hat{X}_i|X_i) : \Omega_{\hat{X}_i} \times \Omega_{X_i} \mapsto \mathbb{R}_0^+$ satisfaisant les propriétés suivantes :

1. $f(\hat{x}_i|x_i) = 0$ pour tout $x_i \in \Omega_{X_i}$ et $\hat{x}_i \notin [t_{x_i}, t_{x_i+1})$ avec, par abus de notation $t_0 = \inf \Omega_{\hat{X}_i}$ et $t_{g_i+1} = \sup \Omega_{\hat{X}_i}$;

2. l'équation suivante est vérifiée : $\int_{t_{x_i}}^{t_{x_i+1}} f(\hat{x}_i|x_i) d\hat{x}_i = 1$, pour tout $x_i \in \Omega_{X_i}$.

La définition d'un ctdBN en découle directement :

DÉFINITION 3 (ctdBN). — Un ctdBN est un couple (\mathcal{G}, θ) où :

1. $\mathcal{G} = (\mathbf{X}, \mathcal{A})$ est un graphe dirigé acyclique,
2. $\mathbf{X} = \mathbf{X}_D \cup \mathbf{X}_C \cup \mathbf{\hat{X}}_C$,
3. \mathcal{A} est un ensemble d'arcs tel que chaque nœud $\hat{X}_i \in \mathbf{\hat{X}}_C$ n'a aucun enfant et exactement un parent correspondant à X_i .
4. Enfin, $\theta = \theta_D \cup \theta_C \cup \hat{\theta}_C$, où $\theta_D = \{P(X_i|\mathbf{Pa}(X_i))\}_{i=1}^d$ et $\theta_C = \{P(X_i|\mathbf{Pa}(X_i))\}_{i=d+1}^n$ sont l'ensemble des tables de probabilités conditionnelles des variables discrètes et discrétisées X_i sachant leurs parents $\mathbf{Pa}(X_i)$ dans \mathcal{G} , et $\hat{\theta}_C = \{f(\hat{X}_i|X_i)\}_{i=d+1}^n$ est l'ensemble des densités conditionnelles tronquées des variables aléatoires continues de $\mathbf{\hat{X}}_C$ sachant leur version discrétisée.

Le ctdBN encode la distribution de probabilité mixte sur \mathbf{X} comme le produit des éléments dans θ .

Dans (Cortijo, Gonzales, 2018), il est démontré que les ctdBNs sont fidèles dans le sens où n'importe quelle distribution de probabilité mixte peut être approchée à ϵ près par un ctdBN, et ce quel que soit $\epsilon > 0$. De plus, la Propriété 3 ci-dessus garantit que la complexité de l'inférence probabiliste dans les ctdBNs est identique à celle des RBs définis sur l'ensemble $\mathbf{X}_D \cup \mathbf{X}_C$ des variables discrètes et discrétisées, assurant ainsi des calculs rapides.

Malheureusement, apprendre conjointement par maximum de vraisemblance la structure de modèles basés sur des densités conditionnelles tronquées ainsi que la discrétisation des variables aléatoires continues est, comme nous le montrons ci-dessous, voué à l'échec. Or, c'est ce que font les articles étendant les scores classiques (BDeu, etc.) afin de tenir compte des variables continues (Monti, Cooper, 1998; Friedman, Goldszmidt, 1996). Rappelons que ceux-ci représentent des vraisemblances de structures graphiques $p(\mathcal{G}|\mathcal{D})$, où \mathcal{D} est la base d'apprentissage (discrète). L'apprentissage conjoint de structure graphique et de discrétisation consiste donc à déterminer $(\mathcal{G}^*, \Delta^*) = \text{Argmax}_{\mathcal{G}, \Delta} p(\mathcal{G}, \Delta|\mathcal{D})$, où \mathcal{D} représente la base d'apprentissage non discrétisée et Δ est l'ensemble des discrétisations des variables continues. En supposant que l'échantillon \mathcal{D} est i.i.d., $p(\mathcal{G}, \Delta|\mathcal{D})$ s'exprime via la formule de Bayes sous la forme $p(\mathcal{D}|\mathcal{G}, \Delta) = \int_{\theta} \prod_{j=1}^N p(\mathbf{x}^{(j)}|\mathcal{G}, \theta, \Delta) \pi(\theta|\mathcal{G}, \Delta) d\theta$, où N est le nombre d'enregistrements dans \mathcal{D} , $\mathbf{x}^{(j)}$ est le j -ème enregistrement et $\pi(\theta|\mathcal{G}, \Delta)$ est un *a priori* sur les paramètres θ du modèle graphique. En exploitant la factorisation de p selon \mathcal{G} , le score d'une structure \mathcal{G} d'un ctdBN est donc :

$$p(\mathcal{D}|\mathcal{G}, \Delta) = \int_{\theta} \prod_{j=1}^N \prod_{i=1}^n P(x_i^{(j)}|\text{Pa}(x_i^{(j)}), \theta, \Delta) \prod_{i=d+1}^n f(\hat{x}_i^{(j)}|x_i^{(j)}, \theta, \Delta) \pi(\theta|\mathcal{G}, \Delta) d\theta.$$

Or, afin de maximiser l'équation ci-dessus, il suffit de choisir n'importe quelle variable continue, disons \hat{X}_{i_0} , de la discrétiser de manière arbitraire, excepté pour un intervalle de discrétisation $[t_k, t_{k+1})$ rendu arbitrairement petit mais contenant au moins un élément $\hat{x}_{i_0}^{(j)}$ de la base de donnée \mathcal{D} . Par définition, f est une densité tronquée, donc $\int_{t_k}^{t_{k+1}} f(\hat{x}_{i_0}|x_{i_0}^{(j)}, \theta, \Delta) d\hat{x}_{i_0} = 1$. L'intervalle $[t_k, t_{k+1})$ étant arbitrairement petit, l'intégrale ne peut être égale à un que si la densité $f(\hat{x}_{i_0}|x_{i_0}^{(j)}, \theta, \Delta)$ est arbitrairement grande. Par conséquent, peu importe la structure \mathcal{G} , la discrétisation ci-dessus de \hat{X}_{i_0} implique que $p(\mathcal{D}|\mathcal{G}, \Delta)$ tend vers $+\infty$. Il est donc impossible d'apprendre conjointement des structures et des discrétisations raisonnables par maximum de vraisemblance. Ce problème se rencontre lorsqu'on utilise le score proposé dans (Monti, Cooper, 1998). Dans (Friedman, Goldszmidt, 1996), les auteurs contournent ce problème en ajoutant à leur score MDL un terme fondé sur l'entropie appelé $DL_{\Lambda}(\Lambda)$ qui, lorsqu'on l'examine attentivement, se révèle ne pas être de nature MDL. En effet, l'information qu'il encode peut être significativement compressée en utilisant d'autres schémas d'encodage. Mais ce terme contrebalance l'impact de $f(\hat{x}_{i_0}^{(j)}|x_{i_0}^{(j)}, \theta, \Delta)$ et fait tendre les discrétisations vers des discrétisations uniformes.

3. Réseaux bayésiens à Densités Conditionnelles

Dans cette section, nous proposons une variante du modèle ctdBN qui évite l'inconvénient mentionné dans la section précédente. L'idée clé est simple: substituer les densités *tronquées* par des densités non-tronquées. Cela conduit au modèle suivant:

DÉFINITION 4 (Réseaux bayésiens à Densités Conditionnelles (cdBN)). — *La définition d'un cdBN est exactement la même que celle d'un ctdBN sauf que, dans la Propriété 4, $\hat{\theta}_C = \{f(\hat{X}_i|X_i)\}_{i=d+1}^n$ est l'ensemble des densités conditionnelles non tronquées des variables aléatoires continues de \hat{X}_C sachant leur contrepartie discrétisée. Autrement dit, pour n'importe quel $x_i \in \Omega_{X_i}$, $f(\hat{X}_i|x_i) : \Omega_{\hat{X}_i} \mapsto \mathbb{R}_0^+$ est tel que $\int_{\hat{x}_i \in \Omega_{\hat{X}_i}} f(\hat{x}_i|x_i) d\hat{x}_i = 1$.*

La Figure 1 montre un exemple de cdBN : les cercles en pointillés représentent les variables continues. Remarquons qu'elles sont seulement liées à leur contrepartie « discrétisée ». Le point clé dans les cdBNs réside dans le fait que, contrairement aux ctdBNs, chaque fonction de densité conditionnelle est définie sur l'ensemble du domaine de définition de \hat{X}_i . Ainsi, il n'y a plus de discrétisation, le modèle s'apparente plus à une mixture de fonctions de densité. C'est cette caractéristique qui garantit que les fonctions de score peuvent bien être définies pour les cdBNs.

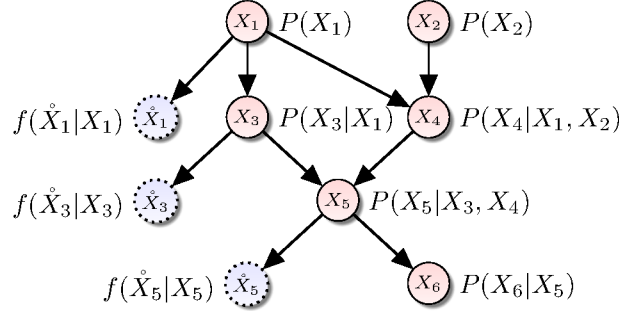


FIGURE 1. Un cdBN.

PROPOSITION 5. — *Un cdBN est une représentation compacte d'une distribution de probabilité mixte.*

PROPOSITION 6. — *Soit $\Omega_D = \prod_{i=1}^d \Omega_{X_i}$, $\Omega_C = \prod_{i=d+1}^n \Omega_{X_i}$ et $\hat{\Omega}_C = \prod_{i=d+1}^n \hat{\Omega}_{\hat{X}_i}$ les domaines joints des variables discrètes, discrétisées et continues. Soit $p : \Omega_D \times \hat{\Omega}_C \mapsto \mathbb{R}$ une distribution de probabilité mixte, Lipschitz par rapport aux variables continues de \hat{X}_C , c'est-à-dire qu'il existe une constante $M > 0$ telle que, pour tout couple (\hat{x}, \hat{y}) d'éléments de $\Omega_D \times \hat{\Omega}_C$ tel que $x_i = y_i$ pour tout $i \in \{1, \dots, d\}$, on a $|p(\hat{x}) - p(\hat{y})| \leq M \|\hat{x} - \hat{y}\|$, où $\|\hat{x} - \hat{y}\|$ représente la norme L2 du vecteur $(\hat{x} - \hat{y})$. Alors, pour tout $\epsilon \in]0, 1[$, il existe un cdBN $\mathcal{B} = (\mathcal{G}, \theta)$ dont l'ensemble des nœuds est $\mathbf{X} = \mathbf{X}_D \cup \mathbf{X}_C \cup \hat{\mathbf{X}}_C$ et qui approche p à ϵ près, c'est-à-dire que \mathcal{B} représente une distribution de probabilité mixte $q : \Omega_D \times \Omega_C \times \hat{\Omega}_C \mapsto \mathbb{R}$*

telle que, pour tout $(y, \hat{x}) \in \Omega_D \times \hat{\Omega}_C$, on a $|q(y, x, \hat{x}) - p(y, \hat{x})| \leq \epsilon$, où x est la contrepartie discrétisée de \hat{x} .

La figure 2 illustre la différence entre les fonctions de densité utilisées dans les ctdBNs et celles utilisées dans les cdBNs : dans un ctdBN, la fonction de densité affectée à l'intervalle de discrétisation $[t_k, t_{k+1})$ ne prend en compte que la distribution des valeurs de la variable continue définie sur cet intervalle; elle ne tient jamais compte des valeurs qui sont en dehors de $[t_k, t_{k+1})$ même si elles sont très proches de cet intervalle. Dans un cdBN, la fonction de densité prend en compte les valeurs dans l'intervalle $[t_k, t_{k+1})$ mais également celles situées à l'extérieur (les parties violettes de la figure). Ces dernières, étant sur les queues de la distribution, auront des valeurs de fonction de densité inférieures à celles dans l'intervalle $[t_k, t_{k+1})$. Ainsi, le modèle cdBN peut être interprété comme une version robuste des ctdBNs par rapport aux discrétisations. En effet, lorsque les ctdBNs et les cdBNs sont exploités pour la prise de décision, la distribution d'intérêt n'est jamais $p(\mathbf{X})$ mais plutôt $p(\mathbf{X}_D, \hat{\mathbf{X}}_C) = \sum_{\mathbf{X}_C} p(\mathbf{X})$, c'est-à-dire que les variables discrétisées non-observées sont marginalisées. Or, après cette sommation, les fonctions de densité deviennent des mixtures de densités. Par exemple, supposons que $p(\mathbf{X}) = P(X_1)f(\hat{X}_1|X_1)$ et que $\Omega_{X_1} = \{0, \dots, g_1\}$. En définissant $\pi_i = P(X_1 = i)$, nous avons $p(\hat{X}_1) = \sum_{i=0}^{g_1} \pi_i f(\hat{X}_1|X_1 = i)$. Comme illustré dans la figure 2.(b), ces mixtures sont généralement assez lisses, de sorte que de petites variations sur les cutpoints t_k dans la discrétisation ont un faible impact sur les distributions $p(\mathbf{X}_D, \hat{\mathbf{X}}_C)$ pour le cdBN. À l'inverse, dans les ctdBNs, de petites variations sur les points de discrétisation peuvent avoir un impact beaucoup plus important sur $p(\mathbf{X}_D, \hat{\mathbf{X}}_C)$ car les mixtures de densités présentent des discontinuités (cf. la figure 2.(a)).

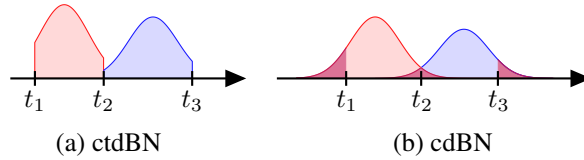


FIGURE 2. Densités pour les ctdBNs v.s. densités pour les cdBNs.

3.1. L'Inférence dans les cdBNs

L'inférence dans les cdBNs est exactement la même que dans les ctdBNs: comme les structures dans les deux modèles sont identiques, l'inférence peut être réalisée en utilisant le même algorithme à base d'arbres de jonction (cf. (Cortijo, Gonzales, 2018) pour plus de détails). La complexité de cet algorithme est la suivante:

PROPOSITION 7. — Soit w la largeur d'arbre (treewidth) de l'arbre de jonction utilisé pour l'inférence et soit k la taille de domaine maximale des variables aléatoires discrètes et discrétisées. Soit n le nombre de variables aléatoires dans le cdBN et soit \bar{I} la complexité moyenne du calcul d'une intégrale d'une fonction de densité conditionnelle $f(\hat{X}_i|x_i)$. Soit \bar{J} la complexité moyenne du calcul d'une mixture de densités

sur une variable \hat{X}_i . La complexité du calcul des distributions marginales a posteriori de toutes les variables aléatoires dans un cdBN est alors en $O(nk(k^w + \bar{I} + \bar{J}))$.

3.2. Apprentissage de cdBN

L'avantage principal des cdBNs par rapport aux ctdBNs réside dans leur apprentissage structurel à partir des données. Comme nous l'avons déjà vu, les densités tronquées utilisées par les ctdBNs ne permettent pas d'adapter les scores classiques utilisés dans l'apprentissage de la structure des RBs comme K2, BDeu, BIC, *etc.* Heureusement, avec les cdBNs, ces scores peuvent être adaptés ainsi que l'algorithme d'apprentissage. Pour le comprendre, considérons le cdBN de la figure 1 appris à partir d'une base de données $\hat{\mathcal{D}}$. Dans cette base de données, seules les variables $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3, \hat{X}_4, \hat{X}_5, \hat{X}_6$ sont observées, les variables X_1, X_3, X_5 sont cachées. Donc, l'apprentissage de cdBNs consiste à apprendre un modèle avec des variables cachées. Cela suggère simplement d'utiliser l'EM structurel (SEM) proposé dans (Friedman, 1998; Peña *et al.*, 2000). Ceci est résumé dans l'algorithme 1.

Input : Une base de données $\hat{\mathcal{D}}$

Output : un cdBN $\mathcal{B} = (\mathcal{G}, \Theta)$

```

1  $t \leftarrow 0$ 
2  $\mathcal{G}_0 \leftarrow$  une structure initiale de cdBN
3  $\Theta_0 \leftarrow$  Paramètres MAP de  $\mathcal{G}_0$  étant donné  $\hat{\mathcal{D}}$ 
4 repeat
    // E step
5   foreach  $\mathcal{G}$  dans le voisinage  $\mathbf{N}(\mathcal{G}_t)$  de  $\mathcal{G}_t$  do
6     Affecter score  $Sc(\mathcal{G}) = \log p(\mathcal{G}|\hat{\mathcal{D}})$  à  $\mathcal{G}$ 
    // M step
7    $\mathcal{G}_{t+1} \leftarrow \text{Argmax}_{\mathcal{G} \in \mathbf{N}(\mathcal{G}_t)} Sc(\mathcal{G})$ 
8    $\Theta_{t+1} \leftarrow$  Paramètres MAP de  $\mathcal{G}_{t+1}$  étant donné  $\hat{\mathcal{D}}$ 
9    $t \leftarrow t + 1$ 
10 until  $\mathcal{G}_{t+1} = \mathcal{G}_t$ ;
11 return cdBN  $\mathcal{B} = (\mathcal{G}_t, \Theta_t)$ 
```

Algorithme 1 : Apprentissage de cdBNs avec SEM.

Certains détails doivent être précisés à propos de cet algorithme. Pour cela, supposons qu'une base de données $\hat{\mathcal{D}}$ contienne N enregistrements, chacun étant défini sur un ensemble de variables aléatoires discrètes $\mathbf{X}_D = \{X_1, \dots, X_d\}$ et un ensemble de variables aléatoires continues $\hat{\mathbf{X}}_C = \{\hat{X}_{d+1}, \dots, \hat{X}_n\}$. Supposons que la base de données est complète, c'est-à-dire que, pour chaque enregistrement, les valeurs de toutes les variables aléatoires sont observées. Enfin, soit $\mathbf{X}_C = \{X_{d+1}, \dots, X_n\}$ et $\mathbf{X} = \mathbf{X}_D \cup \mathbf{X}_C \cup \hat{\mathbf{X}}_C$ l'ensemble des variables latentes et l'ensemble de toutes les variables de notre modèle. Sur la ligne 2 de l'algorithme, un graphe initial est fourni. Habituellement, dans le contexte des RBs, il s'agit d'un graphe sans arc. Ici, l'équivalent

pour les cdBNs est un graphe $\mathcal{G}_0 = (\mathbf{X}, \mathcal{A}_0)$, où $\mathcal{A}_0 = \{(X_i, \dot{X}_i) : i = d+1, \dots, n\}$. Sur la ligne 3, les paramètres optimaux des densités conditionnelles ainsi que des probabilités marginales des X_i doivent être déterminés. Tous les X_i , $i \leq d$, sont indépendants des autres variables et leur détermination par MAP (maximum *a posteriori*) est donc bien connue, notamment lorsque l'*a priori* sur les paramètres de leur CPT est une distribution de Dirichlet (Heckerman *et al.*, 1995). Tous les couples (X_i, \dot{X}_i) , $i = d+1, \dots, n$ sont mutuellement indépendants, donc les paramètres de leurs distributions peuvent être déterminés indépendamment. Pour les variables \dot{X}_i , nous devons d'abord supposer que les densités conditionnelles appartiennent à une famille de distributions donnée. Supposons que cette famille soit celle des distributions normales $\mathcal{N}(\mu, \tau^{-1})$, où $\tau = 1/\sigma^2$ est la précision. Il est bien connu que leur distribution conjuguée est la distribution Gamma-Normale $NT(\mu_0, \lambda_0, \alpha_0, \beta_0)$, qui peut être utilisée comme *a priori* sur les paramètres des densités conditionnelles. Maintenant, notons que $\sum_{X_i} P(X_i) f(\dot{X}_i | X_i)$ est une mixture de distributions normales, dont les paramètres optimaux pour f sont déterminés par MLE (estimation de Maximum de vraisemblance) comme ceux d'une mixture de Gaussiennes et, par MAP, comme une mixture de fonctions Gamma-Normale. Cela peut être effectué efficacement par un algorithme EM classique.

Sur la Ligne 6, $Sc(\mathcal{G}) = \log p(\mathcal{G} | \dot{\mathcal{D}})$ doit être calculé. Par le théorème de Bayes, nous avons que $Sc(\mathcal{G}) = \log p(\dot{\mathcal{D}} | \mathcal{G}) + \log(p(\mathcal{G})/p(\mathcal{D}))$. En supposant un *a priori* uniforme sur toutes les structures graphiques, le deuxième terme est constant et n'a pas besoin d'être pris en compte. Malheureusement, il n'existe pas de forme analytique pour calculer $\log p(\dot{\mathcal{D}} | \mathcal{G})$ car certaines variables sont cachées. Dans l'algorithme SEM, ce terme est approché de la manière suivante: Soit $\mathbf{X}_D^{(m)}, \dot{\mathbf{X}}_C^{(m)}$ (resp. $\mathbf{x}_C^{(m)}$) les variables observées (resp. non observées) dans le m -ème enregistrement de la base de données, et soit $\mathbf{X}_C^{(D)} = \{\mathbf{X}_C^{(m)}\}_{m=1}^N$, $\mathbf{X}_D^{(D)} = \{\mathbf{X}_D^{(m)}\}_{m=1}^N$ et $\dot{\mathbf{X}}_C^{(D)} = \{\dot{\mathbf{X}}_C^{(m)}\}_{m=1}^N$, l'union des variables sur l'ensemble de *tous* les enregistrements. Alors, le score SEM affecté à \mathcal{G} est donné par:

$$\begin{aligned} Sc(\mathcal{G}) &\approx \sum_{\mathbf{x}_C^{(D)}} p(\mathbf{x}_C^{(D)} | \mathbf{x}_D^{(D)}, \dot{\mathbf{x}}_C^{(D)}, \mathcal{G}_t, \boldsymbol{\Theta}_t) \times \log p(\mathbf{x}_D^{(D)}, \mathbf{x}_C^{(D)}, \dot{\mathbf{x}}_C^{(D)} | \mathcal{G}). \\ &\approx \sum_{\mathbf{x}_C^{(D)}} P(\mathbf{x}_C^{(D)} | \mathbf{x}_D^{(D)}, \dot{\mathbf{x}}_C^{(D)}, \mathcal{G}_t, \boldsymbol{\Theta}_t) \times \\ &\quad \left[\sum_{i=1}^n Sc(X_i | \mathbf{Pa}(X_i)) + \sum_{i=d+1}^n Sc(\dot{X}_i | X_i) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

où le dernier terme correspond au score de chaque nœud du cdBN conditionnellement à ses parents. La partie qui correspond à $Sc(X_i | \mathbf{Pa}(X_i))$, $i = 1, \dots, n$, ne concerne que les variables discrètes et peut par conséquent être calculée exactement comme dans (Friedman, 1998). La partie correspondant à $Sc(\dot{X}_i | X_i)$ est exactement la même pour n'importe quelle structure candidate \mathcal{G} et peut donc être ignorée. L'apprentissage des cdBNs peut alors être effectué en utilisant SEM.

4. Conclusion

Un nouveau modèle graphique appelé *cdBN* a été introduit dans cet article pour représenter de manière compacte des distributions de probabilité mixtes. L'avantage de ce modèle par rapport à d'autres modèles similaires réside dans son mécanisme d'inférence rapide mais aussi dans la possibilité d'un apprentissage efficace de sa structure. Une étude plus quantitative des *cdBNs*, notamment au niveau de l'algorithme d'apprentissage, est prévue pour de prochains travaux.

Bibliographie

- Cobb B., Shenoy P., Rumí R. (2006). Approximating probability density functions in hybrid Bayesian networks with mixtures of truncated exponentials. *Statistics and Computing*, vol. 16, n° 3, p. 293–308.
- Cortijo S., Gonzales C. (2018). On conditional truncated densities Bayesian networks. *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 92, p. 155–174.
- Friedman N. (1998). The Bayesian structural EM algorithm. In *Proc. of uai*, p. 129–138.
- Friedman N., Goldszmidt M. (1996). Discretizing continuous attributes while learning Bayesian networks. In *proc. of icml*, p. 157–165.
- Heckerman D., Geiger D., Chickering D. M. (1995). Learning Bayesian networks: The combination of knowledge and statistical data. *Machine Learning*, vol. 20, n° 3, p. 197–243.
- Langseth H., Nielsen T., Rumí R., Salmerón A. (2012). Mixtures of truncated basis functions. *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 53, n° 2, p. 212–227.
- Lauritzen S. (1992). Propagation of probabilities, means and variances in mixed graphical association models. *Journal of the American Statistical Association*, vol. 87, p. 1098–1108.
- Lerner U., Segal E., Koller D. (2001). Exact inference in networks with discrete children of continuous parents. In *Proc. of uai*, p. 319–328.
- Monti S., Cooper G. (1998). A multivariate discretization method for learning Bayesian networks from mixed data. In *Proc. of uai*, p. 404–413.
- Moral S., Rumí R., Salmerón A. (2001). Mixtures of truncated exponentials in hybrid Bayesian networks. In *Proc. of ecsqaru*, vol. 2143, p. 156–167.
- Pearl J. (1988). *Probabilistic reasoning in intelligent systems: Networks of plausible inference*. Morgan Kaufman.
- Peña J., Lozano J., Larrañaga P. (2000). An improved Bayesian structural EM algorithm for learning Bayesian networks for clustering. *Pattern Recognition Letters*, vol. 21, n° 8, p. 779–786.
- Rumí R., Salmerón A. (2007). Approximate probability propagation with mixtures of truncated exponentials. *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 45, n° 2, p. 191–210.
- Shenoy P., West J. (2011). Inference in hybrid Bayesian networks using mixtures of polynomials. *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 52, n° 5, p. 641–657.

Fast Bayesian Network Structure Learning using Quasi-Determinism Screening

Thibaud Rahier^{1,2}, Sylvain Marie², Stephane Girard¹,
Florence Forbes¹

1. Univ. Grenoble Alpes, Inria, CNRS, Grenoble INP¹, LJK
38000 Grenoble, France

2. Schneider Electric, Analytics and Artificial Intelligence Team
38000 Grenoble, France

ABSTRACT. Learning the structure of Bayesian networks from data is a NP-Hard problem that involves optimization over a super-exponential sized space. In this work, we show that in most real life datasets, a number of the arcs contained in the final structure can be pre-screened at low computational cost with a limited impact on the global graph score. We formalize the identification of these arcs via the notion of quasi-determinism, and propose an associated algorithm that narrows the structure learning task down to a subset of the original variables. We show, on diverse benchmark datasets, that this algorithm exhibits a significant decrease in computational time and complexity for only a little decrease in performance score.

RÉSUMÉ. L'apprentissage de structure de réseaux bayésiens à partir de données est un problème NP-difficile. Dans cet article, nous montrons que dans la plupart des jeux de données réels, un certain nombre d'arcs contenus dans la structure finale peut être pré-apprié à faible coût sans avoir d'impact important sur le score final. Nous formalisons l'identification de ces arcs par la notion de quasi-déterminisme, et proposons un algorithme associé qui réduit la tâche d'apprentissage de structure à un sous-ensemble des variables originales. Nous montrons, sur divers jeux de données de référence, que cet algorithme permet une diminution significative du temps de calcul et de la complexité des graphes appris pour seulement une légère diminution du score de performance.

KEYWORDS: Bayesian networks, structure learning, screening, quasi determinism, loglikelihood, combinatorial optimization.

MOTS-CLÉS: réseaux Bayésiens, apprentissage de structure, quasi déterminisme, log-vraisemblance, optimisation combinatoire.

1. Institute of Engineering Univ. Grenoble Alpes

1. Introduction

Bayesian networks are probabilistic graphical models that present interest both in terms of knowledge discovery and density estimation. Learning Bayesian networks from data has been however proven to be NP-Hard by Chickering (1996).

There has been extensive work on tackling the ambitious problem of Bayesian network structure learning from observational data. In this paper, we focus on score-based structure learning: these algorithms rely on the definition of a network score, then on the search for the best-scoring structure among all possible directed acyclic graphs (DAGs).

Meanwhile, data itself may contain determinism, for example in the fields of cancer risk identification (Morais *et al.* (2008)) or nuclear safety (Mabrouk *et al.* (2014)). Moreover, data is increasingly collected and generated by software systems whether in social networks, smart buildings, smart grid, smart cities or the internet of things (IoT) in general (Koo *et al.* (2016)). These systems in their vast majority rely on relational data models or lately on semantic data models (El Kaed *et al.* (2016)) which cause deterministic relationships between variables to be more and more common in datasets.

After reminding the background of Bayesian network structure learning (section 2), we propose the *quasi deterministic screening* algorithm (section 3). We then illustrate, using a benchmark dataset, that this algorithm is quicker and learns sparser structures than state of the art methods, for only a small decrease in performance score (section 4).

A more detailed version of this work, including theoretical results and proofs, as well as experiments on a wider range of datasets, is available in Rahier *et al.* (2018).

2. Bayesian network structure learning

2.1. Bayesian networks

Let $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ be a n -tuple of categorical random variables with respective value sets $Val(X_1), \dots, Val(X_n)$. The distribution of \mathbf{X} is denoted by, $\forall \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in Val(\mathbf{X})$,

$$p(\mathbf{x}) = P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n).$$

For $I \subset \llbracket 1, n \rrbracket$, we define $\mathbf{X}_I = \{X_i\}_{i \in I}$, and the notation $p(\cdot)$ and $p(\cdot|\cdot)$ is extended to the marginals and conditionals of any subset of variables: $\forall (\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_J) \in Val(\mathbf{X}_{I \cup J})$, $p(\mathbf{x}_I|\mathbf{x}_J) = P(\mathbf{X}_I = \mathbf{x}_I | \mathbf{X}_J = \mathbf{x}_J)$.

Moreover, we suppose that D is a dataset containing M *i.i.d.* instances of (X_1, \dots, X_n) .

All quantities empirically computed from D will be written with a $.^D$ exponent (e.g. p^D refers to the empirical distribution with respect to D). Finally, D_I refers to the restriction of D to the observations of \mathbf{X}_I .

A Bayesian network is an object $\mathcal{B} = (G, \theta)$ where

- $G = (V, A)$ is a directed acyclic graph (DAG) structure with V the set of nodes and $A \subset V \times V$ the set of arcs. We suppose $V = \llbracket 1, n \rrbracket$ where each node $i \in V$ is associated with the random variable X_i , and $\pi^G(i) = \{j \in V \text{ s.t. } (j, i) \in A\}$ is the set of i 's parents in G .

- $\theta = \{\theta_i\}_{i \in V}$ is a set of parameters. Each θ_i defines the local conditional distribution $P(X_i | \mathbf{X}_{\pi(i)})$.

More precisely, $\theta_i = \{\theta_{x_i | \mathbf{x}_{\pi(i)}}\}$ where for $i \in V$, $x_i \in \text{Val}(X_i)$ and $\mathbf{x}_{\pi(i)} \in \text{Val}(\mathbf{X}_{\pi(i)})$,

$$\theta_{x_i | \mathbf{x}_{\pi(i)}} = p(x_i | \mathbf{x}_{\pi(i)}).$$

A Bayesian network $\mathcal{B} = (G, \theta)$ encodes the following factorization of the distribution of \mathbf{X} : for $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \text{Val}(\mathbf{X})$,

$$p(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n p(x_i | \mathbf{x}_{\pi^G(i)}) = \prod_{i=1}^n \theta_{x_i | \mathbf{x}_{\pi^G(i)}}.$$

Such a factorization notably implies that *each variable is independent of its non-descendants given its parents*.

2.2. Score-based approach to Bayesian network structure learning

Suppose we have a *scoring* function $s : \text{DAG}_V \rightarrow \mathbb{R}$, where DAG_V is the set of all possible DAG structures with node set V . Score-based Bayesian network structure learning comes down to solving the following combinatorial optimization problem:

$$G^* \in \underset{G \in \text{DAG}_V}{\text{argmax}} s(G). \quad (1)$$

It can be shown that $2^{\frac{n(n-1)}{2}} \leq |\text{DAG}_V| \leq 2^{n(n-1)}$ where $|V| = n$. There are therefore $2^{\mathcal{O}(n^2)}$ possible DAG structures containing n nodes: the size of DAG_V is said to be super-exponential in $|V|$.

The Max Log-Likelihood score

Most scoring functions used in practice are based on the likelihood function. The most straightforward being the Max log-likelihood (MLL) score: for a given DAG structure $G \in \text{DAG}_V$, we define the MLL score of G wrt D as:

$$s^{MLL}(G : D) = \max_{\theta \in \Theta_G} l(\theta : D).$$

where $l(\theta : D) = \log(p_\theta(D))$ is the log-likelihood of θ given D and where Θ_G is the set of all θ 's such that $\mathcal{B} = (G, \theta)$ is a Bayesian network.

The MLL score is straightforward and intuitive, but is maximized by complete DAGs. To solve this problem, one can either constrain the structure space (*e.g.* simply by restricting the maximum number of parents per nodes, or using more advanced methods as the MMHC algorithm introduced by Tsamardinos *et al.* (2006)), or use a score that expresses a goodness-of-fit vs complexity tradeoff, such as BIC (Schwarz *et al.* (1978)) or BDe (Heckerman *et al.* (1995)).

3. Structure learning with quasi-determinism screening

3.1. Quasi-determinism

Our idea is to narrow the structure learning problem down to a subset of the original variables: the roots of a (quasi-)deterministic forest, in order to significantly decrease the overall computation time. This is what we call (quasi-)determinism screening.

DEFINITION 1. — ϵ -**quasi-determinism** (ϵ -**qd**) *Given a dataset D containing observations of variables X_i and X_j , the relationship $X_i \rightarrow X_j$ is ϵ -qd wrt D iff $H^D(X_j|X_i) \leq \epsilon$.*

where $H^D(X_i|X_j) = - \sum_{x_i, x_j} p^D(x_i, x_j) \log(p^D(x_i|x_j))$ is the empirical Shannon entropy. In the particular case where $\epsilon = 0$, we talk about *determinism* instead of *quasi-determinism*

We then define (quasi-)deterministic DAGs and forests as follows (the parameter ϵ is implicitly fixed in these two definitions).

DEFINITION 2. — **(Quasi-)Deterministic DAG wrt D**

$G \in \text{DAG}_V$ is said to be (quasi-)deterministic with respect to D iff $\forall i \in V$ s.t. $\pi^G(i) \neq \emptyset$, $\mathbf{X}_{\pi^G(i)} \rightarrow X_i$ is (quasi-)deterministic wrt D .

DEFINITION 3. — **(Quasi-)Deterministic forest wrt D**

$F \in \text{DAG}_V$ is said to be a (quasi-)deterministic forest with respect to D iff

$F = \bigcup_{k=1}^p T_k$, where T_1, \dots, T_p are p disjoint (quasi-)deterministic trees wrt $D_{V_{T_1}}, \dots, D_{V_{T_p}}$ respectively and s.t. $\bigcup_{k=1}^p V_{T_k} = V$.

where \cup is the canonical union for graphs: $G \cup G' = (V_G \cup V_{G'}, A_G \cup A_{G'})$.

We show in Rahier *et al.* (2018) that a deterministic forest is the subgraph of an optimal DAG with respect to the MLL score, as stated in the following proposition. For a given forest F , we define the notation $R(F) = \{i \in V \mid \pi^F(i) = \emptyset\}$ to designate the set of F 's roots (the union of the roots of each of its trees).

PROPOSITION 4. — Suppose F is a deterministic forest wrt D . Let $G_{R(F)}^*$ be a solution of the structure learning optimization problem (1) for $\mathbf{X}_{R(F)}$ and the MLL score i.e.

$$s^{MLL}(G_{R(F)}^* : D_{R(F)}) = \max_{G \in \text{DAG}_{R(F)}} s^{MLL}(G : D_{R(F)}).$$

Then, $G^* = F \cup G_{R(F)}^*$ is a solution of (1) for \mathbf{X} , i.e.

$$s^{MLL}(G^* : D) = \max_{G \in \text{DAG}_V} s^{MLL}(G : D).$$

Assumptions of Proposition 4 are always formally verified: if there is no determinism in the dataset D , then $R(F) = V$, and every tree T_k is formed of a single root node. In that case, solving problem (1) for $G_{R(F)}^*$ is the same as solving it for G^* . We are obviously interested in the case where $|R(F)| < n$, as this enables us to focus on a smaller structure learning problem while still having the guarantee to learn the optimal Bayesian network with regards to the MLL score.

Proposition 4, associated with the fact that forests are sparse DAGs, shows that deterministic forests are very promising with regards to the fit-complexity tradeoff (typically evaluated by scores such as BDe or BIC). Extending this intuition to ϵ -quasi-determinism (presented in Definition 1), we now propose the *quasi-determinism screening* approach to Bayesian network structure learning.

3.2. Quasi-determinism screening algorithm

Algorithm 1 details how to find the simplest ϵ -qd forest F_ϵ from a dataset D and a threshold ϵ . Here *simplest* refers to the complexity in terms of number of parameters.

This algorithm takes for input:

- D : a dataset containing M observations of \mathbf{X} ,
- ϵ : a threshold for quasi-determinism.

3.3. Learning Bayesian networks using quasi-determinism screening

We now present Algorithm 2 (*qds-BNSL*), which uses quasi-determinism screening to accelerate Bayesian network structure learning. This algorithm takes as input:

- D : a dataset containing M observations of \mathbf{X} ,
- ϵ : a threshold for quasi-determinism,
- *sota-BNSL*: a state of the art structure learning algorithm, taking for input a dataset, and returning a Bayesian network structure.

Algorithm 1 Quasi-determinism screening (qds)

Input: D, ϵ

- 1: Compute empirical conditional entropy matrix $\mathbb{H}^D = (H^D(X_i|X_j))_{1 \leq i, j \leq n}$
- 2: **for** $i = 1$ to n **do** *#identify the set of potential ϵ -qd parents for each i*
- 3: compute $\pi_\epsilon(i) = \{j \in \llbracket 1, n \rrbracket \setminus \{i\} \mid \mathbb{H}_{ij}^D \leq \epsilon\}$
- 4: **for** $i = 1$ to n **do** *#check for cycles in ϵ -qd relations*
- 5: **if** $\exists j \in \pi_\epsilon(i)$ s.t. $i \in \pi_\epsilon(j)$ **then**
- 6: **if** $\mathbb{H}_{ij}^D \leq \mathbb{H}_{ji}^D$ **then**
- 7: $\pi_\epsilon(j) \leftarrow \pi_\epsilon(j) \setminus \{i\}$
- 8: **else**
- 9: $\pi_\epsilon(i) \leftarrow \pi_\epsilon(i) \setminus \{j\}$
- 10: **for** $i = 1$ to n **do** *#choose the simplest among all potential parents*
- 11: $\pi_\epsilon^*(i) \leftarrow \underset{j \in \pi_\epsilon(i)}{\operatorname{argmin}} |Val(X_j)|$
- 12: Compute forest $F_\epsilon = (V_{F_\epsilon}, A_{F_\epsilon})$ where $V_{F_\epsilon} = \llbracket 1, n \rrbracket$ and $A_{F_\epsilon} = \{(\pi_\epsilon^*(i), i) \mid i \in \llbracket 1, n \rrbracket \text{ s.t. } \pi_\epsilon^*(i) \neq \emptyset\}$

Output: F_ϵ

Algorithm 2 Bayesian network structure learning with quasi deterministic screening (qds-BNSL)

Input: $D, \epsilon, \text{sota-BNSL}$

- 1: Compute F_ϵ by running **Algorithm 1** with input D and ϵ
- 2: Identify $R(F_\epsilon) = \{i \in \llbracket 1, n \rrbracket \mid \pi^{F_\epsilon}(i) = \emptyset\}$, the set of F_ϵ 's roots.
- 3: Compute $G_{R(F_\epsilon)}^*$ by running *sota-BNSL* on $D_{R(F_\epsilon)}$
- 4: $G_\epsilon^* \leftarrow F_\epsilon \cup G_{R(F_\epsilon)}^*$

Output: G_ϵ^*

3.4. Complexity analysis

Let *sota-BNSL* be a state of the art Bayesian network structure learning algorithm and $C_{\text{sota}}(M, n)$ be its complexity. The screening phase of Algorithm 2 implies $\mathcal{O}(Mn^2)$ operations. We can therefore write:

$$C_{\text{Alg2}}(M, n) = \mathcal{O}(Mn^2) + C_{\text{sota}}(M, n_r(\epsilon))$$

where $\forall \epsilon \geq 0$, $n_r(\epsilon) = |R(F_\epsilon)|$ is the number of roots of the forest F_ϵ .

$C_{\text{sota}}(M, n)$ is known to be typically exponential in n for the best exact structure learning algorithms, as those presented by Silander, Myllymäki (2006) or Bartlett, Cussens (2015), and it is expected to be significantly larger than $\mathcal{O}(Mn^2)$ for high-performing heuristics. We therefore expect an important decrease in computational time for Algorithm 2 compared to a state of the art algorithm, as long as $n_r(\epsilon)$ is sufficiently smaller than n .

We now present the experiments we conducted to confirm this intuition.

4. Experiments

4.1. Experimental setup

Data: In this paper we considered the `msnbc` dataset as preprocessed by Davis, Domingos (2010) and available on the UCI repository (Dheeru, Karra Taniskidou (2017)). It is the largest opensource categorical dataset with a small enough number of variables (17), allowing it to be displayed. Results on more than 15 other datasets are available in Rahier *et al.* (2018).

Programmation details and choice of *sota-BNSL*: After carefully evaluating several algorithms implemented in the `bnlearn` R package, we chose to use *Greedy Hill Climbing with 10 random restarts and a 10-state long tabu list* as our state-of-the-art algorithm, as it consistently outperformed other built-in algorithms both in time and performance, in addition to being also used as a benchmark algorithm in the literature, notably by Teyssier, Koller (2005). We now refer to this algorithm as *sota-BNSL*.

Evaluation of algorithms: We evaluated the algorithms using several quantitative measures on the learnt Bayesian networks: *BDeu* score, *CVLL* (Cross-Validated Log-Likelihood score, accounting for the graph’s generalization performance), number of arcs and computation time.

Choice of ϵ for *qds-BNSL*: An approach for choosing ϵ in the case of the *qds-BNSL* algorithm is to pick values for $n_r(\epsilon)$, and manually find the corresponding values for ϵ : for a given dataset and $x \in [0, 1]$, we define $\epsilon_x = n_r^{-1}(\lfloor xn \rfloor)$, the value of ϵ for which the number of roots of the qd forest F_ϵ represents a proportion x of the total number of variables.

Figure 1, Figure 2 and Table 1 present the obtained Bayesian networks and associated evaluation criteria for *sota-BNSL* and *qds-BNSL* with $\epsilon = \epsilon_{0.5}$ (corresponding to a elimination by the screening phase of 50% of the original variables) on the `msnbc` dataset. Quantities displayed in Table 1 are the means of 20 runs with different seeds (all standard deviations are smaller than 0.05).

Choosing ϵ as explained previously is time-efficient but quite ad-hoc. In order to better grasp how the different evaluation criteria depend on ϵ , we display their evolution for different ϵ , ranging from 0 to $\max_i H^D(X_i) \approx 0.6$ in Figures 3 to 6.

In Figure 7, we compare the ‘generalization performance vs number of arcs’ trade-off of the *qds-BNSL* algorithm to two other methods for learning sparse Bayesian networks: restricting the maximum number of parents allowed in *sota-BNSL* (range: 1 to 20), and decreasing the equivalent sample size (ESS) of the BDeu score used in *sota-BNSL*, inspired by Silander *et al.* (2007) (range: 10^{-10} to 5).

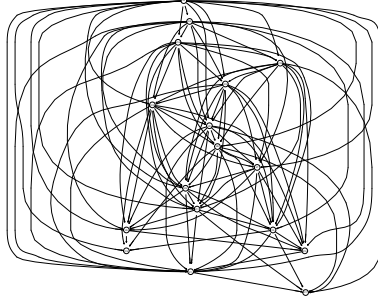
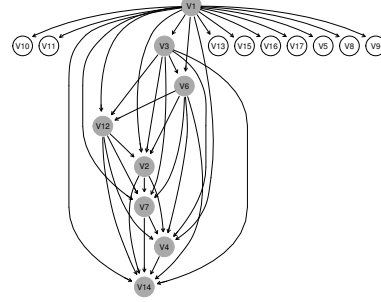
Figure 1: BN returned by *sota-BNSL*BN learnt on dataset 'msrbic' with *sota-BNSL*Figure 2: BN returned by *qds-BNSL*($\epsilon_{0.5}$)BN learnt on dataset 'msrbic' with *qds-BNSL* ($\epsilon_{0.5}$)

Table 1: Comparison of computation time, BDeu (normalized), CVLL (normalized), and number of arcs for the displayed Bayesian networks

	Figure 1 (<i>sota</i>)	Figure 2 (<i>qds</i> $_{\epsilon_{0.5}}$)
t_{run} (sec)	252	36
BDe score	-6.2	-6.5
CVLL score	-6.1	-6.4
Nb arcs	102	37

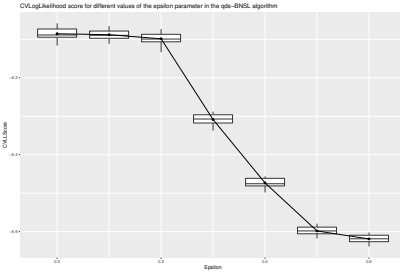
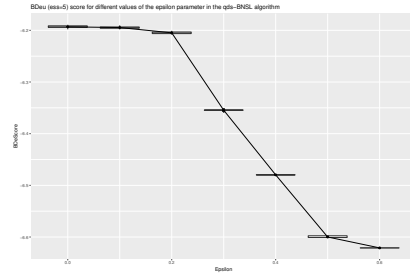
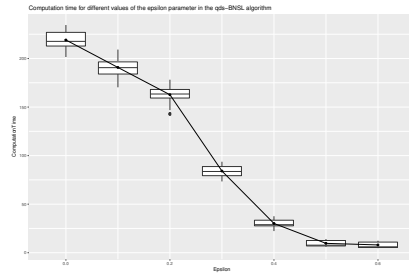
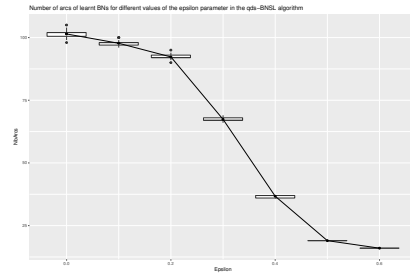
Figure 3: CVLL score vs ϵ Figure 4: BDeu(4ESS = 5) score vs ϵ Figure 5: Computation time vs ϵ Figure 6: Number of arcs vs ϵ 

Figure 7: CVLL score vs number of arcs for 3 approaches to learning sparse Bayesian networks



Looking at Figure 1, Figure 2 and Table 1, we see how after the $\mathbf{qd}_{\epsilon_{0.5}}$ -screening phase, half of the variables (corresponding to the nodes in white) are considered to be sufficiently explained by V_1 . They are therefore not taken into account by *sota-BNSL*, which is run only on the variables corresponding to the nodes in gray.

In the case of *msnbc*, this restriction of the learning problem implies only a small decrease in the final graph’s performance (whether it is measured by the BDeu score or the CVLL score), while being 7 times faster to compute and enabling a significantly better readability (3 times as less arcs in the network).

As we can see on Figures 3 to 6, we could also use a smaller values of ϵ (e.g. smaller than 0.2) to obtain still interesting decreases in computation time with close to no effect on the performance scores.

Results displayed in Figure 7 confirm that the *qds-BNSL* algorithm provides a very good tradeoff between readability (low number of arcs) and generalization performance (high CVLL score) as long as ϵ stays in a reasonable range (corresponding to the upper-right part of the plot).

5. Discussion

As it was expected from a theoretical point of view, the quasi-determinism screening approach to Bayesian network structure learning enables a significant decrease in computational time for a small decrease in graph scores. Moreover, this method provides an interesting tradeoff between readability (number of arcs) and generalization performance (CVLL) compared to other sparsity inducing structure learning algorithms, as long as ϵ is reasonably small compared to the variables’ entropies.

The results are all the more promising that exact empirical determinism is barely present in the datasets used in this paper and its extended version (most of the time, $n_r(\epsilon = 0) = n$). We have also tested our algorithm on industrial descriptive meta-datasets from the IoT domain, for which many variables possess (empirically) deterministic parents because of the underlying relational data schemas. In this context, *qds-BNSL* is up to 20 times faster than *sota-BNSL*, with often better learned graphs in terms of CVLL score. These results are dependent on very specific assumptions, which are however more and more often met by data accessible today, as previously noted.

Our main research perspective is to find a principled way to choose ϵ without running the algorithm several times all the way through. This would save us important amounts of time, and prevent us from trying *qds-BNSL* on datasets that do not contain any strong pairwise relationships. Obtaining a bound such as the one presented in Proposition 4 of Rahier *et al.* (2018) seems like a promising way to achieve this goal. However, this bound concerns the MLL score and is far from tight in practice: we are currently searching for tighter bounds on the BDe or the BIC score of the graphs generated by *qds-BNSL*.

Finally, we could generalize our algorithm by making use of the fact that Proposition 4 holds when considering any deterministic DAGs (and not only forests), or by changing our definition of quasi determinism: one could choose the quantity $\frac{H^D(X|Y)}{H^D(X)}$ to describe the strength of the relationship $Y \rightarrow X$, which represents the proportion of X 's entropy that is explained by Y . Moreover, $\frac{H^D(X|Y)}{H^D(X)} \leq \epsilon$ can be rewritten as $\frac{MI^D(X,Y)}{H(X)} \geq 1 - \epsilon$, which gives another insight to quasi-determinism screening: for a given variable X , this comes down to finding a variable Y such that $MI^D(X, Y)$ is high. This is connected to the idea of Chow, Liu (1968), and later Cheng *et al.* (1997), for whom pairwise empirical mutual information is central. In fact, it is quite straightforward to show that under the assumption of the existence of a deterministic tree T , both the algorithm by Chow, Liu (1968) and *qds-BNSL*($\epsilon = 0$) return trees that has the exact same *MLL* score as T . Further investigation of connections between these algorithms is part of our ongoing work.

References

- Bartlett M., Cussens J. (2015). Integer Linear Programming for the Bayesian network structure learning problem. *Artificial Intelligence*, Vol. 1, pp. 1–14.
- Cheng J., Bell D. A., Liu W. (1997). Learning belief networks from data: An information theory based approach. In *Proceedings of the sixth international conference on information and knowledge management*, pp. 325–331.
- Chickering D. M. (1996). Learning Bayesian networks is NP-complete. *Learning from data: Artificial intelligence and statistics V*, Vol. 112, pp. 121–130.
- Chow C., Liu C. (1968). Approximating discrete probability distributions with dependence trees. *IEEE transactions on Information Theory*, Vol. 14, No. 3, pp. 462–467.

- Davis J., Domingos P. (2010). Bottom-up learning of Markov network structure. In *Proceedings of the 27th international conference on machine learning (icml-10)*, pp. 271–278.
- Dheeru D., Karra Taniskidou E. (2017). *UCI machine learning repository*.
- El Kaed C., Leida B., Gray T. (2016). Building management insights driven by a multi-system semantic representation approach. In *Internet of things (wf-iot), 2016 ieee 3rd world forum on*, pp. 520–525.
- Heckerman D., Geiger D., Chickering D. M. (1995). Learning Bayesian networks: The combination of knowledge and statistical data. *Machine Learning*, Vol. 20, No. 3, pp. 197–243.
- Koo D. D., Lee J. J., Sebastiani A., Kim J. (2016). An internet-of-things (iot) system development and implementation for bathroom safety enhancement. *Procedia Engineering*, Vol. 145, pp. 396–403.
- Mabrouk A., Gonzales C., Jabet-Chevalier K., Chojnacki E. (2014). An efficient Bayesian network structure learning algorithm in the presence of deterministic relations. In *Proceedings of the twenty-first european conference on artificial intelligence*, pp. 567–572.
- Morais S. R. de, Aussem A., Corbex M. (2008). Handling almost-deterministic relationships in constraint-based Bayesian network discovery: Application to cancer risk factor identification. In *European symposium on artificial neural networks, esann'08*.
- Rahier T., Marié S., Girard S., Forbes F. (2018, March). *Fast Bayesian Network Structure Learning using Quasi-Determinism Screening*. Retrieved from <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01691217> (working paper or preprint)
- Schwarz G. *et al.* (1978). Estimating the dimension of a model. *The Annals of Statistics*, Vol. 6, No. 2, pp. 461–464.
- Silander T., Kontkanen P., Myllymäki P. (2007). On Sensitivity of the MAP Bayesian Network Structure to the Equivalent Sample Size Parameter. *Proceedings of the Twenty-Third Conference Annual Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-07)*, pp. 360–367.
- Silander T., Myllymäki P. (2006). A simple approach for finding the globally optimal Bayesian network structure. *Networks*, pp. 445–452.
- Teyssier M., Koller D. (2005). Ordering-based search: A simple and effective algorithm for learning Bayesian networks. In *Proceedings of the Twenty-first Conference on Uncertainty in AI (UAI)*, pp. 584–590.
- Tsamardinos I., Brown L. E., Aliferis C. F. (2006). The max-min hill-climbing Bayesian network structure learning algorithm. *Machine Learning*, Vol. 65, No. 1, pp. 31–78.

Réseau Bayésien Dynamique étiqueté pour l'apprentissage de réseau écologique d'arthropodes dans les cultures

Etienne Auclair¹, David Bohan², Nathalie Peyrard¹, Régis Sabbadin¹

¹MIAT, UR875, INRA. F-31320 Castanet-Tolosan, France

²UMR 1210 Biologie et Gestion des Adventices, INRA. BP 86510, Dijon, France

RÉSUMÉ. Un réseau écologique représente l'ensemble des interactions entre les différentes espèces d'un écosystème. Parmi les réseaux d'intérêt, on peut citer les réseaux écologiques renseignant sur les interactions entre les espèces vivantes de parcelles cultivées. La connaissance de tels réseaux peut être très utile dans la connaissance de la biodiversité et la gestion des parcelles cultivées. Cependant, la connaissance de la structure de ces réseaux est rarement complète. Dans cet article, nous décrivons l'apprentissage de réseau écologique d'arthropodes dans des parcelles expérimentales au Royaume-Uni à partir de l'information de la présence/absence des espèces au cours du temps. La dynamique de ces espèces est modélisée par un réseau bayésien dynamique dit "étiqueté", qui intègre des connaissances à priori sur le comportement écologique des espèces pour réduire le nombre de paramètres du modèle. L'apprentissage de la structure de ce réseau se fait par un algorithme à base de score alternant une phase d'estimation des paramètres et d'apprentissage de la structure. Un modèle à blocs stochastiques permet également d'intégrer la connaissance à priori du réseau afin de guider la recherche d'un réseau écologique.

MOTS-CLÉS : Réseau bayésien dynamique, réseau écologique d'arthropodes, modèle à blocs stochastiques

DOI:10.3166/RIA.32.1-9 © 2018 Lavoisier

1. Introduction

Connaître les interactions entre les différentes espèces vivantes d'un écosystème en permet une meilleure compréhension et une gestion plus efficace (McDonald-Madden *et al.*, 2016). L'ensemble de ces interactions est appelé un réseau écologique. Un réseau écologique bien connu est le réseau trophique, regroupant les relations proies/prédateurs entre les espèces d'un écosystème. La connaissance de la structure d'un réseau écologique permet de mieux comprendre la biodiversité d'un milieu naturel, et son impact sur l'écosystème (Pocock *et al.*, 2012). Cela permet aussi la prise en compte des interactions entre espèces pour la gestion de ressources naturelles vivantes dans des environnements comme des zones de pêche ou des parcelles cultivées (Sainsbury *et al.*, 2000). Cependant, connaître la structure exacte d'un réseau écologique est une tâche complexe. Cette tâche peut se résoudre par l'utilisation d'outils issus de la statistique et de l'intelligence artificielle (Faisal *et al.*, 2010). Il s'agit souvent d'utiliser des données génétiques ou d'abondance d'espèces et d'en étudier les corrélations et les dépendances. Ces données peuvent parfois être dynamiques, donnant une informations supplémentaire. Dans des parcelles expérimentales au Royaume-Uni, la présence de différentes espèces d'arthropodes a été relevée à deux dates différentes, avant et après récolte. Ces données permettent de mieux connaître la biodiversité à l'intérieur de ces champs et d'apprendre les relations trophiques entre ces espèces (Bell *et al.*, 2010; Bohan *et al.*, 2005). Cependant, les réseaux appris à l'aide de ces données ne comportent que des relations proie/prédateur et ne prennent pas en compte la dynamique temporelle des espèces observées. Nous souhaitons apprendre les diverses interactions entre ces espèces d'arthropodes en utilisant un modèle dynamique combiné à des connaissances expertes sur les espèces observées. L'apprentissage de ces interactions permet de construire plusieurs réseaux écologiques selon les cultures des parcelles afin d'en comparer les structures. Nous comparons également les différences entre les interactions apprises par notre modèle dynamique avec celles obtenues par d'autres méthodes sur ces données (Bohan *et al.*, 2011).

2. Données écologiques et modélisation

Les données utilisées recensent des arthropodes piégés dans différentes parcelles expérimentales au Royaume-Uni. Cette étude a été effectuée sur 66 parcelles de betterave, 59 parcelles de maïs, 67 parcelles de colza d'été et 65 parcelles de colza d'hiver. Une partie de ces parcelles est composée de cultures OGM résistantes aux herbicides. Des pièges sont installés dans chaque parcelle afin de prélever les arthropodes piégés. Deux prélèvements ont été effectués : le premier avant récolte, le second après récolte. Nous avons donc, pour chaque parcelle, des données d'abondance d'arthropodes sur deux périodes temporelles successives. Nous avons également accès à quelques informations sur les espèces d'arthropodes susceptibles de se trouver dans ces parcelles. Ces informations peuvent concerner leur taille ou leur comportement trophique. Notre objectif est d'utiliser ces données, ainsi que des informations génériques sur les arthropodes afin d'apprendre la structure du réseau d'interactions écologiques entre ces espèces.

Nous souhaitons utiliser une méthode prenant en compte la dimension temporelle des données et ne nécessitant pas forcément des données d'abondance, mais des simples informations sur la présence ou l'absence d'une espèce dans une parcelle. Nous établissons alors un modèle de dynamique des espèces basé sur le réseau écologique de ces espèces. Un réseau écologique est défini ici comme un graphe orienté dont les nœuds représentent les différentes espèces et une arête entre deux nœuds représente une influence d'une espèce vers une autre. Afin d'avoir un modèle simple, nous définissons uniquement deux types d'influences : les influences positives et les influences négatives. Une influence positive d'une espèce i vers une espèce j signifie que la présence de i augmente les chances de présence de l'espèce j au pas de temps suivant, ce qui peut s'interpréter comme le fait que i est une proie ou un facilitateur de j . Une influence négative d'une espèce i vers une espèce j signifie que la présence de i diminue les chances de présence de l'espèce j au pas de temps suivant, ce qui peut s'interpréter comme le fait que i est un prédateur, un parasite ou un compétiteur de j . Nous supposons qu'aucune autre distinction que le caractère négatif ou positif n'est faite entre les différentes influences.

Un modèle très courant de la littérature pour représenter des variables binaires en interaction au cours du temps est le modèle de réseau bayésien dynamique (Friedman *et al.*, 1998). Afin d'intégrer le fait qu'il n'existe que deux types d'influences différentes, nous modélisons la dynamique des espèces par un réseau bayésien dynamique étiqueté (Auclair *et al.*, 2017). Dans un réseau étiqueté, chaque arête est étiquetée selon la nature de l'influence représentée en utilisant un nombre restreint d'étiquettes. Dans ce modèle, la probabilité de présence d'une espèce i dépend uniquement du nombre d'espèces présentes influençant i pour chaque type d'influence. Une représentation graphique d'un réseau écologique, ainsi que la représentation dynamique de ce même réseau est montré dans la figure 1.

Nous modélisons la dynamique des espèces dans un réseau écologique par un réseau bayésien dynamique à deux étiquettes : une étiquette positive et une étiquette négative. Une espèce est présente lors du second échantillonnage si au moins une de ses influences positives réussit **et** toutes ses influences négatives échouent.

$X_i^t \in \{0, 1\}$ est une variable aléatoire renseignant sur la présence ou l'absence de l'espèce $i \in \{1, \dots, n\}$ lors de échantillonnage $t \in \{0, 1\}$ (si $t = 0$, il s'agit de l'échantillonnage avant récolte, si $t = 1$, il s'agit de l'échantillonnage après récolte). La probabilité de réussite d'une influence positive de i vers j est donnée par un paramètre ρ et la probabilité de réussite d'une influence négative de i vers j est donnée par un paramètre τ . Cette influence se fait de manière dynamique : l'état de l'espèce i à $t = 0$ influe sur l'état de l'espèce j à $t = 1$. Par ailleurs, nous doublons ces paramètres afin de différencier l'impact de l'influence sur l'apparition et la survie. Une apparition désigne le fait qu'une espèce i absente à $t = 0$ est présente à $t = 1$ et la survie désigne le fait qu'une espèce i présente à $t = 0$ est également présente à $t = 1$. Les paramètres ρ^{app} et τ^{app} désignent donc les probabilités de réussite des influences respectivement positives et négatives lorsque $X_i^0 = 0$ pour une espèce i tandis que ρ^{sur} et τ^{sur} désignent les probabilités de réussite de ces influences lorsque $X_i^0 = 1$. Soient respectivement

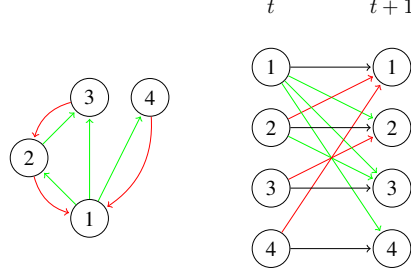


Figure 1. Représentation d'un réseau écologique modélisé par un RBD étiqueté. Gauche : Représentation de la structure d'un réseau écologique où les arêtes colorées en vert correspondent à une influence positive et les arêtes colorées en rouge à une influence négative. Droite : Représentation de la structure de transition du RBD étiqueté associé à ce réseau, dans laquelle les arêtes en noir décrivent les dépendances intrinsèques des espèces (survie, extinction ou apparition).

Pa_i^+ et Pa_i^- l'ensemble des espèces qui exercent une influence positive ou négative vers i ; N_i^+ et N_i^- le nombre d'espèces appartenant respectivement à Pa_i^+ et Pa_i^- présentes à $t = 0$, les probabilités de présence d'une espèce i à $t = 1$ sachant l'état du réseau au temps $t = 0$ sont définies dans les équations (1) et (2).

$$P(X_i^1 = 1 | N_i^+, N_i^-, X_i^0 = 0) = \left(1 - (1 - \rho^{app})^{N_i^+}\right) \cdot (1 - \tau^{app})^{N_i^-} \quad (1)$$

$$P(X_i^1 = 1 | N_i^+, N_i^-, X_i^0 = 1) = \left(1 - (1 - \rho^{sur})^{N_i^+}\right) \cdot (1 - \tau^{sur})^{N_i^-} \quad (2)$$

3. Apprentissage de structure du réseau

3.1. Algorithme d'apprentissage

Le modèle de réseau bayésien dynamique étiqueté a un nombre de paramètres fixé, qui ne dépend pas de la structure du graphe associé. La pénalisation de la vraisemblance par un critère BIC ou BDe n'est donc pas pertinente dans le cadre de ce modèle. L'apprentissage de la structure du réseau se fait donc par la maximisation de la vraisemblance non pénalisée. L'apprentissage de la structure d'un réseau écologique se fait à l'aide d'un algorithme glouton en deux étapes (Auclair *et al.*, 2017) :

- Une étape d'estimation, où l'on détermine, à graphe fixé, la valeur optimale des paramètres (ρ^{app} , τ^{app} , ρ^{sur} , τ^{sur}) au sens de la vraisemblance.
- Une étape de restauration, où l'on apprend, à paramètres fixés, une structure de réseau optimale au sens de la vraisemblance.

Ces deux étapes sont alternées jusqu'à convergence. La deuxième étape se résout à l'aide d'un problème de programmation linéaire en nombre entiers binaires 0/1 où une série de variables intermédiaires et de contraintes permettent de trouver la structure de réseau optimale. Le nombre de ces variables est polynomial en le nombre d'espèces

et de parcelles, et augmente exponentiellement en un nombre k correspondant à un nombre maximal d'influences que peut recevoir une espèce.

3.2. Loi à priori sur les arêtes par modèle à blocs stochastiques

Comme nous disposons d'informations sur les espèces, nous pouvons les intégrer au processus d'apprentissage. Nous pouvons ainsi utiliser la connaissance de la taille des espèces afin d'ajouter une priorité sur certaines arêtes retranscrivant le fait qu'il est rare qu'une espèce soit la proie d'une espèce de taille plus petite qu'elle. Nous partons pour cela du principe que les relations trophiques (proie/prédateur) sont suffisamment courantes dans les réseaux écologiques pour que toute relation positive décrive une relation d'une proie vers un prédateur. Nous avons accès, pour chaque espèce, à une information renseignant sur la taille et le poids réunie en une "classe" ordinale. Plus une espèce appartient à une classe élevée, plus son poids et/ou sa taille est grande. Nous pouvons alors organiser ces classes comme des niveaux trophiques afin de renseigner le fait que des espèces appartenant à une classe élevée ne soient pas des proies d'espèces de classe inférieure. Par ailleurs, nous souhaitons modéliser le fait qu'une espèce i a plus de chances d'être la proie d'une espèce j d'une classe proche. Pour cela, nous modélisons les différentes arêtes du réseau écologique comme un ensemble de variables aléatoires. $G_{i,j}^+$ et $G_{i,j}^-$ constituent un ensemble de variables aléatoires binaires ($G_{i,j}^+$ et $G_{i,j}^- \in \{0, 1\}$) définies comme suit : $G_{i,j}^+ = 1$ si il existe une influence positive de i vers j , $G_{i,j}^+ = 0$ sinon et $G_{i,j}^- = 1$ si il existe une influence négative de i vers j , $G_{i,j}^- = 0$ sinon. Les probabilités associées à ces variables aléatoires sont modélisées par un modèle à blocs stochastiques (Holland *et al.*, 1983). Tout nœud appartient à un (et un seul) bloc et une probabilité $P(G_{i,j}^+ = 1)$ ou $P(G_{i,j}^- = 1)$ est décrite par une fonction qui dépend uniquement du bloc de i et de celui de j . Pour l'apprentissage de réseau écologiques d'arthropodes, nous considérons un modèle à blocs stochastiques où les blocs correspondent aux classes de taille que nous interprétons comme un niveau trophique. Nous définissons le niveau trophique d'une espèce par la fonction notée $TL(i) \in \{1, \dots, maxTL\}$ dans un modèle avec $maxTL$ niveaux trophiques différents. Les probabilités de présence d'une arête positive sont définies par les équations (3) et (4) où une influence positive de i sur j est notée $G_{i,j}^+$ et une influence négative de i sur j est notée $G_{i,j}^-$.

$$P(G_{ij}^+ = 1) = 0 \quad \text{si} \quad TL(i) \geq TL(j) \quad (3)$$

$$P(G_{ij}^+ = 1) = \frac{e^{\alpha \Delta_{ij}}}{1 + e^{\alpha \Delta_{ij}}} \quad \text{si} \quad TL(i) < TL(j). \quad (4)$$

avec $\Delta_{ij} = TL(i) - TL(j)$ et $\alpha > 0$.

Nous considérons ici que les influences positives correspondent à des relations trophiques. Les relations trophiques ont un très fort impact sur la dynamique des espèces et sont les interactions les plus connues de la littérature. C'est pourquoi nous

contraignons davantage ce type d'interaction. Cependant, nous souhaitons également représenter des phénomènes divers (le parasitisme, les relations de compétition...). Nous utilisons pour cela les influences négatives, que nous représentons par un modèle de probabilité plus simple, prenant uniquement en compte les positions relatives des niveaux trophiques, comme décrit dans les équation (5) et (6).

$$\begin{aligned} \text{Si } TL(i) \leq TL(j), \quad & P(G_{ij}^- = 1 \mid G_{ij}^+ = 1) = 0 \\ & P(G_{ij}^- = 1 \mid G_{ij}^+ = 0) = \beta_2, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{Si } TL(i) > TL(j), \quad P(G_{ij}^- = 1) = \beta_1. \quad (6)$$

avec $\beta_1 > \beta_2$ afin de représenter le fait que les relations proie/prédateurs sont les plus fréquentes.

Le vecteur $\psi = (\alpha, \beta_1, \beta_2)$ définit la loi à priori sur le graphe associé au modèle de réseau bayésien dynamique.

4. Étude des réseaux d'arthropodes appris

Les données concernent plusieurs parcelles réparties en 4 cultures différentes chacune ayant des parcelles OGM et non OGM. Nous nous focalisons dans cette étude sur les parcelles OGM et souhaitons comparer les différences entre les réseaux appris pour chaque culture. Les espèces d'arthropodes observées ne sont pas les mêmes dans toutes les cultures. Aussi, nous traitons les données afin de ne retenir, pour chaque culture, que les espèces présentes au moins une fois. Il y en a 41 dans les parcelles de betterave, 29 dans les parcelles de maïs, 40 dans les parcelles de colza d'été et 29 dans les parcelles de colza d'hiver. Nous ne nous intéressons pas à l'abondance, mais à la présence ou à l'absence de chaque espèce dans chaque parcelle. Nous avons appliqué cet algorithme en maximisant à chaque étape la vraisemblance sur l'ensemble des parcelles d'une culture donnée, afin d'obtenir 4 réseaux distincts : un pour chaque culture. Le même procédé a été appliqué sur l'intégralité des données relatives à toutes les parcelles sans distinction de culture afin d'apprendre un réseau "global".

4.1. Comparaison des réseaux de différentes cultures

Nous cherchons à connaître les différences entre les réseaux des différentes cultures. Les réseaux sont-ils similaires pour chaque culture et si non, dans quelle mesure ? Pour répondre à cette question, nous calculons tout d'abord la vraisemblance des données correspondant à des parcelles d'une culture par rapport aux réseaux appris pour les autres types de culture. Cela permet de savoir si le réseau appris sur une culture particulière explique bien les données d'une autre culture. Toutes les espèces ne sont pas présentes dans toutes les cultures, cependant, 20 espèces sont présentes au moins une fois dans au moins une parcelle de chaque culture. Pour comparer les cultures entre elles, nous utilisons pour chaque culture un extrait du réseau appris ne conservant que les nœuds correspondant aux 20 espèces communes à toutes les

cultures. Pour calculer la vraisemblance des séquences de présence/absence par rapport à ces extraits de graphes, nous utilisons un extrait des données ne conservant que les séquences de ces 20 espèces. Nous pouvons alors calculer la vraisemblance des données de présence/absence sur ces 20 espèces par rapport à chaque réseau appris pour les nœuds correspondants aux 20 espèces communes à toutes les cultures. Ces valeurs sont renseignées dans le tableau 1.

Tableau 1. Log-vraisemblance des données de présence/absences dans les différentes cultures selon le graphe utilisé. "Global" désigne les données de présence absence de chaque parcelle sans distinction de culture ainsi que le graphe appris par ces données.

Données	Graphe				
	B	M	CE	CH	Global
B	-2526.23	-2555.66	-3476.53	-3858.50	-2706.41
M	-2177.56	-1063.42	-2184.20	-1983.35	-1898.98
CE	-2168.26	-2228.02	-1659.00	-2415.70	-2196.71
CH	-2099.49	-1421.53	-1680.65	-768.55	-1701.80
Global	-5170.31	-5148.71	-5622.41	-5807.81	-4890.77

Les vraisemblance sont toujours plus élevées pour les réseaux correspondant à la culture considérée. Un réseau écologique appris pour une culture ne peut donc pas modéliser efficacement la dynamique des espèces dans une autre culture. Cela est tout de même à relativiser pour la culture de betterave, dont la vraisemblance est proche si elle est calculée à partir du réseau appris à l'aide des données correspondant aux parcelles de maïs. Pour savoir à quel point ces graphes diffèrent et expliquer ces résultats, nous comparons pour chacun d'entre eux les arêtes qu'ils ont en commun et leurs étiquettes. Le tableau 2 symétrique donne pour le graphe de chaque culture le nombre d'arêtes en commun et de même étiquette avec les graphes des autres cultures. Comme pour les calculs de vraisemblance, la comparaison entre tous ces réseaux se fait sur un extrait de chaque graphe appris dans lesquels on ne retient que les 20 espèces communes à toutes les cultures. La diagonale de ce tableau comparant chaque réseau avec lui même, correspond au nombre d'arêtes total de ce réseau. Les nombres en rouge entre parenthèse indique le nombre d'arêtes existantes dans les deux graphes mais étiquetés différemment.

Tableau 2. Nombre d'arêtes communes entre les graphes appris pour chaque culture. En rouge, le nombre d'arêtes présentes dans les deux réseaux maïs étiquetés différemment.

Graphe	B	M	CE	CH	Global
B	79 (0)	10 (14)	12 (8)	7 (13)	52 (0)
M	10 (14)	46 (0)	8 (3)	10 (7)	12 (24)
CE	12 (8)	8 (3)	29 (0)	9 (1)	13 (10)
CH	7 (13)	10 (7)	9 (1)	55 (0)	9 (21)
Global	52 (0)	12 (24)	13 (10)	9 (21)	83 (0)

On constate que le réseau appris correspondant aux cultures de betterave est assez similaire à celui appris sur l'ensemble des cultures car ils ont beaucoup d'arêtes en commun et aucune arête d'étiquette différente. Les autres réseaux n'ont que peu d'arêtes communes avec les autres, voire parfois plus d'arêtes étiquetées différemment que d'arêtes de même étiquettes, comme les réseaux associés aux cultures de maïs et de betterave. Cela laisse à penser que les interactions changent beaucoup d'une culture à l'autre.

4.2. Comparaison avec un réseau connu

Un réseau trophique a déjà été appris par une méthode logique et vérifiée par des méthodes de text-mining sur les publications écologiques et des connaissances expertes (Bohan *et al.*, 2011). Nous avons donc comparé le "graphe logique" obtenu par cette méthode avec le "graphe appris" par notre méthode sur l'ensemble des données sans distinction de culture. Si l'on considère une relation trophique comme une influence positive d'une proie vers son prédateur et une influence négative du prédateur vers sa proie, certaines influences imputables à des relations trophiques sont bien retrouvées chez certaines espèces (*Aphidoidea*, *Entomobryidae*, *Smithuridae*). En revanche, beaucoup d'autres influences ne sont pas communes aux deux réseaux. Dans le réseau appris, on remarque par ailleurs que quelques espèces (*Araneae*, *Bembidion guttula*, *Diptera adults*, *Entomobryidae*, *Isotomidae*) ont énormément d'influence négative (plus de 7) vers d'autres espèces, alors que la plupart des autres n'ont que peu d'influences. Ce phénomène n'apparaît pas dans le réseau appris par méthode logique. Ces résultats doivent encore être analysés avec l'aide d'experts.

5. Conclusion

Nous avons cherché à apprendre la structure du réseau écologique décrivant les interactions entre des espèces d'arthropodes dans des parcelles cultivées. Nous avons appliqué une méthode utilisant des données de présence/absence des espèces au cours du temps basée sur un modèle de réseau bayésien dynamique étiqueté. Cette méthode permet un apprentissage sur très peu de données, et peut prendre en compte plusieurs types de connaissances expertes. Cependant, l'algorithme utilisé demande la résolution de plusieurs problèmes de programmation linéaire en nombre entier sur des matrices de taille importante. Les résultats obtenus sur les données de présence/absence d'arthropodes dans les parcelles cultivées montrent des entre les réseaux associés aux différentes cultures. Si cette méthode permet de retrouver des influences déjà connues ou apprises par d'autres méthodes, elle apprend tout de même beaucoup d'influences inédites dans la littérature, dont la pertinence reste à évaluer. La prochaine étape est donc une interprétation plus en profondeur de ces résultats avec l'aide d'experts. La connaissance qu'ils peuvent nous apporter, notamment sur l'existence ou l'inexistence d'arêtes désignées par des experts peut être intégré au processus d'apprentissage de manière itérative.

Bibliographie

- Auclair E., Peyrard N., Sabbadin R. (2017). Labeled DBN learning with community structure knowledge. In *Joint european conference on machine learning and knowledge discovery in databases*, p. 158–174.
- Bell J. R., Andrew King R., Bohan D. A., Symondson W. O. (2010). Spatial co-occurrence networks predict the feeding histories of polyphagous arthropod predators at field scales. *Ecography*, vol. 33, n° 1, p. 64–72.
- Bohan D. A., Boffey C. W., Brooks D. R., Clark S. J., Dewar A. M., Firbank L. G. *et al.* (2005). Effects on weed and invertebrate abundance and diversity of herbicide management in genetically modified herbicide-tolerant winter-sown oilseed rape. *Proceedings of the Royal Society of London B: Biological Sciences*, vol. 272, n° 1562, p. 463–474.
- Bohan D. A., Caron-Lormier G., Muggleton S., Raybould A., Tamaddoni-Nezhad A. (2011). Automated discovery of food webs from ecological data using logic-based machine learning. *PLoS One*, vol. 6, n° 12, p. e29028.
- Faisal A., Dondelinger F., Husmeier D., Beale C. M. (2010). Inferring species interaction networks from species abundance data: A comparative evaluation of various statistical and machine learning methods. *Ecological Informatics*, vol. 5, n° 6, p. 451–464.
- Friedman N., Murphy K., Russell S. (1998). Learning the structure of dynamic probabilistic networks. , p. 139–147.
- Holland P. W., Laskey K. B., Leinhardt S. (1983). Stochastic block models: First steps. *Social networks*, vol. 5, n° 2, p. 109–137.
- McDonald-Madden E., Sabbadin R., Game E., Baxter P., Chadès I., Possingham H. (2016). Using food-web theory to conserve ecosystems. *Nature communications*, vol. 7, p. 10245.
- Pocock M. J. O., Evans D. M., Memmott J. (2012). The robustness and restoration of a network of ecological networks. *Science*, vol. 335, n° 6071, p. 973–977. Consulté sur <http://science.sciencemag.org/content/335/6071/973>
- Sainsbury K. J., Punt A. E., Smith A. D. (2000). Design of operational management strategies for achieving fishery ecosystem objectives. *ICES Journal of Marine Science*, vol. 57, n° 3, p. 731–741.

Generalizations of Markov blankets to understand dependence

Victor Cohen¹ and Axel Parmentier

¹CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-la -Vallée

victor.cohen@enpc.fr

In a probabilistic graphical model on a set of variables V , the Markov blanket of a set of variables B is the minimal set of variables conditioned to which B is independent from the remaining of the variables. We generalize Markov blankets to study how a subset C of $V \setminus B$ of variables of interest is dependent on B . Doing that, we must choose if we authorize variables outside C in the blanket. We therefore introduce the two following generalizations. The Markov blanket of B in C is the minimal subset of C conditionally to which B and C are independent. It is naturally interpreted as the boundary through which B depends on C . And the Markov blanket of B in the direction of C is the nearest set to B among the minimal sets conditionally to which ones B and D are independent. We show that it can be interpreted as the cause of dependence. We illustrate these two concepts and their differences on examples of applications, and provide algorithms to compute them that are linear in the size of the graph. All our definitions and algorithms are provided for directed and undirected graphical models.

Tractable relaxations for Limited Memory Influence Diagrams

Victor Cohen¹, Axel Parmentier, Guillaume Obozinski, Vincent Leclere, and Joseph Salmon

¹CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-la -Vallée

victor.cohen@enpc.fr

Limited Memory Influence Diagrams (LIMIDs) are a flexible probabilistic graphical model framework to express stochastic optimization problems, such as Markov Decision Processes (MDP) and partially observable MDP. The random variables are represented by a probabilistic graphical model whose vertices are partitioned into three types : chance, decision, and utility vertices. The user chooses a policy, i.e., the distribution of the decision vertices conditionally to their parents, in order to maximize the expected utility. The standard algorithm to find an optimal policy, Single Policy Update (SPU), is a minibatch coordinate descent. It iteratively updates the conditional distribution of one decision vertex, the conditional distribution of all other decision vertices being fixed. It is a heuristic and may converge to a local optimum. LIMIDs for which SPU is guaranteed to converge to a global optimum are called soluble, and are the ones for which finding an optimal policy is easy. Only sufficient conditions for a LIMID to be soluble were previously known. We prove a necessary and sufficient condition for a LIMID to be soluble that can be checked in linear time in the size of the graph. We then leverage this condition to propose algorithms building soluble relaxations of non-soluble LIMIDs. These relaxations provide upper-bounds on the value of an optimal solution, as well as good heuristic solutions. Our algorithms enable to strike a balance between the quality of the bound obtained and the computational difficulty of the relaxation we build.

Computing derivatives of the likelihood using polynomial arithmetic in Bayesian networks. Application to genetic linkage analysis

Alexandra Lefebvre and Grégory Nuel¹

¹Laboratory of Probability and Stochastic Models (LMPA) – CNRS, Paris, France
nuel@math.cnrs.fr

We consider a Bayesian network over n variables with a parameter θ . It is well known that the probability of any evidence (any set of given values) can be computed through the sum of products of potentials. From a statistical point of view, the probability of the evidence conditional on θ is the likelihood of θ given the evidence. Computing the derivatives of the likelihood function is of great interest, especially the first and second order derivatives from which one can derive the score and the observed Fisher information matrix. These quantities can not only help maximizing the likelihood function (e.g. through Newton-based algorithms) but also allow to obtain confidence intervals on parameters as well as performing hypothesis testing (likelihood ratio tests, score tests and Wald tests).

In probabilistic graphical models such as Bayesian networks, the sensitivity analysis allows one to express the likelihood as a polynomial function of θ under the hypothesis that all potentials can be expressed as polynomials in θ (see Nielsen and Jensen, 2009, pp 184–185). But when the same parameter appears in many potentials, the resulting polynomial is usually of high order, and its computation cost prohibitive. Alternatively, in the particular context of the hidden Markov models (HMM), Cappé and Moulines (2005) suggest to use the Fisher and Louis identities to obtain the first and second likelihood derivatives through the smoothing recursions allowing to compute efficiently the expectation of any additive functional. On the other hand, it is well known that polynomial versions of the sum-product algorithm can be very efficient for performing complex computations in probabilistic graphical models (e.g. order k moment of an additive functional in Bayesian networks (Cowell, 1992; Nilsson, 2001), moment/probability generating functions in pattern matching (Nuel, 2008, 2010), etc.).

In the present work we want to generalize the smoothing recursions of Cappé and Moulines (2005) from the specific context of HMM to any Bayesian network, and we want to take advantage of polynomial arithmetic for simplified computations through a single sum-product recursion to compute both the likelihood function and all its derivatives. For a unidimensional parameter, our method allows one to compute the derivatives up to the d th order with a complexity of $C \times (d + 1)(d + 2)/2 = O(C \times d \times d)$ where C is the complexity for computing the likelihood through the original sum-product recursion. For a multidimensional parameter (p dimensions) we obtain the likelihood, the gradient and the Hessian with a complexity of $O(C \times p \times p)$. The latter complexity is similar to the approach of Cappé and Moulines (2005), but the practical implementation is arguably simpler and easier to extend to higher order derivatives.

We illustrate our new method with the two-point linkage analysis model which is used in human genetics for localizing a disease susceptibility gene on the genome using pedigrees (family structures) where the disease segregates with a genetic factor.

Acknowledgement. This work was funded by the epidemiological doctoral program of the French Ligue Nationale Contre le Cancer (LNCC).

References

Olivier Cappé and Eric Moulines. Recursive computation of the score and observed information matrix in hidden markov models. In Statistical Signal Processing, 2005 IEEE/SP 13th Workshop on, pages 703-708. IEEE 2005.

RG Cowell. Calculating moments of decomposable functions in bayesian networks. Preprint, 1992.

Thomas Dyhre Nielsen and Finn Verner Jensen. Bayesian networks and decision graphs. Springer Science & Business Media, 2009.

Dennis Nilsson. The computation of moments of decomposable functions in probabilistic expert systems. In Proceedings of the Third International Symposium on Adaptive Systems, pages 116–21, 2001.

Grégory Nuel. Pattern markov chains: optimal markov chain embedding through deterministic finite automata. *Journal of Applied Probability*, 45(1):226-243, 2008.

Grégory Nuel. On the first k moments of the random count of a pattern in a multistate sequence generated by a Markov source. *Journal of Applied Probability*, 47(4):1105–1123, 2010.

Arbres de Jonction Hiérarchiques pour l'inférence de génotypes dans les pedigrees complexes

Damien Leroux and Sylvain Jasson
MIAT - UR 875, INRA, Toulouse
damien.leroux@inra.fr/sylvain.jasson@inra.fr

En génétique quantitative, toute analyse repose sur la connaissance de l'hérédité génétique au sein de la population observée. Cette connaissance peut être obtenue en inférant à partir du pedigree et des observations de marqueurs l'origine génétique (origine parentale). Dans le cas de structures de populations simples, il y a bijection entre le domaine observable et l'origine génétique (un ancêtre porte un allèle spécifique sur chaque marqueur considéré). Dans le cas de structures plus complexes, il est plus délicat d'extraire l'information d'origine génétique des observations brutes de marqueurs.

La nature de quasi-arbre d'un pedigree se prête très bien à première vue à une inférence bayésienne, en modélisant les individus par des variables aléatoires à valeurs dans (domaine observable x origine parentale), et chaque croisement par le facteur combinant les génomes des parents en celui du descendant.

Lors de la création de l'arbre de jonction du réseau obtenu, par une méthode classique d'élimination de variable, on remarque la création de cliques gigantesques, pour peu que deux parents aient plusieurs descendants. Ces cliques en outre dissolvent la causalité intrinsèque du pedigree. Afin de factoriser efficacement le réseau bayésien (RB) en un arbre de jonction utilisable, nous avons établi une méthode pour transformer le réseau en un arbre de jonction hiérarchique (AJH) où tout nœud peut être un sous-réseau complet (Puch et al., 2004; Wu, Wu, 2007), préservant la causalité, et assurant par construction à chaque niveau une nature d'arbre ou de forêt dans certains cas.

De ce fait, l'inférence à un niveau donné consiste en un simple forward-backward quelle que soit la structure d'origine. Nous présentons un nombre restreint d'opérations permettant la reformulation d'un réseau bayésien en un AJH, une méthode itérative simple pour effectuer cette reformulation, et montrons comment réaliser l'inférence en pratique sur cet objet en tenant compte d'observations sur certaines variables du réseau.

Cette méthode est implémentée dans notre logiciel d'analyse QTL Spell-QTL disponible à l'adresse [<https://forgemia.inra.fr/QTL/spell-ctl>].

A DBN model to study the influence of epidemic surveillance networks on phytosanitary treatments intensity

Jean-Noël Aubertot¹, Marie-Josée Cros², Sabrina Gaba³,
Nathalie Peyrard², Régis Sabbadin², Xavier Reboud³

1. AGIR - UMR 1248, INRA/INPT, Toulouse

jean-noel.aubertot@inra.fr

2. MIAT - UR 875, INRA, Toulouse

marie-josee.cros/nathalie.peyrard/regis.sabbadin@inra.fr

3. Agroécologie - UMR 1347, INRA/AgroSup/Université de Bourgogne, Dijon

sabrina.gaba/xavier.reboud@inra.fr

RÉSUMÉ. Le rôle des Réseaux d'Epidémiologie Surveillance (RES) pour le contrôle des épidémies dans les cultures est de plus en plus important. Cependant, l'influence de l'information fournie par le RES sur le nombre de traitements phytosanitaires appliqués et la taille de l'épidémie est mal connue. Nous proposons un modèle de DBN pour représenter la dynamique d'un bioagresseur dans un parcellaire, afin d'explorer l'influence de la taille spatiale et temporelle du RES sur ces critères. Une analyse par simulation montre que pour les adventices et les pathogènes du sol, il est possible de réduire le nombre de traitements significativement, pour une augmentation modérée de la taille de l'épidémie, en augmentant la taille du RES. Cela illustre comment un DBN peut être utilisé pour identifier des leviers pour la réduction de l'usage des pesticides.

ABSTRACT. The role of Epidemiological Surveillance Networks (ESN) is becoming more and more important to control epidemics in agricultural areas. The influence of the ESN outputs on the number of phytosanitary treatments applied, and on the epidemic size is not well understood. We used a dynamic Bayesian network model of a pest dynamics to explore the influence of spatial and temporal sizes of the network on these criteria. A simulation analysis showed that for weeds and soil-borne diseases, by increasing the ESN size, the number of treatments can be significantly reduced with a moderate increase of the epidemics size. This illustrates how DBN models may help in identifying ways to reduce pesticide use.

MOTS-CLÉS : Suivi de bioagresseur, règle de décision, simulation, analyse de sensibilité

KEYWORDS: Pest monitoring, decision rule, simulation, sensitivity analysis

DOI:10.3166/RIA.?.1-8 © 2018 Lavoisier

1. Introduction

Globalisation, environmental and climate changes multiply the risks of emergence and re-emergence of diseases or animal pests on crops. Pest control is difficult because decision choices must be made early to ensure their efficiency under uncertain results of actions and uncertain system dynamics. To control and prevent epidemics, the role of epidemiological surveillance systems (Reboud *et al.*, 2017) is becoming more and more important. In France, the Ecophyto (EcoPhyto, 2015) national action plan to reduce pesticide use strengthened the role of the national Epidemio Surveillance Network (ESN).

An ESN is a set of fields in an agricultural area that are observed by experts able to detect an infection. This information is then provided to the farmers who can use it to decide whether they apply or not a phytosanitary treatment. So the ESN information could be used to limit unnecessary treatment actions. However, the influence of the spatial size (how many surveyed fields) and temporal size (the length of the history of observations) of the network on the number of treatments, the epidemics size and therefore the net margin is not well understood.

In this study we compare different ESN using simulations of a Dynamic Bayesian Network model (DBN, (Jensen, 2001)) of the spatio-temporal propagation of the pest through a set of crop fields. We combine the model with a decision rule at the field level that combines the ESN information (shared by all farmers) and the local knowledge of the farmer on the field sanitary status history (private information) to decide whether to apply a treatment or not. Considered ESNs have different spatial and temporal sizes. Results are obtained for three parameterizations of the DBN model corresponding to three typical pest types: soil-borne pathogens, weeds and pest insects. We also present a sensitivity analysis on the model parameters.

2. DBN model of pest dynamics in crop fields

2.1. Model when treatment actions are known

Let us consider a set of n crop fields in a landscape, that can be affected by a pest. We denote by X_i^t the state of field i at time t : 0 for non infected and 1 for infected. The pest can spread from field i to a neighbour field j , and N_i is the set of indices of the neighbour fields of i . At each time step, a decision to apply a phytosanitary treatment can be made. This is represented by the binary variable A_i^t , equal to 1 if a treatment is applied and zero otherwise. If $X^t = (X_1^t, \dots, X_n^t)$ is the sanitary status of all fields at time t and $A^t = (A_1^t, \dots, A_n^t)$ are the actions chosen at every field at time t , we model the temporal distribution of X^t given A^t as a Dynamic Bayesian Network: at the landscape level the transition probability is

$$P(X^t | X^{t-1}, A^t) = \prod_{i=1}^n P(X_i^t | X_i^{t-1}, X_{N_i}^{t-1}, A_i^t).$$

Then the individual transition probabilities are modeled as in a per contact propagation process where a field can become infected either by colonization from neighboring fields or by long distance propagation. If $I_i^t = \sum_{j \in N_i} X_j^t$ is the number of infected fields in the neighborhood of field i the transitions are:

$$\begin{aligned} P(X_i^t = 1 \mid X_i^{t-1} = 0, X_{N_i}^{t-1}, A_i^t = 0) &= \epsilon + (1 - \epsilon)(1 - (1 - \rho)^{I_i^{t-1}}) = P_{01}(I_i^{t-1}) \\ P(X_i^t = 1 \mid X_i^{t-1} = 0, X_{N_i}^{t-1}, A_i^t = 1) &= (1 - \gamma)P_{01}(I_i^{t-1}) \\ P(X_i^t = 1 \mid X_i^{t-1} = 1, X_{N_i}^{t-1}, A_i^t = 0) &= \nu + (1 - \nu)P_{01}(I_i^{t-1}) = P_{11}(I_i^{t-1}) \\ P(X_i^t = 1 \mid X_i^{t-1} = 1, X_{N_i}^{t-1}, A_i^t = 1) &= (1 - \gamma)P_{11}(I_i^{t-1}) \end{aligned}$$

The model parameters are ϵ , the probability of success of long distance propagation of the pest, ρ , the probability of success of colonisation from a neighbor field, ν , the probability of pest survival if the field is not treated, and γ the probability of success of the phytosanitary treatment.

2.2. Decision rule for treatment

In the model, the states of some fields are observed each year, to inform the farmer who must decide if he applies a phytosanitary treatment or not. These fields are the same every year and form the Epidemio Surveillance Network (ESN). The temporal horizon of the ESN is denoted h_{ESN} , it means that at year t the information is available back to year $\max(1, t - h_{ESN})$. We denote by O the set of indices of the fields in the ESN and we define $p_i^t(ESN)$, the probability that field i is infected at time t given the knowledge of the states of the fields in the ESN:

$$p_i^t(ESN) = P(X_i^t = 1 \mid X_O^t = x_O^t, \dots, X_O^{\max(1, t - h_{ESN})} = x_O^{\max(1, t - h_{ESN})})$$

We model the pest management strategy at time t in field i as a decision rule at the field level that combines two pieces of information: (i) the infection probability $p_i^t(ESN)$ of the field i estimated from the ESN observations and the DBN model (shared information), and (ii) the sanitary state $X_i^{\max(t - h_{loc}, 1)}, \dots, X_i^{t-1}$ of field i during the h_{loc} preceeding years (private information), where h_{loc} is the temporal horizon of the local information.

Let us first assume that the only information available for deciding is $p_i^t(ESN)$. We can use this information to derive a decision rule for treatment which aims at maximizing the expected net margin of the field at time t . Treatment is chosen as soon as the expected net margin with treatment is larger than the expected net margin without treatment. The expected net margin without treatment, m , depends on the yield (*yield*), the price of crop (*price*), the total cost of production (c), the cost of phytosanitary products (c_{phyto}) and q the proportion of yield preserved in presence of the pest. It is equal to $(1 - p_i^t(ESN))W + p_i^t(ESN)w$ with $W = price \cdot yield - (c - c_{phyto})$ and $w = q \cdot W$. The expected net margin with treatment, m_{phyto} is equal to

$(1 - p_i^t(ESN))(W - c_{phyto}) + p_i^t(ESN)(\gamma W + (1 - \gamma)w - c_{phyto})$. Then above a threshold value of $p_i^t(ESN)$, we have $m < m_{phyto}$ and treatment is applied: $A_i^t = 1$.

To take into account the private information available to the farmer in field i , we assume that the farmer updates this threshold with the knowledge he has of the history of his field $(X_i^{t-1}, X_i^{t-2}, \dots)$, leading to a lower threshold (meaning more treatment decisions) if the field has often been infected, and a larger threshold if the field has never been infected (details of this update are omitted for sake of brevity). It is not necessary to include $A_i^{t'-1}$ for $t' < t$ in this private information since X_i^{t-1} is known. In addition, we assume each field belongs to a different farmer so actions in others fields that i are not known by farmer i .

3. Design of the simulation study

Criteria for comparing ESN. The objective of an ESN is to provide information to the farmer. A farmer who would have decided to preventively treat the field against a potential pest invasion, can decide not to treat if the ESN information indicates a low incidence of the pest in the area. The opposite can also happen. So, different ESN can be compared in their capacity to control the pest invasion and limit the treatments. So the two first criteria are the number of infected fields and the number of treatments applied. They both contribute to the third criterion that we will consider: the farmer net margin.

ESN characteristics. We compared eight ESNs on a grid of 144 (12 by 12) crop fields: four spatial sizes (1%, 10%, 25%, 50% of all fields, uniformly spatially distributed, stable in time, see Figure 1) and two temporal sizes (preceding year $h_{ESN} = 1$ or all available preceding years ESN observations $h_{ESN} = H$), and $h_{loc} = 1$.

Pest and agronomic parameters. Three types of crop pests were considered: soil-borne pathogens, weeds, pest insects. If a pest is in a field, it can colonize the 4 closest fields. These types have contrasted spatial dispersion and temporal persistence parameters (see Table 1, established from expert knowledge).

Tableau 1. Values of DBN parameters for the three pest types

pest type	ϵ	ρ	ν
soil-borne pathogens	0.05	0.10	0.50
weeds	0.15	0.20	0.50
pest insects	0.30	0.40	0.25

We considered oilseed rape fields. Parameters associated to crops are yields for healthy or injured crops, oilseed rape price, production and treatment costs, treatments efficacy. Due to the difficulty to collect data at the spatial and temporal scale considered, we did not estimate these parameters, they were set by expertise and studies in France (FOP, 2015 ; INOSYS, 2014 ; Cros *et al.*, 2017).

Inference of $p_i^t(ESN)$. When simulating a trajectory of the DBN model, at each time step it is necessary to compute $p_i^t(ESN)$ for each field i in order to determine

the action prescribed by the decision rule. Simulation of trajectories is time consuming without a fast approximate inference method to compute the $p_i^t(ESN)$ at time t for all fields. Since the observations are the same for each field (the one provided by the ESN) it is possible to approximately compute them simultaneously for all field using Loopy Belief Propagation (LBP) or Gibbs Sampling (GS). We compare both methods using the BN toolbox (Murphy, 2001). Since we observed a bug after a few iterations when running LBP (both probabilities of pest presence and absence estimated to zero) we eventually used GS. Note that we are currently developing the Matlab GMtoolbox (<http://www.inra.fr/mia/T/GMtoolbox>) for inference in graphical models using generalized belief propagations algorithms. This will enable faster inference.

Simulation protocol. For each ESN, we considered three initial states for the infection (4 fields, either at the corner, in the middle of a border, or close to the center of the grid). For each initial state we ran 60 simulations of $H = 8$ years. Mean values of the 3 criteria were computed over years 5 to 8. For comparison purpose, in addition to the decision rule derived from the ESN, we also considered the two extreme strategies consisting in never treating and always treating. The implementation was made in Matlab. Code is available on Figshare (<https://doi.org/10.6084/m9.figshare.4675759.v3>).

Sensitivity analysis. Using sensitivity analysis, we studied the influence of the 6 parameters related to the type of pest: (ϵ, ρ, ν) for the pest dynamics and (c_{phyto}, γ, q) for the associated net margin. Since simulating the DBN model requires a high computer execution time, we used a kriging metamodel (function `km` of R package `DiceKriging`) to approximate the relationship between the ESN and the model outputs. We performed one sensitivity analysis per pest type, by zooming in the metamodel on an hypercube around the values of all pest parameters.

4. Results

4.1. Simulation analysis

Simulations for soil-borne diseases (see Figure 1) and weeds give similar results. The mean number of treatment applications decreases when spatial network size increases (for $h=1$, from -11 % to -48 % ; for $h=8$, from -12 % to -46%) and also when the historic length decreases (for RES1, equal ; for RES2, -1 % ; for RES3, -4 % ; for RES4, -2%), but with a stronger effect of the network spatial size.

Mean economic net margin increases when spatial and temporal network sizes increase, in particular for ESNs with larger spatial size and for weeds (because their annual treatment cost is much higher). Although infection intensity slightly increases with larger ESN (for $h=1$, from 18 % to 38 % ; for $h=8$, from 16 % to 31 %), due to a decrease in pesticide use, soil-borne diseases and weeds remain almost at the same level than when a treatment is applied systematically.

The results for pest insects were quite different. A treatment decision was always chosen whatever the considered ESN due to the high dispersal ability of pest insects, implying a high risk of injuries, together with a low treatment cost.

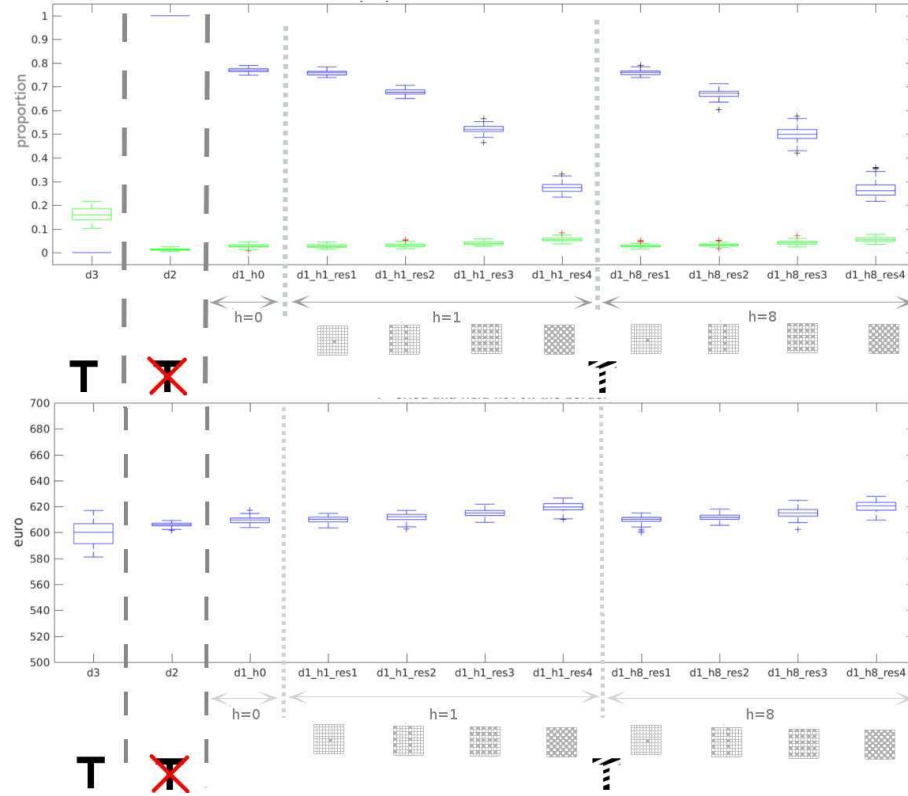


Figure 1. Influence of ESN temporal and spatial sizes. Top graph: mean percentage of treatment decision (blue) and mean percentage of infected fields (green). Bottom graph: mean economic net margin. On the horizontal axis, the considered strategies are: never treat (d3), always treat (d2), strategy only based on the private information (d1-h0), strategies combining ESN information and private information with $h = 1$ or $h = 8$ and ESN1 to ESN4 (d1-h1-res1 to d1-h8-res4).

4.2. Sensitivity analysis

For soil-borne pathogens and weeds, the more sensitive factors are annual cost of treatment (ct), percentage of yield preserved when infected (q) and probability of colonisation from a neighbouring field (ρ) (see Table 2). The first one is a socio-economic factor while the two other factors are related to natural characteristics and agricultural practices.

For insect pest, the main sensitive factors are probability from neighbouring fields (ρ), yield when infection (q) and probability of treatment efficacy (γ) (see Table 2). In this case, factors related to natural characteristics and agricultural practices have more influence on the output variables than the socio-economic factor annual cost of treatment (ct).

Tableau 2. Sobol indices. Top: mean percentage of treatment, Middle: mean percentage of injured fields, Bottom: mean net margin. Darker cells indicate the larger Sobol indices.

Nb. treatments	ϵ	ρ	ν	ct	γ	q
Soil-borne pathogens	0.06	0.27	0.03	0.54	0.02	0.32
Weeds	0.05	0.28	0.03	0.53	0.02	0.31
Pest insects	0.10	0.21	0.02	0.16	0.48	0.69
Nb. infected fields	ϵ	ρ	ν	ct	γ	q
Soil-borne pathogens	0.04	0.03	0.01	0.41	0.15	0.41
Weeds	0.03	0.03	0.01	0.40	0.12	0.37
Pest insects	0.03	0.02	0.00	0.30	0.13	0.48
Net margin	ϵ	ρ	ν	ct	γ	q
Soil-borne pathogens	0.14	0.45	0.01	0.23	0.29	0.60
Weeds	0.14	0.45	0.01	0.23	0.30	0.57
Pest insects	0.07	0.86	0.08	0.00	0.00	0.00

5. Discussion

The main conclusions of this study are that the same ESN cannot be efficient for all types of pests. The second is that, for weeds and soil-borne diseases, by increasing only the ESN size, the number of phytosanitary treatments can be significantly reduced with a moderate increase of the epidemic size. For insects that can spread very fast, whatever the ESN size the decision is always to treat. This study illustrates how DBN models may help in identifying ways to reduce pesticide use.

The results presented are dependent of the way we have modeled the integration of the ESN and the private information in the decision rule. We have modeled it in two steps, first a threshold on $p_i^t(ESN)$ and then an update of the threshold using the private information in the field. Another choice would be to compute the probability of infection of field i given both information (from ESN and private) and to directly compute the threshold on this probability. However this would be computationally more demanding since the evidence received at field i would be different from the evidence received at another field. Simultaneous computation of the conditional probabilities of infection using Gibbs Sampling would not be possible anymore.

Furthermore, the model could be used with different decision rules or extended to take into account ESN cost, agricultural practices that reduce biotic risks or increase treatment efficacy, landscape heterogeneity. It could also be used with different choices of neighbourhood to represent specific propagation situations, like wind orientation or agricultural machines trajectories (with the limit that increasing the neighbourhood size will increase the computational time). The model may then serve as

an interactive tool for discussion between farmers and advisers to better understand the spatial and temporal connections underlying pest dynamics and help designing management strategies at the landscape level (Debaeke *et al.*, 2018).

Finally, in this study we chose to evaluate ESNs. Of course it would be interesting to go one step further, and to design an optimal ESN (in terms of infection size, number of treatments, ...). However this would require the optimization of a value function which is already hard to compute. This is an open question which is left for further research.

Acknowledgements. We thank Victor Picheny and Robert Faivre for their valuable support on the sensitivity analysis procedure. This work has been partially supported by the French Ecophyto project VESPA.

Bibliographie

- Cros M.-J., Aubertot J.-N., Peyrard N., Sabbadin R. (2017). GMDPtoolbox: a Matlab library for designing spatial management policies. application to the long-term collective management of an airborne disease. *Plos ONE*, vol. 12, n° 10.
- Debaeke P., Aubertot J.-N., Bardy M., Bertuzzi P., Cellier P., Constantin J. *et al.* (2018). Data collection and integration for landscape agronomy. *Landscape Agronomy*, en révision.
- EcoPhyto. (2015). *Le gouvernement présente la nouvelle version du plan ecophyto*. Press Communication. Consulté sur http://agriculture.gouv.fr/sites/minagri/files/151026_cp_ecophyto.pdf
- FOP. (2015). *Coûts de production, evolution des recettes en oléagineux, protéagineux et céréales*. Fédération française des producteurs d'oléagineux et de protéagineux, FOP. Consulté sur <http://www.fopoleopro.com/etude-fop-couts-de-production-evolution-des-recettes-en-oleagineux-proteagineux-et-cereales-observatoire-couts-de-production-fop-cer/>
- INOSYS. (2014). *Systèmes grandes cultures en poitou-charentes, edition 2015 : campagne 2013 et conjoncture 2014*. Consulté sur http://www.deux-sevres.chambagri.fr/fileadmin/publication/CA79/17_Grandes_Cultures/Documents/INOSYS_CAS_TYPES_20132014GRCULT.pdf
- Jensen F. V. (2001). *Bayesian networks and decision graphs*. Secaucus, NJ, USA, Springer-Verlag New York, Inc.
- Murphy K. (2001). The Bayes Net toolbox for Matlab. *Computing science and statistics*, vol. 33, n° 2, p. 1024-1034. Consulté sur https://www.cs.utah.edu/~tch/notes/matlab/bnt/docs/bnt_pre_sf.html
- Reboud X., Carpentier A., Aubertot J.-N., Lemarié S., Peyrard N., Turenne N. *et al.* (2017). Ce que l'épidémiosurveillance apporte ou n'apporte pas encore à la moindre dépendance aux produits phytosanitaires. *Innovations Agronomiques*, n° 59, p. 81–91.

Réseaux Bayésiens Dynamiques : Méthodologie pour l'inférence sur les Schémas de Mode d'Action en Toxicologie

Frédéric BOIS¹, Wang GAO^{1,2}, Ghislaine GAYRAUD²

1. INERIS

Unité METO, Parc ALATE BP2, 60550 Verneuil-en-Halatte, France
frederic.bois@ineris.fr, wang.gao-EXTERNE@ineris.fr

2. LMAC, Université de Technologie de Compiègne

57 Avenue de Landshut CS 60203 Compiègne, France
wang.gao@utc.fr, ghislaine.gayraud@utc.fr

RÉSUMÉ. En toxicologie, un schéma de mode d'action (AOP : Adverse Outcome Pathway) est un cadre conceptuel qui décrit qualitativement les connaissances existantes concernant les liens entre deux points d'ancrage : un événement initiateur moléculaire (MIE : Molecular Initiating Event) et un résultat défavorable (AO : Adverse Outcome) à un niveau d'organisation biologique pertinent pour l'évaluation du risque. La version quantitative d'un AOP, le qAOP, promet d'être un outil puissant pour l'évaluation des risques, grâce notamment à sa capacité de prédiction. Cet article présente une méthode de modélisation originale de qAOPs par les réseaux bayésiens dynamiques.

ABSTRACT. In toxicology, an Adverse Outcome Pathway (AOP) is a conceptual framework that qualitatively describes the existing knowledge on the links between the two anchor points: Molecular Initiating Event (MIE) and Adverse Outcome (AO) at a level of biological organisation relevant for risk assessment. The transformation of an AOP to its quantitative version, qAOP allows to build a powerful risk assessment tool, thanks to its ability to quantitatively predict the AO. This paper presents a new method for modelling qAOP using Dynamic Bayesian Networks (DBN).

MOTS-CLÉS : Réseaux Bayésiens Dynamiques, Systèmes Dynamiques Linéaires, Schémas de Mode d'Action en Toxicologie (AOP), Toxicologie, Méthode MCMC, Inférence bayésienne.

KEYWORDS : Dynamic Bayesian Networks, linear dynamical systems, Adverse Outcome Pathway (AOP), Toxicology, MCMC Method, Bayesian inference.

DOI:10.3166/RIA.28.1-11 © 2018 Lavoisier

1. Introduction

En toxicologie, un schéma de mode d'action défavorable (AOP : Adverse Outcome Pathway) est un cadre conceptuel de représentation graphique qualitative qui décrit les connaissances existantes concernant les liens entre deux points d'ancrage: i) un événement initiateur moléculaire (MIE : Molecular Initiating Event) et ii) un résultat défavorable (AO : Adverse Outcome) à un niveau d'organisation biologique, pertinent pour l'évaluation du risque. L'organisation systématique de l'information dans les cadres AOP a le potentiel d'améliorer la prise de décision réglementaire grâce à une plus grande intégration et à une utilisation plus pertinente des données mécanistes. (Leist *et al.*, 2017)

Les travaux récents s'orientent vers la quantification d'AOP (qAOP) rendue possible grâce aux méthodes de modélisation mathématique. Nous proposons dans cet article une méthode originale de modélisation de qAOPs par des réseaux bayésiens dynamiques (DBN) capables d'appréhender les dépendance en temps et entre nœuds des AOPs. Notre modèle DBN (cf système d'équation (2)) généralise les DBN linéaires gaussiens (cf équation (1)) usuellement considérés dans la littérature sous le nom de modèle d'espace-état linéaire-gaussien (linear-gaussian state-space model) (Durbin, Koopman, 2012). Après un bref rappel des concepts de base en section 1, nous comparons et discutons les modèles DBN en section 2. En section 3, nous appliquons notre modèle au cadre AOP. Nous terminons par une conclusion et des perspectives en section 4.

1.1. AOP et ses variantes

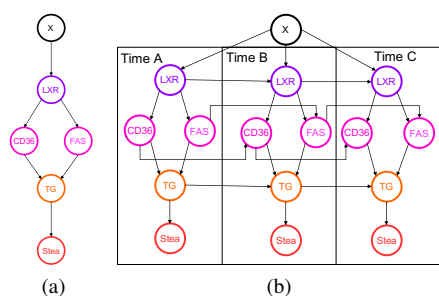


Figure 1. Réseau d'AOPs pour la stéatose hépatique avec un nœud externe X représentant un produit chimique qui induit le MIE, ici LXR (Figure 1a), et la structure du DBN correspondant (Figure 1b)

Du point de vue mathématique, un AOP peut être représenté par une chaîne dirigée. Tous les AOPs partagent une structure commune consistant en un MIE, une série d'événements clés (KE : Key event) reliés par des relations d'événements clés (KER : KE relationship) et un AO. Le MIE, les KEs et l'AO constituent un ensemble d'états

à différents niveaux d'organisation biologique et sont représentés par des nœuds dans un AOP. Les KERs encodent des relations causales (e.g. dose-réponse ou cause-effet) et sont représentées par les arêtes dirigées de la chaîne.

Un réseau d'AOPs est un ensemble d'AOPs qui conduisent au même AO et dont certains nœuds et arêtes sont partagés. La Figure 1a illustre un mini-réseau d'AOPs pour la stéatose hépatique qui contient deux AOPs.

Un tel réseau représente qualitativement des connaissances pathologiques (causales) concernant un AO, mais il ne possède pas de capacité de prédiction quantitative. C'est pourquoi sa variante, qAOP (et les réseaux de qAOPs) est apparue ces dernières années. En particulier, on peut citer (Gust *et al.*, 2015) et (Jaworska, 2016) qui considèrent une modélisation de qAOPs par des réseaux bayésiens (BN) et par conséquent, négligent la dynamique de ces AOs.

En revanche, afin de tenir compte de l'aspect temporel, nos travaux s'appuient sur la famille des modèles DBN pour modéliser un réseau d'AOPs en un réseau de qAOPs à partir de données de types dose-réponse et dose-temps-réponse. La modélisation des qAOPs par DBN présente l'avantage de pouvoir prédire, avec une mesure d'incertitude, le niveau d'AO à partir de données manquantes, i.e., des données récoltées à des temps différents et sur un nombre partiel des nœuds MIE ou KEs.

1.2. Réseaux bayésiens (BN) et réseaux bayésiens dynamiques (DBN)

Un réseau d'AOPs étant un graphe dirigé, il est naturel de modéliser sa version quantitative par un réseau bayésien. De plus, afin de prendre en compte la dynamique des AOPs, nous avons retenu les DBN qui semblent appropriés dans notre contexte ; en effet, 1) pour un état fixé du nœud parent, l'état du nœud enfant peut évoluer dans le temps. 2) les processus biologiques sous-jacents peuvent contenir des rétroactions. Par conséquent, le réseau d'AOPs n'est pas un graphe dirigé acyclique (DAG). Mais, sous l'hypothèse que ces mécanismes de rétroaction ne sont pas instantanés, la structure de DBN reste un DAG avec des arêtes, représentant les rétroactions, qui, en partant de la tranche de temps t , ne pointent que vers des nœuds de la tranche de temps $t + 1$.

1.2.1. Types et dépendances des nœuds

Intrinsèquement à la définition, les AOPs sont constitués de nœuds qui sont soit constants au cours du temps, soit dépendants du temps. C'est exactement ce que peuvent décrire les DBNs. En particulier, Schäfer et Weyrath (Schäfer, Weyrath, 1997 ; Mihajlovic, Petkovic, 2001) ont considéré trois types de nœuds selon leur dépendance au temps et les différentes dépendances possibles entre eux.

- un nœud est dit statique (SN : static node) si sa distribution est constante au cours du temps (e.g., le nœud X dans la Figure 1b).
- un nœud est dit dynamique (DN : dynamic node) si la distribution de son état présent est conditionnée par lui-même au temps passé (e.g., les nœuds LXR, CD36, FAS et TG dans la Figure 1b).

– un nœud est dit temporaire (TN : temporary node) si à un temps fixé, la distribution de son état n’est conditionnée que par celui de ses parents (e.g., le nœud Stea dans la Figure 1b).

Dans les DBNs, toutes les dépendances temporelles entre SN, DN et TN ne sont pas autorisées. En effet, on y distingue trois types de dépendances impliquant au moins un DN: $SN \rightarrow DN$, $DN \rightarrow DN$ et $DN \rightarrow TN$. Nous nous focalisons ici sur les dépendances de types : $SD \rightarrow DN$ et $DN \rightarrow DN$, qui, elles, ne sont pas instantanées.¹

1.2.2. Hypothèses classiques des modèles DBN

Dans cet article, nous considérons deux hypothèses qui correspondent à des hypothèses classiques minimales sur les DBNs, à savoir :

HYPOTHÈSE 1. — *Les observations sont équi-espacées temporellement.*

HYPOTHÈSE 2. — *La propriété markovienne d’ordre 1 est satisfaite :*

$$P(C_t | P_t, C_u, u < t) = P(C_t | P_t, C_{t-1}) \text{ où } P \text{ est le nœud parent du nœud } C.$$

1.3. Problème de données manquantes

1.3.1. Données expérimentales

Les données idéales pour mener à bien l’inférence sur les qAOPs devraient avoir la structure suivante : pour chaque réplication, on dispose d’une série temporelle d’un vecteur complet de mesures d’état du système $(X, MIE, KE_1, KE_2, \dots, KE_n, AO)_{t; t \geq 1}$

Actuellement, nous travaillons sur la modélisation de deux réseaux d’AOPs : i) la stéatose et ii) la dégénérescence rénale chronique. Pour ces deux AOPs, nous disposons de données incomplètes sur les différents KEs. En effet, les données sont partielles puisqu’elles sont souvent issues de différentes expérimentations bibliographiques (données de toxicologie) réalisées indépendamment les unes des autres et dont les objectifs diffèrent de la modélisation de qAOPs. Par conséquent, les pas de temps de collecte des données peuvent ne pas être les mêmes, ou n’être pas constants. Dans ce cas, une mise en congruence de pas est nécessaire par imputation. Ceci est facilement réalisable dans le cadre de l’inférence bayésienne sur le modèle DBN linéaire généralisé (2) en introduisant les données manquantes comme paramètres supplémentaires à calibrer. Un modèle DBN linéaire gaussien classique (1) aurait plus de difficultés (cf Section 3.3 Discussion).

1. Les dépendances instantanées, e.g., $DN \rightarrow TN$ et $TN \rightarrow TN$, sont aussi autorisées mais leur modélisation revient à la situation des réseaux bayésiens non dynamiques. Elles ne sont donc pas dans le cadre de notre étude.

Exemple illustratif

Voici un exemple pour illustrer le type de données incomplètes que l'on peut avoir dans un contexte réel.

Soit l'AOP très simple :

$$X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow X_3$$

On dispose 2 jeux de données incomplètes de forme suivante :

- $\mathcal{D}_1 := \{(X_1, X_2)_{n_{t1} * \Delta t_1, n_{r1}}\}$ pour X_3 non mesurés.
- $\mathcal{D}_2 := \{(X_1, X_3)_{n_{t2} * \Delta t_2, n_{r2}}\}$ pour X_2 non mesurés.

avec

- Δt . délais entre deux observations consécutives : $\Delta t. \in \mathbb{R}^+$
- n_r . et N . : indice et nombre total de répliques : $n_r. \in \{1, \dots, N\}$ avec $N. \in \mathbb{N}^+$
- n_t . et T . : indice et nombre total d'observations par réplique : $n_t. \in \{1, \dots, T\}$

avec $T. \in \mathbb{N}^+$

Si $\Delta t_1 \neq \Delta t_2$, alors l'imputation est nécessaire pour la modélisation de $X_2 \rightarrow X_3$.

2. Réseaux bayésiens dynamiques linéaires

2.1. Réseaux bayésiens dynamiques : Dépendance linéaire classique

La méthode de référence consiste à modéliser les dépendances causales dynamiques de type $SN \rightarrow DN$ et $DN \rightarrow DN$ par un modèle linéaire gaussien (il s'agit d'un modèle d'espace-état linéaire-gaussien à temps discret, (Durbin, Koopman, 2012)).

Notations :

- C_t, P_t : activités respectives du nœud enfant et du nœud parent en temps t ,
- ϵ : bruit de transition,
- $\alpha, \beta_{prev}, \beta_{curr}, \sigma$: paramètres.

Le modèle linéaire gaussien classique est donné par

$$C_{t+1} = \alpha + \beta_{prev} C_t + \beta_{curr} P_{t+1} + \epsilon \quad (1)$$

avec $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$

REMARQUE 3. — Le cas de $\beta_{prev} < 0$ ne nous intéresse pas, car il rend le problème d'estimation dépendant du pas d'observation.

Lorsque $\beta_{prev} = 0$, le nœud enfant devient un nœud temporaire et on se ramène à un modèle BN puisqu'on a alors une relation de type DN ou $SN \rightarrow TN$.

Pour $\beta_{prev} \geq 1$, le système diverge, il est donc instable au cours du temps. Dans notre application cette divergence ne présente pas d'intérêt, ainsi on se focalise par la suite uniquement sur le cas $\beta_{prev} \in]0, 1[$. \square

2.2. Réseaux bayésiens dynamiques : Dépendance linéaire généralisée

Dans cet article, nous proposons une forme généralisée pour la modélisation de ces dépendances conditionnelles qui sont exprimées explicitement en fonction de l'intervalle temporel h .

Notations :

- C_t, P_t : activités respectives du nœud enfant et du nœud parent en temps t ,
- h : intervalle temporel entre deux temps d'observation consécutifs,
- $S_C[P_t]$: état vers lequel évolue C_t lorsque l'état de P_t est connu; c'est une fonction déterministe de P_t ,
- ϵ : bruit de transition,
- $\beta, \beta_0, \nu, \sigma$: paramètres.

Notre modèle DBN linéaire généralisé est donné par le système d'équations (2)

$$S_C[P_{t+h}] - C_{t+h} = (S_C[P_{t+h}] - C_t) e^{-\nu h} + \sqrt{\frac{1 - e^{-\nu h}}{1 - e^{-\nu}}} \epsilon$$

avec $S_C[P_{t+h}] = \beta P_{t+h} + \beta_0$ (2)

$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

$$\nu > 0, h \in \mathbb{R}^+$$

REMARQUE 4. — Pour $h = 1$, le modèle DBN linéaire généralisé (2) est équivalent (cf annexe A) au modèle linéaire gaussien (1) dont le paramètre $\beta_{prev} \in]0, 1[$. \square

REMARQUE 5. — La linéarité du modèle DBN linéaire généralisé (2) a un double sens :

1. en fixant $h = 1$, son équivalence avec le modèle (1) ayant une forme linéaire ;
2. la dépendance linéaire de S_C par rapport à P_t .

\square

2.3. Avantages du modèle DBN généralisé (2)

Un modèle mieux interprétable

Au regard de notre contexte biologique, face à une perturbation, un système biologique présente des mécanismes complexes de régulation pour se stabiliser, c'est-à-dire retrouver, au fur et à mesure, un nouvel état d'équilibre.

Nous faisons l'hypothèse que l'état d'équilibre, encodé par S_C , dépend instantanément de l'intensité de la perturbation P_t . L'état du système C_t converge vers $S_C[P_t]$ à une vitesse exponentielle contrôlée par le paramètre ν .

Un modèle plus facile à généraliser dans le cas $S_C[P_t]$ non linéaire.

Nous pouvons par exemple, considérer un modèle non linéaire (3) qui contient un paramètre supplémentaire α par rapport au modèle DBN linéaire généralisé (2) :

$$S_C[P_{t+h}] - C_{t+h} = (S_C[P_{t+h}] - C_t) e^{-\nu h} + \sqrt{\frac{1 - e^{-\nu h}}{1 - e^{-\nu}}} \epsilon$$

$$\text{avec } S_C[P_{t+h}] = \alpha(1 - e^{-\beta P_{t+h}}) + \beta_0$$

$$\nu > 0, \alpha > 0, h \in \mathbb{R}^+$$
(3)

La flexibilité du modèle (2) facilite l'intégration des connaissances des experts du domaine (les toxicologues dans notre contexte). En effet, les toxicologues experts ont souvent une idée de l'évolution de S_C selon les KEs et le fait que dans le modèle (2) S_C s'exprime directement au travers de P_t rend possible l'intégration de ces connaissances. Cela n'est en revanche pas faisable dans le modèle (1).

Invariance des paramètres du modèle (2) par rapport à l'intervalle h

Contrairement au modèle classique (1), les paramètres du modèle généralisé (2) sont invariants quel que soit h pour les dépendances temporelles de types $SN \rightarrow DN$ (cf Section 3.3).

3. Application à l'inférence paramétrique sur les qAOPs

3.1. Données simulées

Pour valider la robustesse du modèle généralisé (2) face au problème des données manquantes (voir la Section 1.3).

Nous proposons de comparer le comportement de deux modèles au travers d'un jeu de données simulées :

$$\mathcal{D}_1 := \{X_{t,1}, C_{1t,i}, C_{2t,i}\}_{t \in \{1, \dots, 72\}, i \in \{1 \dots 8\}}$$

pour l'AOP suivant :

$$\begin{array}{ccccc} SN & \rightarrow & DN & \rightarrow & DN \\ X_{t,i} & \rightarrow & C_{1t,i} & \rightarrow & C_{2t,i} \end{array}$$

où

- X représente un produit chimique introduisant un MIE au système,
- $C_{1t,i}$ représente l'activité du MIE pour la réplique $i \in \{1 \dots 8\}$ mesurée au temps $t \in \{0 \dots 72\}$, et où l'unité de t est l'heure et le pas de temps est égal à 1 heure,

– $C_{2t,i}$ représente l'activité de l'AO dont les indices ont la même signification que ceux de $C_{1t,i}$

Les données \mathcal{D}_1 sont simulées à partir du modèle (2) à un pas de temps égal à 1 heure avec les paramètres suivants:

- $\beta = 1.5, \beta_0 = 2.0, \nu = 0.08, \sigma = 0.15$ pour $X \rightarrow C_1$
- $\beta = 0.3, \beta_0 = 1.5, \nu = 0.05, \sigma = 0.07$ pour $C_1 \rightarrow C_2$

Au vu de l'équivalence entre les deux modèles (voir Annexe A), le jeu de données \mathcal{D}_1 correspond à la réalisation de données issues du modèle DBN linéaire classique (1) en utilisant les paramètres suivants :

- $\alpha = 0.1538, \beta_{prev} = 0.9231, \beta_{curr} = 0.1153, \sigma = 0.15$ pour $X \rightarrow C_1$
- $\alpha = 0.0732, \beta_{prev} = 0.9512, \beta_{curr} = 0.0146, \sigma = 0.07$ pour $C_1 \rightarrow C_2$

Ensuite, on construit deux jeux de données \mathcal{D}_2 et \mathcal{D}_3 , tels que :

- $\mathcal{D}_2 \subset \mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2 = \{X_{t,i}, C_{1t,i}, C_{2t,i}\}_{i \in \{1 \dots 8\}, t=3n; n \in \{1, \dots, 24\}}$
- $\mathcal{D}_3 \subset \mathcal{D}_2 \subset \mathcal{D}_1, \mathcal{D}_3 = \{X_{t,i}, C_{1t,i}, C_{2t,i}\}_{i \in \{1 \dots 8\}, t=6n; n \in \{1, \dots, 12\}}$

3.2. Inférence bayésienne et implémentation

L'inférence des paramètres est effectuée via l'approche bayésienne par des méthodes MCMC avec

- pour le modèle DBN classique (1), des distributions a priori non informatives (loi uniforme impropre) sur tous les paramètres : $\alpha, \beta_{prev}, \beta_{curr}$ et σ .
- pour le modèle DBN généralisé (2), des distributions a priori non informatives (loi uniforme impropre) sur les paramètres β, β_0, σ et une distribution a priori gaussienne faiblement informative ($N(0, 10^2)$) sur ν .

Le programme d'inférence est codé en langage mc-Stan et manipulé à travers l'interface R sur la plateforme MacOS. La machine de calcul possède un CPU de modèle i5 double cœur à 3.1 GHz et une mémoire de 8 GB à 2133 MHz.

3.3. Résultats

Avec 4000 itérations, dont 2000 préliminaires, les estimations des paramètres par la moyenne *a posteriori* des deux modèles pour les deux types de dépendances : $SN \rightarrow DN$ et $DN \rightarrow DN$ sont fournies dans les tableaux 1 et 2.

Tableau 1. Paramètres caractérisant la dépendance entre X et C_1

TrainSet	Δt	Modèle	$\hat{\alpha}$	$\hat{\beta}_{prev}$	$\hat{\beta}_{curr}$	$\hat{\sigma}$	RunTime (s)
\mathcal{D}_1	1	DBNLC	0.1501	0.9239	0.1142	0.1455	42
\mathcal{D}_2	3		0.4263	0.7892	0.3169	0.2324	10.5
\mathcal{D}_3	6		0.7452	0.6211	0.5702	0.3059	5
Vrai	1	DBNLC	0.1538	0.9231	0.1153	0.15	
TrainSet	Δt	Modèle	$\hat{\beta}$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\nu}$	$\hat{\sigma}$	RunTime (s)
\mathcal{D}_1	1	DBNLG	1.504	1.974	0.0789	0.1454	41
\mathcal{D}_2	3		1.504	1.975	0.0788	0.1408	12.5
\mathcal{D}_3	6		1.505	1.967	0.0792	0.1406	6.5
Vrai	1	DBNLG	1.5	2	0.08	0.15	

Tableau 2. Paramètres caractérisant la dépendance entre C_1 et C_2

TrainSet	Δt	Modèle	$\hat{\alpha}$	$\hat{\beta}_{prev}$	$\hat{\beta}_{curr}$	$\hat{\sigma}$	RunTime (s)
\mathcal{D}_1	1	DBNLC	0.0715	0.9511	0.0151	0.0716	52
\mathcal{D}_2	3		0.1926	0.8661	0.0421	0.1164	16
\mathcal{D}_3	6		0.3217	0.7728	0.0732	0.1496	9
Vrai	1	DBNLC	0.0732	0.9512	0.0146	0.07	
TrainSet	Δt	Modèle	$\hat{\beta}$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\nu}$	$\hat{\sigma}$	RunTime (s)
\mathcal{D}_1	1	DBNLG	0.3108	1.4643	0.0496	0.0716	75
\mathcal{D}_2	3		0.3155	1.4426	0.0472	0.0697	19
\mathcal{D}_3	6		0.3242	1.4161	0.0424	0.0667	9.25
Vrai	1	DBNLG	0.3	1.5	0.05	0.07	

Discussions

On peut voir que, les paramètres du modèle DBN linéaire classique (1) (DBNLC) varient en fonction de taille de pas de temps des \mathcal{D}_i . Cela suggère que les paramètres estimés à partir d'un jeu de données à un pas de temps 3 heures ne peuvent pas être utilisés directement pour l'imputation des données à un pas de temps 1 heure.

À l'inverse, les estimations des paramètres du modèle DBN linéaire généralisé (2) (DBNLG) sont plus robustes à ce changement de pas de temps.

Il faut remarquer que le pas de temps est néanmoins fixé au sein du même jeu de données simulées. Ceci peut ne pas être le cas dans la réalité, si les observations de la même expérience biologique sont effectuées à des pas de temps non réguliers (e.g. des délais entre les observations qui alternent entre 8 heures et 12 heures.)

4. Conclusions et perspectives

Nous avons présenté dans cet article un modèle linéaire généralisé (2) qui correspond à une extension du modèle linéaire gaussien classique. En particulier, dans le contexte de $SN \rightarrow DN$, on peut s'affranchir de l'hypothèse d'observations équi-espacées temporellement, grâce à l'incorporation explicite de l'intervalle de temps dans le modèle qui dissocie les paramètres du facteur temporel. Néanmoins, dans le cas $DN \rightarrow DN$, cette hypothèse doit être satisfaite mais elle est moins cruciale que pour le modèle linéaire gaussien. Le modèle généralisé (2) est également plus flexible au sens où il peut être facilement étendu à des familles de modèles non linéaires (cf. modèle (3)).

Les propriétés du modèle généralisé sont importantes pour son application aux qAOPs car i) les données expérimentales peuvent être récoltées à des pas de temps non réguliers et ii) même s'ils le sont, la taille du pas peut varier d'une source de données à une autre.

5. Remerciements

F. Bois est financé par le projet EU-ToxRisk du programme Horizon 2020 de la Commission Européenne (Contrat No. 681002) et par le PNREST Anses, 2014/1/093

Bibliographie

- Durbin J., Koopman S. J. (2012). *Time series analysis by state space methods* (2^e éd.). Oxford University Press.
- Gust K. A., Collier Z. A., Mayo M. L., Stanley J. K., Gong P., Chappell M. A. (2015). Limitations of toxicity characterization in life cycle assessment: Can adverse outcome pathways provide a new foundation? *Integrated Environmental Assessment and Management*, vol. 12, n° 3, p. 580-590.
- Jaworska J. (2016). Integrated testing strategies for skin sensitization hazard and potency assessment—state of the art and challenges. *Cosmetics*, vol. 3, n° 2.
- Leist M., Ghallab A., Graepel R., Marchan R., Hassan R., Bennekou S. H. *et al.* (2017, 01 Nov). Adverse outcome pathways: opportunities, limitations and open questions. *Archives of Toxicology*, vol. 91, n° 11, p. 3477–3505.
- Mihajlovic V., Petkovic M. (2001). *Dynamic bayesian networks: A state of the art* (vol. TR-CTIT-34).
- Schäfer R., Weyrath T. (1997). Assessing temporally variable user properties with dynamic bayesian networks. In A. Jameson, C. Paris, C. Tasso (Eds.), *User modeling*, p. 377–388. Vienna, Springer Vienna.

Annexe A. Équivalence entre le modèle classique (1) et le modèle généralisé (2)

Pour $\beta_{curr} \in]0, 1[$, on a

$$\begin{aligned}
 C_{t+1} &= \alpha + \beta_{prev} C_t + \beta_{curr} P_{t+1} + \epsilon_t \\
 \Leftrightarrow C_{t+1} + \frac{\alpha + \beta_{curr} P_{t+1}}{\beta_{prev} - 1} &= \beta_{prev} \left(C_t + \frac{\alpha + \beta_{curr} P_{t+1}}{\beta_{prev} - 1} \right) + \epsilon_t \\
 \Leftrightarrow \frac{\alpha + \beta_{curr} P_{t+1}}{1 - \beta_{prev}} - C_{t+1} &= \beta_{prev} \left(\frac{\alpha + \beta_{curr} P_{t+1}}{1 - \beta_{prev}} - C_t \right) + \epsilon'_t
 \end{aligned}$$

avec $\epsilon_t \sim N(0, \sigma^2)$ et $\epsilon'_t = -\epsilon_t$.

En posant :

- $S[P_t] := \beta P_t + \beta_0$ avec $\beta = \frac{\beta_{curr}}{1 - \beta_{prev}}$ et $\beta_0 = \frac{\alpha}{1 - \beta_{prev}}$,
- $h = 1$,
- $e^{-\nu h} = \beta_{prev}$ avec $\nu > 0$ qui correspond à $\beta_{prev} \in]0, 1[$,

on obtient :

$$\begin{aligned}
 S[P_{t+1}] - C_{t+1} &= (S[P_{t+1}] - C_t) e^{-\nu h} + \epsilon'_t \\
 C_{t+1} &= S[P_{t+1}] - (S[P_{t+1}] - C_t) e^{-\nu h} + \epsilon_t
 \end{aligned}$$

Apport des approches phylogénétiques pour expliquer l'origine des génomes mosaïques, exemple chez le Riz

Charles-Elie Rabier ¹, Vincent Berry, Fabio Pardi and Céline Scornavacca

¹LIRMM, Montpellier, France

charles-elie.rabier@umontpellier.fr

Les réseaux phylogénétiques retranscrivent l'histoire évolutive de groupes d'individus (espèces ou populations), comportant des événements de réticulation comme les phénomènes d'hybridation ou les transferts horizontaux de gènes (e.g. Solis Lemus, Ane 2016). Dans ce contexte, au sein du projet GenomeHarvest (collaboration avec le CIRAD), nous proposons une nouvelle méthode Bayésienne d'inférence de réseau phylogénétique directement depuis les alignements de séquences d'ADN. Les applications portent sur le génome du riz pour lequel plusieurs thèses s'opposent quant au processus de domestication

D'une manière générale, notre méthode se veut une généralisation de SNAPP (Bryant et al, 2012): elle repose sur une modélisation mathématique assez fine et sur des développements algorithmiques permettant le traitement d'une grande masse de données. Les modèles mathématiques étudiés sont des modèles hiérarchiques avec plusieurs niveaux stochastiques. Un processus de coalescence modélise l'évolution d'une famille de gènes à l'intérieur d'un réseau. En particulier, le modèle "multispecies coalescent" modélise le tri de lignées incomplet (ILS), une des sources principales de conflits entre arbres de gènes. A chaque nœud de réticulation du réseau (i.e. nœud possédant 2 parents), une lignée génétique hérite du matériel génétique d'un de ces parents, avec une certaine probabilité (Yu et al. 2012). Le deuxième niveau stochastique s'avère le suivant. Conditionnellement à l'arbre généalogique de la famille de gènes (paramètre non observé), un processus de Markov est utilisé pour modéliser les mutations dans la séquence d'ADN le long de chaque branche de l'arbre.

Comme souligné dans Hohna et al. (2014, 2016), il existe un lien entre modèles phylogénétiques et modèles graphiques. Une idée principale repose sur le découpage de gros modèles probabilistes en composantes représentant des distributions de probabilités conditionnellement indépendantes. A titre d'exemple, on peut citer le logiciel CAFE (De Bie et al., 2006), qui permet le calcul de la vraisemblance de la taille d'une famille de gène à l'aide d'un algorithme, où les nœuds de l'arbre phylogénétique sont traités par « post-order ».

Dans notre étude, dans l'optique du calcul de vraisemblance, nous cherchons à parcourir le réseau de la façon la plus efficace possible, en tenant compte de la non indépendance de certaines branches, en raison des phénomènes de réticulation. Par conséquent, des algorithmes dédiés aux réseaux sont proposés. Notre méthode est implémentée en JAVA dans le logiciel BEAST, très employé dans la communauté évolution.

Révision d'une base d'informations personnelles avec gestion du vieillissement des informations

Salma Chaieb^{1,2}, Véronique Delcroix⁴, Ali Ben Mrad^{1,3},
Brahim Hnich^{1,3}, Emmanuelle Grislin⁴

1. CES, ENIS, Université de Sfax, 3038, Sfax, Tunisie

Salma.Chaieb2@yahoo.com

2. ISITCom, Université de Sousse, 4054, Hamman Sousse, Tunisie

3. Faculté des Sciences de Monastir, Skanes 5000 Monastir, Tunisie

{BenMradAli2,Hnich.Brahim}@gmail.com

4. LAMIH - UPHF - UMR 8201, Valenciennes, France

{Veronique.Delcroix,Emmanuelle.Grislin}@univ-valenciennes.fr

RÉSUMÉ. La gestion d'une base d'informations personnelles implique un recueil permanent d'informations et une surveillance constante de la qualité des informations conservées. Cet article concerne la gestion de l'incertitude liée au vieillissement des informations et le maintien de la cohérence des informations. Les connaissances générales sur les personnes considérées sont représentées par un réseau bayésien qui intègre les liens de dépendance et d'indépendance d'un ensemble de caractéristiques des personnes, avec leurs distributions de probabilités dans un contexte local. L'article propose un algorithme de révision de la base d'informations qui exploite le réseau bayésien pour identifier les informations obsolètes et responsables de contradictions avec de nouvelles informations. Il propose aussi une comparaison de la problématique de la révision d'une base d'informations avec le problème de la révision d'une base de connaissances représentée par des logiques descriptives.

ABSTRACT.

MOTS-CLÉS : information obsolète, vieillissement des informations, révision d'une base d'information, réseau bayésien

KEYWORDS:

DOI:10.3166/RIA.XX.1-9 © XXXX Lavoisier

1. Introduction

Une base d'informations personnelles regroupe des informations sur une personne humaine concernant différents aspects : morphologie, physiologie, informations médicales, géographiques, environnementales, familiales, ou encore sur le comportement, les capacités (et incapacités), les compétences, les goûts, etc. L'objectif d'une base d'informations personnelles est de fournir sans délai des informations sur une personne, demandées par un tiers autorisés. L'intérêt d'une base d'informations personnelles concerne le domaine médical et plus généralement l'ensemble des services à la personne, qu'ils soient fournis par des systèmes intelligents ou des acteurs humains. Nous travaillons dans le cadre d'un système d'aide à la prévention des chutes des personnes âgées qui requiert un ensemble d'informations sur la personne pour évaluer ses facteurs de risque de chute et sélectionner des recommandations adaptées. L'identification des caractéristiques utiles est issu d'un travail d'extraction des connaissances auprès du service de consultation sur la chute du pôle gériatrie du CHU de Lille.

Le recueil des informations utiles pour l'évaluation du risque de chute et l'élaboration des recommandations est trop long pour être acceptable en temps réel, il doit donc être fait en amont du besoin, au fil du temps. Ainsi, la base d'informations personnelles doit être en mesure de fournir à la demande la plupart des informations demandées.

Les informations personnelles ayant quasiment toutes un caractère évolutif, les valeurs sont susceptibles d'évoluer ou de changer complètement avec le temps. Par conséquent, toute information recueillie dans le passé est susceptible d'être obsolète. Il s'agit donc de gérer l'incertitude liée au vieillissement des informations.

Plus précisément, un des problèmes liés au vieillissement des informations est la détection des informations obsolètes. Cette question s'apparente au problème de la révision d'une base de connaissances, qui a été largement traité dans le cadre de la logique (Papini, 2000 ; Benferhat *et al.*, 2017). Le problème de la révision des croyances est généralement décrit comme la modification de l'état épistémique d'un agent intelligent pour intégrer de nouvelles informations : il va supprimer des informations (le moins possible) pour maintenir la cohérence de la base de connaissances. De nombreux opérateurs de révisions ont été proposés. Une approche consiste à accorder à chaque information un niveau de confiance qui décroît avec le temps (Papini, 2001). Dans le contexte d'un système de gestion des informations personnelles, nous considérons qu'une nouvelle information est certaine au moment où elle arrive. Elle est donnée sous la forme $X = x_{obs}$ et peut soit remplacer une ancienne information de la base (du type $X = x_{old}$) ou simplement être ajoutée si la base ne contient pas (ou plus) d'information sur la variable X . Dans les deux cas, l'arrivée d'une nouvelle information peut remettre en cause des informations plus anciennes.

Dans le cadre logique, on révisé la base d'informations si elle est devenue incohérente suite à l'ajout de la nouvelle information. Cependant, le cadre logique n'est pas adapté aux situations quotidiennes où un être humain reçoit une information nouvelle sur une personne qu'il connaît déjà partiellement. Dans cette situation, l'être humain est souvent confronté au doute lorsque la nouvelle information lui paraît *peu* com-

patible avec ce qu'il savait sur la personne. Il utilise ce qu'il sait sur les niveaux de dépendances entre les variables pour évaluer si la combinaison de la nouvelle information et des anciennes lui semble plutôt probable ou plutôt improbable. Dans cet article, nous proposons de représenter les connaissances génériques sur les personnes âgées sous forme d'un modèle graphique probabiliste. Ces connaissances sont considérées comme stables et ne sont pas remises en cause. En pratique, notre modèle graphique probabiliste représente la population des personnes de plus de 65 ans. Chaque base d'informations personnelles contient des informations sur une personne précise. Chaque information concerne une variable et est enregistrée avec sa date d'observation. Le problème consiste à réviser la base d'informations lorsque l'arrivée d'une nouvelle information génère une *contradiction*. La révision consiste à identifier les informations obsolètes qui sont à l'origine de la contradiction en s'appuyant d'une part sur le degré de confiance associé à l'âge des informations et d'autre part, sur le raisonnement basé sur les connaissances génériques.

Dans cet article, nous proposons un système basé sur un modèle graphique probabiliste des connaissances génériques sur la personne, qui détecte et identifie les informations obsolètes dans une base d'informations personnelles. Ce système de gestion des informations personnelles est ainsi capable de fournir à la demande une estimation des informations demandées, même lorsque les variables correspondantes n'ont jamais été observées, avec une évaluation de la fiabilité des informations fournies.

La partie suivante est consacrée à la définition formelle de la problématique, avec les notations et hypothèses. La partie 3 présente notre algorithme de détection et identification des informations obsolètes et le compare avec un algorithme de référence qui ne prend en compte que l'âge des informations. La dernière partie discute le positionnement de notre approche par rapport aux travaux existants. La problématique du vieillissement des informations étant quasiment inexistante dans la littérature, nous avons comparé avec la problématique qui s'en approche le plus, à savoir la révision des connaissances.

Nous utilisons un réseau bayésien (RB) pour modéliser les connaissances sur la personne humaine. Ce type de modèle graphique probabiliste permet de combiner les connaissances générales sur les personnes et un ensemble d'observations incomplètes sur une personne précise pour mettre à jour les croyances sur les variables non observées. Le réseau bayésien intègre les paramètres du vieillissement et leur variabilité. Il permet aussi de prendre en compte la personne elle-même en intégrant les informations disponibles qui la concerne.

2. La problématique du vieillissement des observations

Ce travail concerne la gestion des informations personnelles en vue d'une part de maintenir sa cohérence suite à l'arrivée de nouvelles informations, et d'autre part de nettoyer la base des informations obsolètes. Les informations concernent un ensemble fixe de variables qui représentent l'ensemble des caractéristiques utiles sur la personne. Cependant, la base ne contient généralement pas des informations sur toutes

les variables. Nous précisons ci-dessous le vocabulaire, les notations et les hypothèses de ce travail.

Les *connaissances* sont considérées comme certaines et stables dans le temps, elles ne sont pas remises en cause. Elles portent sur : (1) la distribution de probabilités d'un ensemble de variables pour une population d'individus — ces connaissances sont représentées par un réseau bayésien — (2) le vieillissement des observations ; ces connaissances sont représentées par des fonctions d'obsolescence.

Une *information* est l'observation de la valeur d'une variable ; elle est considérée comme certaine seulement au moment où l'observation est faite. Le degré de confiance associé à une information diminue avec le temps, suivant une fonction qui dépend de la variable.

Les *croyances* sur une variable représentent l'état cognitif d'un agent sur la valeur de cette variable à un instant donné, et pour un cas (un individu) donné, en tenant compte de ses connaissances générales et des informations dont il dispose sur ce cas. Dans le cadre du raisonnement probabiliste, les croyances concernent les variables non observées. Dans ce travail, nous considérons de plus les croyances sur les variables anciennement observées, puisqu'il y a une incertitude sur leur valeur liée au vieillissement des observations.

Les variables sont notées par des lettres majuscules et les valeurs par des lettres minuscules ; les majuscule en gras représentent des ensembles de variables et les minuscules en gras représentent des tuples de valeurs. L'ensemble des variables considérées est notée **X**.

Une des difficultés de la gestion d'une base d'informations personnelles est de raisonner à partir d'informations *incomplètes* : certaines variables n'ont jamais été observées, ou bien des observations faites dans le passé ont été déclarées obsolètes et ont été supprimées de la base d'informations.

Une autre difficulté vient du fait que les informations obsolètes sont *silencieuses* : les changements ou évolutions qui se produisent dans la vie réelle ne sont généralement associés à aucun dispositif pour alerter la base d'informations de ce changement. Le seul moyen systématique pour détecter immédiatement qu'une information de la base est devenue obsolète serait de l'observer sans cesse, ce qui n'est pas possible. Le problème est donc de proposer des mécanismes de détection des observations obsolètes.

3. Détection et identification des informations obsolètes lors de l'arrivée de nouvelles observations

La *fonction d'obsolescence* d'une variable donne le niveau de confiance concernant une observation de la variable en fonction de la durée écoulée depuis l'observation. Pour une variable donnée, c'est une fonction décroissante en fonction de l'âge de l'observation. Notons $Bel_{ageing}(X, \Delta t)$ le niveau de confiance associé à une observa-

tion quelconque sur X faite depuis une durée de temps Δt . Nous faisons l'hypothèse simplificatrice que cette fonction ne dépend que de la variable et de la durée écoulée depuis l'observation : elle ne dépend ni de la valeur observée, ni des autres observations. Remarquons toutefois que notre proposition permet de prendre en compte l'influence entre les variables pour remettre en cause une information ancienne. La table 1 illustre un exemple des fonctions d'obsolescence pour différentes variables.

X	$\Delta t \leq 1$	$1 < \Delta t \leq 3$	$3 < \Delta t \leq 12$	$12 < \Delta t$
Sexe	<i>high</i>	<i>high</i>	<i>high</i>	<i>high</i>
Isolement	<i>high</i>	<i>high</i>	<i>medium</i>	<i>low</i>
Activité physique	<i>high</i>	<i>medium</i>	<i>low</i>	<i>low</i>
Douleur	<i>medium</i>	<i>low</i>	<i>low</i>	<i>low</i>

TABLE 1. Exemple de fonction d'obsolescence $Bel_{ageing}(X, \Delta t)$, où Δt représente le nombre de mois écoulés depuis l'observation sur la variable X . Les quatre variables montrées en exemple sont des caractéristiques de la personne âgée qui entre en compte dans l'évaluation des facteurs de risque de chute.

Une idée simple pour la gestion des informations obsolètes consiste à supprimer une information lorsque son degré de confiance est trop bas (voir algorithme 1). Cependant, cet algorithme n'assure pas la cohérence des observations et il peut être exécuté indépendamment de l'arrivée d'une nouvelle information.

Algorithm 1 Algorithme de référence

Require: Base d'informations décrite par un ensemble de triplets $(X, x_{obs}, date_{obs})$ avec $X \in \mathbf{OBS}$

Ensure: Base d'informations révisée

```

for all  $X \in \mathbf{OBS}$  do
     $\Delta t = now() - date_{obs}$ 
    if  $Bel_{ageing}(X, \Delta t) = low$  then
         $\mathbf{OBS} = \mathbf{OBS} \setminus \{X\}$ 
    end if
end for
return  $\mathbf{OBS}$ 

```

L'algorithme 2 que nous proposons assure la cohérence de la base d'informations après l'arrivée d'une nouvelle information. Il révisé la base d'information en supprimant des informations anciennes de façon à restaurer la cohérence des informations, tout en prenant en compte le vieillissement des observations.

Nous présentons ci-dessous la trame principale de l'algorithme. L'évaluation de la *cohérence* (fonction `isConsistent`) d'un ensemble d'informations repose sur le modèle de connaissances probabiliste qui relie les variables de la base.

Remarque : l'ensemble \mathcal{C}_{cand} représente les observations ou sous-ensembles d'observations anciennes qui sont susceptibles d'expliquer l'incohérence avec la nouvelle

Algorithm 2 Maintien de la cohérence par détection des informations obsolètes

Require: Base d'informations *cohérente* $\mathcal{O} = \{(X, x_{obs}, date(x_{obs})), X \in \mathbf{OBS}\}$
Nouvelle information $\mathcal{Y} = (Y, y_{obs}, date(y_{obs}))$
Ensure: base d'informations \mathcal{O} révisée et *cohérente*
 $\mathcal{O}_{old} = \{(X, x_{obs}, date(x_{obs})), X \in \mathbf{OBS} \setminus \{Y\}\}$ ▷ Y peut avoir déjà été observée

$consistent = isConsistent(\mathcal{O}_{old} \cup \{\mathcal{Y}\})$
if $consistent = False$ **then**
 Soit $\mathcal{C}_{cand} \subset \mathcal{P}(\mathcal{O}_{old})$, ▷ $\mathcal{P}(\cdot)$: ensemble des parties
 while $consistent = False$ **do**
 Choisir $\mathcal{C} \in \mathcal{C}_{cand}$ un candidat pour expliquer la contradiction avec \mathcal{Y} ▷ voir remarque
 $\mathcal{O}' = \mathcal{O}_{old} \setminus \mathcal{C} \cup \{\mathcal{Y}\}$
 if $isConsistent(\mathcal{O}')$ **then**
 $consistent = True$
 end if
 end while
end if
return \mathcal{O}'

observation \mathcal{Y} . Plusieurs critères interviennent pour définir et classer les éléments de $\mathcal{C}_{candidate}$: (1) seules les variables telles qu'il existe un **chemin passant**¹ avec Y sont considérées, (2) les singletons d'observations viennent avant les paires, etc. (3) les éléments ayant le degré de confiance le plus bas sont les premiers candidats.

En termes de résultats, il est trop tôt pour donner des éléments détaillés, car il s'agit d'un travail en cours. Cependant, une première version de cet algorithme a été implémenté et testé sur une petite série d'exemples, sur un réseau bayésien jouet regroupant 13 caractéristiques d'une personne âgée (Chaieb *et al.*, 2018). D'une part, il détecte des contradictions qui concernent des observations trop récentes pour être supprimées par l'algorithme basique ; et d'autre part, il permet de conserver des observations anciennes qui ne sont pas source de contradiction même si leur degré de confiance est devenu bas.

4. Travaux connexes

Dans ce travail, la révision porte sur les anciennes observations en vue de détecter celles qui sont devenues (silencieusement) obsolètes. Il ne s'agit pas de réviser les connaissances, qui sont ici représentées par un réseau bayésien. Ces derniers sont conçus pour effectuer la mise à jour des croyances (belief update) sur les variables non observées, à partir d'observations, généralement considérées comme certaines, et

1. tel que défini dans un réseau bayésien, en lien avec la notion de d-séparation

actuelles au moment de la mise à jour. En revanche, ces modèles mais ne permettent pas la révision des connaissances, qui consisterait à changer de modèle.

Le problème de la révision d'une base d'informations collectées au fil du temps s'apparente en partie à la théorie de la révision des croyances (Katsuno, Mendelzon, 1992; C. Alchourron *et al.*, 1985) présenté comme suit dans (Zwirn, Zwirn, 2003) : *Nous modifions sans cesse nos croyances lorsque nous sommes confrontés à des informations contredisant ce qui nous semblait acquis. Les logiciens ont développé des théories qui formalisent ces mécanismes.* Les principales différences avec ces travaux concernent la représentation probabiliste des connaissances générales — et non une représentation logique — et le contexte particulier de l'incertitude liée au vieillissement des observations. Dans les deux cas, l'identification des éléments à réviser vise à restaurer la cohérence de la base. Cependant, à la différence du cadre logique, la définition de la cohérence dans le cadre probabiliste peut avoir une acceptation plus large. Le tableau 2 présente quelques points de comparaison du présent travail avec la théorie de la révision des connaissances.

Dans le cadre de la révision des croyances, des travaux récents (Benferhat *et al.*, 2017) proposent un cadre basé sur les ontologies qui permet de réviser uniquement la partie des connaissances qui concernent les instances (par exemple des individus) sans remettre en cause les connaissances générales modélisées dans l'ontologie. Ces travaux utilisent différents niveaux de priorité qui reflètent par exemple la fiabilité des informations. La notion de priorité est très importante dans les systèmes à base de connaissances car elle simplifie le maintien de la cohérence (Benferhat *et al.*, 2010). Dans le cadre de la gestion d'une base d'informations personnelles, ces priorités pourraient refléter le niveau de confiance associé à une information en fonction de son âge. Cependant, les logiques descriptives sont bien adaptées à représentation des connaissances terminologiques, mais ne permettent pas de modéliser des connaissances sur les liens de dépendance ou d'indépendance entre différentes variables et la force de ces liens en prenant en compte la variabilité des individus et des situations. Or nous proposons d'exploiter ce type de connaissances générales (sous forme de distributions de probabilités conditionnelles) car elles nous permettent d'évaluer si un ensemble d'informations sur une personne semble plus ou moins vraisemblable ou pas.

5. Conclusion

Dans cet article, nous avons expliqué la problématique de la gestion d'une base d'informations personnelles qui cumule des informations recueillies au cours du temps. La gestion de l'incertitude liée au vieillissement des observations est une question clairement non traitée dans la littérature. Nous avons établi une comparaison avec la théorie de la révision des croyances. Nous proposons un système de gestion des informations personnelles basé sur un réseau bayésien qui permet de modéliser les connaissances générales et statistiques sur un ensemble de caractéristiques pour la population des personnes considérées. La gestion de la base d'informations consiste à détecter si l'arrivée d'une nouvelle information remet en cause la cohérence de la base

	Théorie de la révision des croyances / connaissances	Révision d'une base d'informations personnelles
Contexte de la révision	révision des connaissances dans un <i>monde</i> statique	révision des informations anciennes qui évoluent ou changent avec le temps
Connaissance	susceptible d'être révisée	stable, générale (statistique sur une population), non remise en cause
Représentation des connaissances	logique	réseau bayésien
Information	même niveau que les connaissances	considérée comme certaine seulement au moment de son observation
Représentation d'une information	formule propositionnelle	observation datée sur une variable (déjà observée ou pas)
Croyance	statut épistémique d'une formule (vrai, faux ou indéterminé)	état cognitif concernant une variable non observée, basé sur les connaissances générales et les informations disponibles sur la personne considérée
Révision	changement du statut épistémique des éléments identifiés (de vrai à faux ou de faux à vrai mais pas de ou vers un statut indéterminé)	suppression de la base des informations obsolètes identifiées (les variables concernées redeviennent non observées)
Critère de révision	minimalité de l'ensemble des éléments révisés, ordre partiel ou priorité, etc.	probabilité jointe de l'ensemble des observations, vraisemblance des anciennes observations

TABLE 2. *Comparaison entre la théorie de la révision des croyances et la révision d'une base d'informations personnelles.*

et dans ce cas, à identifier les observations anciennes responsables de la contradiction. Ces observations sont alors considérées comme obsolètes et sont supprimées de la base d'informations.

Une perspective de ce travail est d'intégrer la modélisation de l'incertitude liée au vieillissement dans le réseau bayésien au moyen d'observations incertaines (Mrad *et al.*, 2015). Une autre aspect concerne l'obtention d'une base d'informations la plus complète possible dans un contexte de recueil d'informations parcimonieux. En effet, lors du recueil de nouvelles informations par interaction directe avec la personne, il est

souvent nécessaire de limiter le nombre de questions posées pour des raisons de temps et d'acceptabilité du système. Le choix des meilleures questions peut être guidé par différents critères, dont la maximisation du *niveau informationnel* de la base (l'observation de certaines variables apportent plus d'informations que d'autres). Enfin à plus long terme, le recueil des informations pourrait se baser sur différentes sources, de type et de fiabilité différentes, avec les problématiques associées de fusion de données et d'incertitude liées aux différentes sources.

Remerciements

Ce travail est soutenu par le projet ELSAT2020 (Eco-mobilité Logistique Sécurité et Adaptabilité dans les Transports à l'Horizon 2020) et cofinancé par l'Union Européenne avec le Fond européen de développement régional, l'État et la Région Hauts de France. Les auteurs remercient le support de ces institutions.

Bibliographie

- Benferhat S., Ben-Naim J., Papini O., Würbel E. (2010). An answer set programming encoding of prioritized removed sets revision: application to GIS. *Appl. Intell.*, vol. 32, n° 1, p. 60–87.
- Benferhat S., Bouraoui Z., Papini O., Würbel E. (2017). Prioritized assertional-based removed sets revision of dl-lite belief bases. *Ann. Math. Artif. Intell.*, vol. 79, n° 1-3, p. 45–75.
- C. Alchourron C., Gärdenfors P., Makinson D. (1985). On the logic of theory change : partial meet contraction and revision functions. *Journal of Symbolic Logic*, vol. 50, p. 510-530.
- Chaieb S., Delcroix V., mrad A. B., strugeon E. G.-L. (2018). Réseau bayésien pour la gestion de l'obsolescence dans une base d'informations en vue de l'évaluation du risque de chute des personnes âgées. *Revue des Nouvelles Technologies de l'Information, "Extraction et Gestion des Connaissances, EGC 2018", E-34*, p. 359-364.
- Katsuno H., Mendelzon A. O. (1992). On the difference between updating a knowledge base and revising it. In *Belief revision*, p. 183-203. Cambridge University Press.
- Mrad A. B., Delcroix V., Piechowiak S., Leicester P., Abid M. (2015). An explication of uncertain evidence in bayesian networks: likelihood evidence and probabilistic evidence - uncertain evidence in bayesian networks. *Appl. Intell.*, vol. 43, n° 4, p. 802–824.
- Papini O. (2000). Knowledge-base revision. *Knowledge Engineering Review*, vol. 15, n° 4, p. 339-370.
- Papini O. (2001). Iterated revision operations stemming from the history of an agent's observations. In M.-A. Williams, H. Rott (Eds.), *Frontiers in belief revision, part of the applied logic series book series (apls, volume 22)*, p. 279-301. Dordrecht, Springer.
- Zwirn D., Zwirn H. (2003). La révision des croyances. *Pour la science*, n° 311.

Classification non supervisée de graphes orientés : faut-il distinguer les nœuds origines des nœuds terminaux ?

Gilles Celeux¹, Yann Vasseur²

1. Inria et Laboratoire de Mathématiques d'Orsay

Université Paris-Sud

91405 Orsay, France

gilles.celeux@inria.fr

2. Laboratoire de Mathématiques d'Orsay

Université Paris-Sud

91405 Orsay, France

yann.vasseur@math.u-psud.fr

RÉSUMÉ. Le "Stochastic Block Model" (SBM) est communément utilisé pour la classification non supervisée de graphes non orientés. Il est cependant également utilisé pour la classification non supervisée de graphes orientés. Ce choix est contestable car ce modèle ne distingue pas les nœuds origines des nœuds terminaux. Aussi, on peut préférer le "Latent block model" (LBM) pour la classification de graphes orientés. En effet, ce modèle construit deux classifications, l'une pour les nœuds origines, l'autre pour les nœuds terminaux. Nous analysons les différences entre SBM et LBM pour la classification d'un graphe orienté à partir d'une étude de cas réel. Ce cas a trait à la classification d'un réseau de gènes où nous distinguons les gènes régulateurs des gènes régulés.

ABSTRACT. The "Stochastic Block Model" (SBM) is commonly used for the clustering of undirected graphs. Moreover, it is used for the clustering of directed graphs too. This choice is disputable because this model makes no difference between the source and target nodes. That is why the use of a "Latent block model" (LBM) could be preferred for directed graphs clustering. Indeed, this model builds two different clusterings for the source and target nodes. Differences between SBM and LBM for directed graphs clustering are analyzed through a real case. This case deals with the classification of a network of genes where regulated genes and regulator genes are differentiated.

MOTS-CLÉS : Classification non supervisée de graphes orientés ; Réseaux de gènes ; Vraisemblance pénalisée ; Co-clustering

KEYWORDS: Clustering for directed graphs ; Genes networks ; Penalized log-likelihood ; Co-clustering

1. Introduction

Pour classer les nœuds d'un graphe orienté plusieurs modèles probabilistes sont disponibles. Matias et Robin (Matias, Robin, 2014) ont passé en revue les méthodes existantes fondées sur une structure latente et permettant d'atteindre cet objectif. Le modèle à blocs stochastiques (SBM) y est en particulier exposé. Issu des travaux de Frank et Harary (Frank, Harary, 1982) et de Holland *et al.* (1983), le SBM a été conçu pour la classification de graphes non orientés. Plusieurs généralisations importantes du modèle ont vu le jour telles que son extension à des graphes pondérés ou orientés (Mariadassou *et al.*, 2010). Cette dernière généralisation permet donc au SBM d'être appliqué sur des matrices d'adjacence de graphes orientés, donc non symétriques.

Cependant ce modèle ne semble pas convenir parfaitement à l'objectif de double classification induite par les graphes orientés. En effet, le SBM produit une classification unique des nœuds. Cela est justifié pour la classification de graphes non orientés où les nœuds origines et les nœuds terminaux sont indiscernables. Cela l'est moins pour la classification de graphes orientés où les nœuds origines et les nœuds terminaux ont des rôles différents. Un graphe est caractérisé par sa matrice d'adjacence binaire $A : A_{jj'} = 1$ s'il existe une arête entre j et j' , et 0 sinon. Si le graphe est non orienté, cette matrice est symétrique. Si le graphe est orienté, elle n'est pas en général symétrique. Le modèle des blocs latents (LBM) tient compte de cette dissymétrie de la matrice d'adjacence A car il produit une classification des nœuds origines et une classification des nœuds terminaux.

Dans la suite nous présentons d'abord le LBM, puis le SBM et nous les comparerons sur une étude de cas relevant de la génomique. Une petite discussion sur les mérites respectifs des deux modèles pour la classification d'un graphe orienté termine l'article.

2. Modèles à blocs latents (LBM)

On considère la matrice d'adjacence $A = (A_{jj'})$ d'un graphe orienté comme étant une réalisation d'une variable aléatoire $C = (C_{jj'})$, $j = 1, \dots, J$ et $j' = 1, \dots, J'$.

Le LBM, introduit par G. Govaert et M. Nadif (Govaert, Nadif, 2007), repose sur plusieurs hypothèses :

- Il existe une structure en blocs des données et ces blocs sont obtenus par le produit cartésien d'une partition des lignes en H classes représentée par sa matrice indicatrice $v = (v_{jh}; j = 1, \dots, J; h = 1, \dots, H)$ et d'une partition des colonnes en L classes représentée par sa matrice indicatrice $w = (w_{j'\ell}; j' = 1, \dots, J'; \ell = 1, \dots, L)$. Ces partitions sont définies par :

- $\forall j = 1, \dots, J, v_{jh} = 1 \Leftrightarrow$ le nœud j appartient à la classe h en ligne.

- $\forall j' = 1, \dots, J', w_{j'\ell} = 1 \Leftrightarrow$ le nœud j' appartient à la classe ℓ en colonne.

- Les variables latentes V et W sont indépendantes :

$$\forall (v, w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}, \quad p(v, w) = p(v)p(w),$$

avec $p(v) = \prod_{j,h} \rho_h^{v_{jh}}$ et $p(w) = \prod_{j',\ell} \tau_\ell^{w_{j'\ell}}$, où $\rho_h = \mathbb{P}(v_{jh} = 1), h = 1, \dots, H$ et $\tau_\ell = \mathbb{P}(w_{j'\ell} = 1), \ell = 1, \dots, L$ sont respectivement les proportions des classes en ligne et en colonne.

- Les variables aléatoires $C_{jj'}$ sont conditionnellement indépendantes sachant les partitions v et w . De plus, ces variables $C_{jj'}$ suivent une loi paramétrique de densité ϕ qui dépend de la nature des données modélisées.

La matrices d'adjacence d'un graphe orienté étant binaire, nous sommes dans le cas d'application développée dans Govaert, Nadif (2007). Ainsi, la distribution paramétrique conditionnelle $\phi(A_{jj'}; \alpha_{h\ell})$ de la variable $C_{jj'}$ sachant que v_{jh} et $w_{j'\ell}$ valent 1, est supposée être une loi de Bernoulli $\mathcal{B}(\alpha_{h\ell})$ où $\alpha_{h\ell}$ représente l'interaction à l'intérieur du bloc $h\ell$.

La densité conditionnelle pour une observation $A_{jj'}$ du bloc $h\ell$ s'écrit alors :

$$\phi(A_{jj'}; \alpha_{h\ell}) = \alpha_{h\ell}^{A_{jj'}} \times (1 - \alpha_{h\ell})^{1-A_{jj'}}.$$

Par conséquent, la densité marginale de A peut être vue comme une densité de mélange

$$\begin{aligned} p(A; \theta) &= \sum_{(v,w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}} p(v; \theta) p(w; \theta) p(A|v, w; \theta) \\ &= \sum_{(v,w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}} \prod_{j,h} \rho_h^{v_{jh}} \prod_{j',\ell} \tau_\ell^{w_{j'\ell}} \prod_{h,j,j',\ell} \phi(A_{jj'}; \alpha_{h\ell})^{v_{jh} w_{j'\ell}}, \end{aligned} \quad (1)$$

où \mathcal{V} et \mathcal{W} représentent l'ensemble des partitions possibles pour les lignes et les colonnes, et $\theta = (\rho, \tau, \alpha)$ le vecteur de paramètres du modèle.

L'estimation des paramètres de ce modèle se fera à l'aide du couplage entre un échantillonneur de Gibbs et un algorithme variationnel *V-Bayes* (Keribin *et al.*, 2015), correspondant à une version bayésienne de l'algorithme EM variationnel (VEM) (Govaert, Nadif, 2008). Pour décider du nombre de couples de classes, une fois le paramètre θ fixé, le critère ICL (*Integrated Likelihood Criterion*) (Biernacki *et al.*, 2000) sera utilisé.

3. Modèles à blocs stochastiques (SBM)

Le SBM peut être vu comme un LBM contraint où les partitions en ligne v et les partitions en colonne w , ainsi que leurs proportions associées ρ et τ sont les mêmes. Ceci résulte du fait que le SBM ne construit qu'une seule partition des nœuds d'un

graphe. Cette partition en K composantes correspond donc à une classification unique dont la matrice d'incidence $z = (z_{jk}; j = 1, \dots, J; k = 1, \dots, K)$ est définie par :

- $\forall j \in J, z_{jk} = 1 \Leftrightarrow$ le nœud j appartient à la classe k .
- $p(z) = \prod_{j,k} \pi_k^{z_{jk}}$ avec $\pi_k = \mathbb{P}(z_{jk} = 1), k = 1, \dots, K$.

Avec les mêmes notations que dans la partie précédente, la densité marginale de la matrice d'adjacence A est une densité de mélange

$$p(A; \theta) = \sum_{z \in \mathcal{Z}} \prod_{j,k} \pi_k^{z_{jk}} \prod_{j',k'} \pi_{k'}^{z_{j'k'}} \prod_{k,j,j',k'} \phi(A_{jj'}; \alpha_{kk'})^{z_{jk} z_{j'k'}}. \quad (2)$$

L'équation 2 montre que les nœuds j et j' , qu'ils soient nœuds origines ou nœuds terminaux, ont la même probabilité d'appartenance π_k à la classe k pour le modèle SBM. Comme pour le LBM, l'estimation des paramètres du SBM se fera à l'aide du couplage entre un échantillonneur de Gibbs et un algorithme variationnel *V-Bayes* et celui du choix de nombre de classes à l'aide du critère ICL.

Le SBM est donc un modèle restrictif qui contraint les nœuds origines et les nœuds terminaux au même rôle. Mais, il est plus facile à estimer et à interpréter. Dans la section suivante, nous comparons ces deux modèles sur un cas réel où tous les deux pourraient être pertinents.

4. Étude de cas : réseau de gènes

Nous avons testé les deux méthodes de classification non supervisée sur des graphes orientés dans le cadre d'un réseau de gènes. L'organisme sur lequel est réalisée l'étude est la plante chlorophyllienne *Arabidopsis thaliana*. À l'aide de données d'expression des gènes de la plante, nous avons mis en place un graphe orienté modélisant le réseau de gènes. Ce graphe a été réalisé à l'aide de procédures de sélection de variables fondées sur des régressions linéaires pénalisées et des méthodes de rééchantillonnage (cf. Vasseur (2017)). Une fois ce réseau mis en place, l'objectif biologique est de regrouper les gènes du réseau en deux types de classification : une visant à les classer en gènes régulateurs et une seconde en gènes régulés. Vasseur (2017) a utilisé pour cela un LBM. Maintenant, nous allons mettre en concurrence la double classification en gènes régulateurs et gènes régulés obtenue par le LBM avec celle fournie par un SBM. L'utilisation d'un SBM plutôt qu'un LBM peut se justifier du fait que le nombre de couples de gènes mutuellement régulateurs et régulés est important (pas loin de 50 %). Par ailleurs, il faut noter que les nombres de classes de gènes régulateurs et de gènes régulés choisis par ICL sont proches (resp. 30 et 29 classes), voir figure 1. Un bloc "noir" indique de forts liens de régulation entre les gènes régulateurs en colonne et les gènes régulés en ligne.

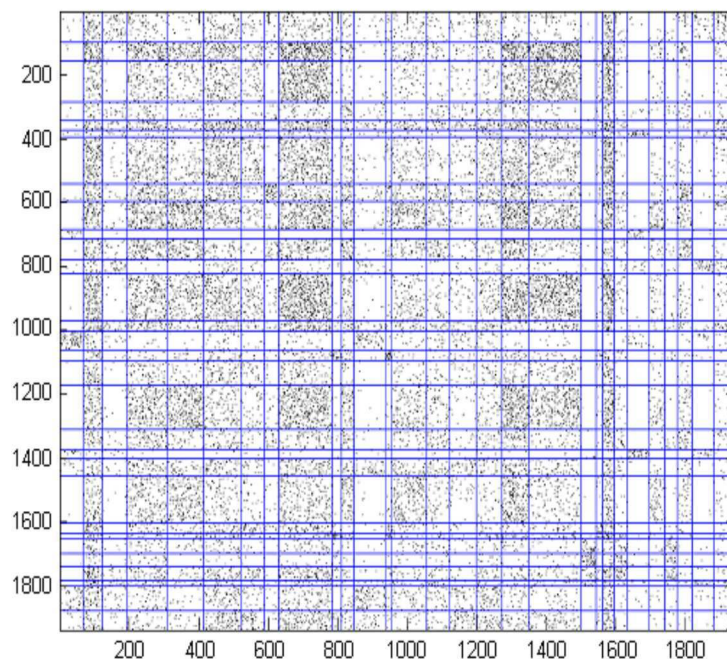


Figure 1. Matrice d'adjacence réorganisée par un LBM avec 30 classes en ligne (gènes régulés) et 29 classes en colonne (gènes régulateurs). Les blancs correspondent à des zéros dans la matrice d'adjacence du graphe et les points noirs à des uns.

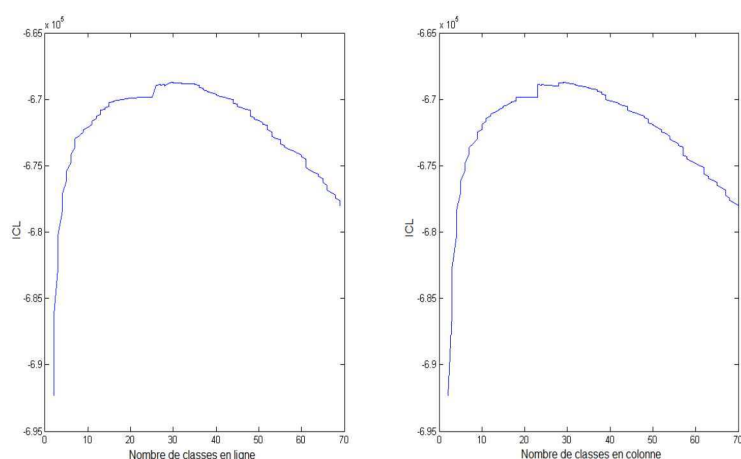


Figure 2. Valeurs du critère ICL pour le LBM en fonction du nombre de blocs ; à gauche les gènes régulés, à droite les gènes régulateurs.



Figure 3. Matrice d'adjacence réorganisée par un SBM avec 22 classes. Les blancs correspondent à des zéros dans la matrice d'adjacence du graphe et les points noirs à des uns.

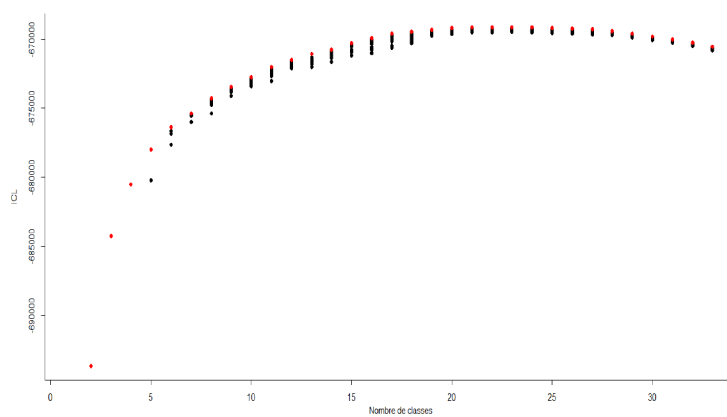


Figure 4. Valeurs du critère ICL pour le SBM en fonction du nombre de blocs.

L'exécution du SBM pour ces données conduit à choisir la solution en 22 classes. (Voir la figure 4.) La figure 3 donne la réorganisation des données suivant les 22 classes. Un

bloc "noir" indique de forts liens de régulation entre les gènes sans que l'on puisse en dire plus. Il faut noter que la solution du SBM est moins satisfaisante à deux égards. D'une part le critère ICL donne une valeur moins bonne (SBM : -669 132, LBM : 668 523), cf. figure 2. D'autre part, les classes sont moins nettes et le nombre de petits groupes, qui intéressent beaucoup les biologistes, est faible.

5. Discussion

Par cet article, nous voulons attirer l'attention sur le fait que le SBM n'est pas le choix le plus naturel pour la classification d'un graphe orienté. La bonne solution est peut-être d'utiliser le LBM et le SBM conjointement. Le choix final peut se faire par le critère ICL ou par des considérations de pertinence d'interprétation des blocs trouvés. La comparaison des blocs exhibés par les deux méthodes pourrait conduire à des remarques intéressantes. Mais réaliser proprement de telles comparaisons n'est pas chose facile. Le recours aux critères de comparaison de partitions, type ARI (Hubert, Arabie, 1985) ou mieux CARI (Robert, Vasseur, 2017), qui est une adaptation de ARI au cadre de la classification en blocs, pourrait être utile. Dans le cas présent, l'ARI ajusté entre la partition des blocs du SBM et la partition des blocs de régulés du LBM est de 0.29, celle entre la partition des blocs du SBM et de la partition des blocs de régulateurs du LBM est de 0.38. Enfin, le CARI entre les deux structures en blocs est de 0.14. Ces scores indiquent des adéquations moyennes entre les classifications. Autrement dit, les deux modèles induisent des relations assez différentes entre les gènes.

Bibliographie

- Biernacki C., Celeux G., Govaert G. (2000). Assessing a mixture model for clustering with the integrated completed likelihood. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, vol. 22, n° 7, p. 719–725.
- Frank O., Harary F. (1982). Cluster inference by using transitivity indices in empirical graphs. *Journal of the American Statistical Association*, vol. 77, n° 380, p. 835–840.
- Govaert G., Nadif M. (2007). Clustering of contingency table and mixture model. *European Journal of Operational Research*, vol. 183, p. 1055–1066.
- Govaert G., Nadif M. (2008). Block clustering with Bernoulli mixture models: Comparison of different approaches. *Computational Statistics and Data Analysis*, vol. 52, p. 3233–3245.
- Holland P. W., Laskey K. B., Leinhardt S. (1983). Stochastic block models: First steps. *Social networks*, vol. 5, n° 2, p. 109–137.
- Hubert L., Arabie P. (1985). Comparing partitions. *Journal of Classification*, vol. 2, n° 1, p. 193–218.
- Kerbin C., Brault V., Celeux G., Govaert G. (2015). Estimation and selection for the latent block model on categorical data. *Statistics and Computing*, vol. 25, n° 6, p. 1201–1216.

- Mariadassou M., Robin S., Vacher C. (2010). Uncovering latent structure in valued graphs: a variational approach. *The Annals of Applied Statistics*, vol. 4, n° 2, p. 715–742.
- Matias C., Robin S. (2014). Modeling heterogeneity in random graphs through latent space models: a selective review. *ESAIM: Proceedings and Surveys*, vol. 47, p. 55–74.
- Robert V., Vasseur Y. (2017). Comparing high dimensional partitions, with the coclustering adjusted rand index. *arXiv preprint arXiv:1705.06760*.
- Vasseur Y. (2017). *Inférence de réseaux de régulation orientés pour les facteurs de transcription d'arabidopsis thaliana et création de groupes de co-régulation*. Thèse de doctorat non publiée, Paris Saclay.

Inferring causal directed acyclic structures in gene regulatory networks using MC3 and the Laplace approximation

Gregory Nuel¹, Gilles Monneret, Pascal Fieth, Alexander Hartmann, Andrea Rau and Florence Jaffrézic

¹Laboratory of Probability and Stochastic Models (LMPA) – CNRS, Paris, France
nuel@math.cnrs.fr

Inferring the underlying causal relationships between genes from expression data is a task of critical importance in systems biology. In the particular case where a mixture of observational and intervention experiments (ex: single or multiple knock-out or knock-down experiments) are available, only a few methods are currently available. The first, called Intervention calculus when the Directed graph is Absent (IDA; Maathuis et al., 2009), provides causal bounds for direct and indirect effects once a skeleton graph has been estimated using the PC algorithm (pcalg R package). The second approach instead relies on the notion of a causal ordering of genes, whose posterior distribution is inferred from the data using a probabilistic generative model which allows for single and multiple interventions. This can be conveniently done within an MCMC simulation (Rau et al., 2013), in particular for the case where the posterior distribution is efficiently approximated (Hartmann and Nuel, 2017). In the present work, we extend this second approach by introducing two novelties: 1) we use a Laplace approximation to obtain a fast approximation of the integrated likelihood of the model; and 2) we use parallel tempering combined with the classic MC3 algorithm (Barker et al., 2010) to efficiently explore the directed acyclic graph (DAG) space. This new approach proves to be both faster and more reliable than the previous causal approach based on causal node orderings. It also has the advantage of providing a collection of DAG structures that can be aggregated to provide robust estimates for each dataset. We also introduce a simple mixture model over the DAG space to help represent this posterior distribution. Finally, we illustrate the method on both simulated and real datasets, where it shows promising results.

References:

Barker, Hill, and Mukherjee (2010) MC4: a tempering algorithm for large-sample network inference. *Pattern Recognition in Bioinformatics*, 431-442.

Hartmann and Nuel (2017) Using triplet ordering preferences for estimating causal effects in the analysis of gene expression data. *PLOS ONE* 12(1): e0170514

Maathuis, Kalisch, Bühlmann, and others (2009) Estimating high-dimensional intervention effects from observational data. *The Annals of Statistics*, 37(6A):3133-3164

Rau, Jaffrézic, and Nuel (2013) Joint estimation of causal effects from observational and intervention gene expression data. *BMC Systems Biology*, 7(1):111.

Apprentissage de modèles relationnels probabilistes à partir d'ontologies de procédé de transformation

Mélanie MUNCH¹

UMR MIA-Paris, AgroParisTech, INRA, Université Paris-Saclay
75005 Paris, France

melanie.munch@agroparistech.fr

RÉSUMÉ. *L'étude d'un domaine complexe nécessite souvent, pour sa compréhension, l'expression de relations probabilistes entre les différents attributs le composant. Cette expression peut néanmoins être rendue difficile en cas de trop grand nombre d'attributs ou de valeurs manquantes. Dans cet article, nous nous intéressons au domaine des procédé de transformation. Nous proposons une méthode d'apprentissage combinant une extension des réseaux bayésiens (BNs), les modèles relationnel probabilistes (PRMs), et de la connaissance experte du domaine apportée par une ontologie dédiée aux procédé de transformations. En comparant les performances de cette méthode à un apprentissage classique partant directement des données, nous démontrons que les modèles appris sont plus proches des données.*

ABSTRACT. *The study of complex domains often requires the expression of probabilistic links between its different attributes. This expression can however be made difficult in case of too many attributes or missing values. In this article we offer a learning method combining an extension of Bayesian networks (BNs), the probabilistic relational model (PRM), and expert knowledge expressed by an ontology dedicated to transformation processes. By comparing the performances of this method to a classical method learning directly from the data, we show that the learned models are closer to data.*

MOTS-CLÉS : *Probabilistic relational model, ontology, learning*

KEYWORDS: *Modèle relationnel probabiliste, ontologie, apprentissage*

DOI:10.3166/RIA.28.1-8 © 2014 Lavoisier

1. Introduction

Les ontologies de nos jours sont utilisées comme un vocabulaire commun et standardisé pour représenter un domaine (e.g. biologie, géographie). Elles organisent et structurent la connaissance à l'aide de concepts, de relations entre ces concepts et d'instances (Staab, Studer, 2009). Elles permettent ainsi l'expression et la représentation de domaines complexes. Nous proposons d'utiliser les ontologies avec une extension des réseaux bayésiens (BNs), les modèles relationnels probabilistes (PRMs), afin de faciliter leur apprentissage. En effet, la complexité de certains domaines peut rendre leur modélisation très difficile, en raison des nombreux facteurs et interactions possibles. De plus, les données à disposition sont trop parcellaires pour l'apprentissage. En biologie, les procédés de transformation représentent un ensemble d'étapes permettant de transformer un objet entrant en un autre objet sortant, tout en évaluant au cours du temps différents paramètres. Ils présentent ainsi ces caractéristiques : ils sont *complexes* (plusieurs étapes peuvent avoir lieu en même temps), leurs données sont *rare*s imposant parfois de les récupérer depuis diverses sources, certaines pouvant être *manquantes*. Enfin, même en considérant l'information complète, les résultats peuvent parfois être caractérisés par de l'*incertitude*.

En introduisant la notion de classes des bases de données relationnelles dans les BNs, les PRMs permettent une nouvelle expressivité dans les modèles appris, en offrant une description qualitative de la structure des domaines complexes ainsi qu'une représentation quantitative des informations fournies par la distribution probabiliste. Nous proposons de combiner la représentativité des ontologies à l'expressivité des PRMs afin de faciliter l'apprentissage de modèles dans ces domaines complexes. Ainsi, en introduisant des connaissances expertes, portées par l'ontologie, dans l'apprentissage, nous permettons une sélection des structures en amont, diminuant le nombre de possibilités d'apprentissage et augmentant ainsi son efficacité. Cette approche a déjà été étudiée dans le cadre d'apprentissage de BNs (Cutic, Gini, 2014) (Helsper, Gaag, 2002) et de réseaux bayésiens orientés objets (Ben Ishak *et al.*, 2011). Cet article sera organisé comme suit : dans la prochaine section, nous présentons les PRMs. Dans la partie 3 et avant de conclure, nous présentons notre méthode appliquée à une ontologie dédiée aux procédés de transformations et quelques résultats.

2. Modèles relationnels probabilistes

2.1. Définition

Dans le cas de systèmes complexes, il arrive régulièrement que de nombreuses variables aléatoires suivent des motifs répétés (par exemple plusieurs appareils branchés en série). Le cadre classique de l'apprentissage de BNs ne permet pas de prendre en compte ces motifs. En introduisant un paradigme objet, les PRMs permettent de créer des classes dépositaires de plusieurs attributs et de leurs relations qui peuvent être instanciées de nombreuses fois (Friedman *et al.*, 1999). Dans la figure 1(a), l'analyse du BN permet de dégager deux motifs répétés, qui deviennent deux classes *E* et *F*.

Une classe est un graphe acyclique orienté (DAG) reliant un ensemble d'attributs et définissant leurs probabilités conditionnelles. Les attributs peuvent appartenir à la classe considérée ou à d'autres classes définies référencées par des *liens de référence* (ρ dans la Fig. 1(b)). On définit une *chaîne de référence* comme une séquence de liens de références permettant de joindre les attributs d'objets non reliés directement.

La structure du PRM est définie par deux entités. Le *schéma relationnel* (Fig. 1(b)) représente les classes, les attributs les constituant et leurs chaînes de référence. Pour chacune, le *modèle relationnel* (Fig. 1(c)) étend le schéma relationnel à l'aide de modèles probabilistes définis sur l'ensemble des attributs intra-classes et conditionnés par les attributs liés via des chaînes de référence. Les classes ainsi définies sont instanciées pour chaque situation spécifique (Fig. 1(d)), formant un *système*. Un système est une distribution des probabilités sur un ensemble d'instances dans un schéma relationnel (Wuillemin, Torti, 2012). Les PRMs fournissent ainsi une description qualitative de haut niveau de la structure du domaine et une information quantitative donnée par la distribution de probabilités (Friedman *et al.*, 1999).

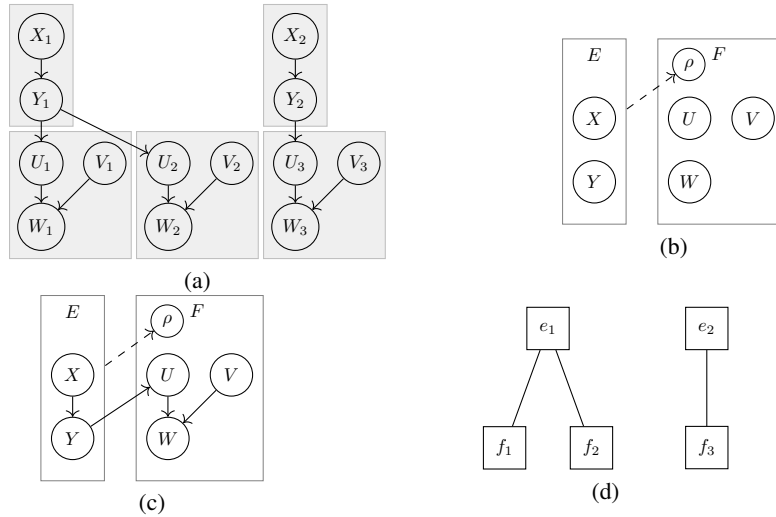


Figure 1. BNs et PRMs: l'analyse du BN (a) révèle deux motifs répétés (en gris), traduits en deux classes E et F dans le schéma relationnel (b) et le modèle relationnel (c) du PRM. Le système (d) équivalent au BN est construit en instanciant deux fois E et trois fois F .

2.2. Apprentissage

L'apprentissage d'un PRM est composé de la *sélection de la structure* et de l'*estimation des paramètres*. La structure se décompose en deux couches, une première de haut niveau qui définit la connaissance en schéma d'entité-relations (en utilisant des classes et des références); et une seconde de bas niveau qui représente les distributions de

probabilités de façon compacte en exploitant les dépendances probabilistes entre les attributs. Le *schéma relationnel* est appris avec la couche de haut niveau tandis que le *modèle relationnel* est appris avec la couche de bas niveau. En raison de ces différentes couches, le nombre de paramètres libres est élevé, et le modèle cible n'est pas unique : en sélectionner un requiert de réaliser des choix subjectifs.

Néanmoins, une fois la structure de schéma relationnel fixée, l'apprentissage d'un PRM peut être rapporté à l'apprentissage d'un BN (Getoor, Taskar, 2007). La différence est que les dépendances probabilistes entre les attributs d'une même classe sont contraintes pour toutes les instances : notre méthode propose ainsi d'utiliser les connaissances sémantiques de l'ontologie afin de construire le schéma relationnel et simplifier l'apprentissage en le rapprochant de celui d'un BN.

3. Construction d'un PRM à partir d'une ontologie donnée

3.1. Ontologie de procédé de transformation

Pour illustrer notre approche, nous utilisons l'ontologie *Process and Observation Ontology* (PO²), écrite en OWL 2¹ et dédiée à la représentation des procédés de transformation (Ibanescu *et al.*, 2016). Un procédé de transformation y est représenté comme une succession d'étapes, avec plusieurs participants et observations.

Une ontologie se définit par le *composant conceptuel* où les concepts, les relations entre ces concepts et les axiomes sont définis, et le *composant d'instance* qui contient les données. La composante conceptuelle de PO² possède trois parties (voir Fig. 2) :

- **Étapes** : contient les concepts *étape*, *itinéraire* et *procédé*;
- **Participant** : contient les concepts *méthode*, *mixture* et *appareil*;
- **Observation** : contient le concept *observation*.

Un *itinéraire* est un enchaînement temporel d'*étapes* définies par des *participants* (qui peuvent être des méthodes, des mixtures et des appareils) et des *observations*. Participants et observations sont eux-mêmes définis par leurs attributs (e.g. la température d'une mixture, sa composition), dont les valeurs sont obtenues différemment selon leurs natures: les attributs des participants sont fixés *a priori* au début de l'étape, tandis que les attributs des observations sont mesurés pendant ou après l'étape.

La composante d'instance de PO² représente un procédé de transformation comme une succession d'instances d'étapes et de leurs descripteurs associés. Notre méthode utilise cette organisation des connaissances pour construire le schéma relationnel du PRM. Les attributs du procédé deviennent ainsi les variables aléatoires du PRM, dont le domaine est défini par les valeurs présentes dans l'ontologie.

1. <https://www.w3.org/OWL/>

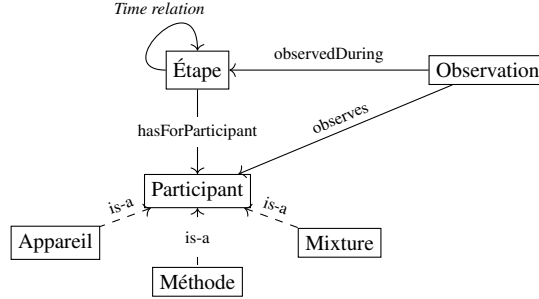


Figure 2. Schéma simplifié du composant conceptuel de PO^2 , divisé en trois parties principales : **Étape**, **Participant** et **Observation**, liés via des relations sémantiques.

3.2. Construction du schéma relationnel

La structure choisie pour notre schéma relationnel est motivée par (Manfredotti *et al.*, 2015) ainsi que par la structure des procédés de transformation dans PO^2 . Cette construction est motivée par la définition d'un *état* donnée dans la théorie des systèmes de contrôle, décrivant un système comme une succession d'*états* à travers le temps, auxquels peuvent être adjoints des *observations* (Thrun *et al.*, 2005). L'état contient tous les attributs pour décrire le système à chaque instant, tandis que les observations contiennent les attributs pour l'évaluer. L'acte d'observer est donc indépendant de l'état lui-même: *l'état peut influencer les résultats des observations, mais les observations ne peuvent influencer les valeurs de l'état*. De plus, la succession temporelle d'étapes impose qu'un *état* au temps t ne dépend que de l'état au temps $t - 1$. Ce modèle propose donc une généralisation des modèles de Markov cachés, mais où chaque classe peut être composée de plusieurs attributs.

Pour respecter ces contraintes, nous proposons de définir un *schéma relationnel général* depuis la composante conceptuelle de l'ontologie. Il possède :

- La classe **Participant** \mathcal{P} , qui regroupe tous les attributs *a priori*, c'est-à-dire les attributs définissant les concepts mixtures, appareils et méthodes;
- La classe **Observation** \mathcal{O} , qui regroupe tous les attributs mesurés.

À chaque instant t , on instancie \mathcal{P}_t et \mathcal{O}_t , qui forme l'**étape** \mathcal{S}_t .

Les dépendances temporelles introduites plus haut nous permettent de formaliser des *contraintes de dépendance temporelle* entre les différentes classes. La classe \mathcal{P}_t peut dépendre d'un ou plusieurs parents au temps $t - 1$ (\mathcal{P}_{t-1}), et peut influencer un ou plusieurs enfants au temps $t + 1$ (\mathcal{P}_{t+1}) : on note $\mathcal{P}_{t-1} \prec \mathcal{P}_t \prec \mathcal{P}_{t+1}$. À chaque \mathcal{P}_t défini on associe une classe \mathcal{O}_t dépendante que de \mathcal{P}_t . Avec les chaînes de référence et $t < T$, chaque classe \mathcal{P}_T a accès aux attributs de \mathcal{P}_t , et chaque \mathcal{O}_T n'a accès qu'aux attributs de \mathcal{P}_T . À noter, ce modèle défini de façon arbitraire peut se complexifier si besoin, par exemple en stratifiant l'une des classes afin de préciser les relations.

Ce schéma relationnel général présente deux propriétés intéressantes pour l'apprentissage : il permet de préserver la *séparation* entre les différentes étapes, ainsi qu'entre participants et observations. De plus, il préserve l'intégrité des étapes au cours du temps : un choix fait pendant une étape ne peut être la cause d'un choix dans les étapes précédentes. Cela introduit la *contrainte directionnelle d'apprentissage* utilisée pendant l'apprentissage : si un lien est trouvé entre deux attributs de deux classes différentes, l'orientation de ce lien est définie par rapport à la nature des classes.

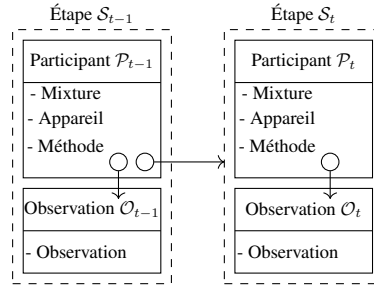


Figure 3. Schéma relationnel général pour deux étapes à partir de l'ontologie PO^2 .

3.3. Apprentissage du PRM

L'intérêt de notre approche est que le schéma relationnel est construit en utilisant à la fois le schéma relationnel général défini dans la section précédente, ainsi que les connaissances extraites de la composante des instances de l'ontologie. L'approche est réalisée en trois temps : **construction**, **apprentissage** et **instanciation**.

Construction. Pour chaque étape, on spécifie le schéma relationnel général, en assignant les attributs des participants à la classe \mathcal{P} , des observations à la classe \mathcal{O} , pour former la classe \mathcal{S} de l'étape considérée. On obtient un schéma relationnel par étape, chacun portant les attributs spécifiques de la composante des instances de l'ontologie.

Apprentissage. Soit la base de données D construite à partir de la composante des instances, et pour chaque étape sa sous-base de données constituée des attributs présents dans le schéma relationnel de l'étape (i.e. les attributs des classes \mathcal{P}_t et \mathcal{O}_t), ainsi que des attributs participants des étapes parentes (i.e. les attributs des classes \mathcal{P}_{t-1}) afin de respecter la contrainte temporelle définie plus haut : les étapes parentes peuvent avoir une influence sur leurs étapes enfants. La base est ainsi constituée uniquement d'attributs pouvant être liés. Les liens entre attributs sont appris à l'aide d'une méthode classique d'apprentissage des BNs M , combinée à un ordre d'apprentissage défini permettant d'exprimer les contraintes directionnelles. Pour tout attribut appartenant aux classes, si un lien est trouvé entre deux d'entre eux et qu'ils appartiennent à deux classes différentes, l'orientation de leur lien est imposé tel que $\mathcal{P}_{t-1} \prec \mathcal{P}_t \prec \mathcal{O}_t$. Les liens appris permettent de définir pour chaque classe le modèle relationnel.

Instanciation. Chaque classe est instanciée une fois dans le système, l'ordre temporel étant représenté via les chaînes de références entre chaque classe parent et enfant.

3.4. Évaluation de la méthode

Afin d'évaluer cette méthode, nous avons généré aléatoirement à partir de la structure de la composante conceptuelle des procédés de transformations. Pour chacun, des bases de données ont été générées. À partir de celles-ci, deux apprentissages ont été réalisés : un premier classique en n'utilisant qu'une méthode d'apprentissage de BN M_2 , et un second en utilisant M et notre méthode. Les deux BNs appris peuvent alors être comparés au modèle ayant permis la génération des bases de données, la performance étant d'autant meilleure que le modèle appris est proche de l'original. Nous montrons ainsi que dans tous les cas, notre apprentissage guidé par l'information sémantique offre de meilleurs résultats qu'un apprentissage simple (Fig. 4). Plus de détails sur la méthode et ses résultats sont donnés en (Munch *et al.*, 2017).

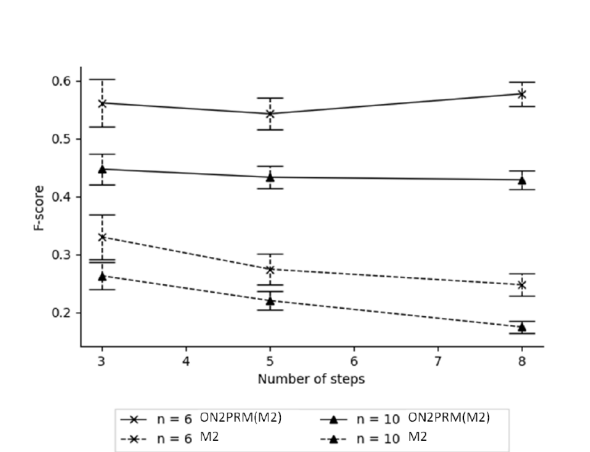


Figure 4. Comparaison de performance entre la méthode classique M_2 et notre méthode $ON2PRM(M_2)$ pour des procédés différents sur deux critères: le nombre d'étapes (ordonnée) et d'attributs (n). La performance augmente avec le F-score.

4. Perspectives

En construisant le schéma relationnel d'un PRM directement à partir de la structure d'une ontologie de procédé de transformation particulière, nous avons pu montrer que l'apprentissage de PRMs guidés par la connaissance ontologique offre des modèles plus performants et proches du domaine considéré. Cette approche présente en effet deux avantages: (1) la structure de haut niveau nécessaire à la construction du schéma relationnel peut être trouvée directement dans l'ontologie et (2) le schéma relationnel combiné à l'ontologie permet de diminuer la complexité de l'apprentissage.

2. Dans nos expériences nous définissons M_1 avec *Greedy Hill Climbing* et M_2 *Tabu List*

Néanmoins, cette approche se limite uniquement à l'étude de procédé représentés via PO^2 . Dans de prochains travaux, nous chercherons à généraliser pour différentes ontologies, notamment en proposant un outil pour adapter la construction d'un schéma relationnel en fonction de la structure de l'ontologie. En conservant le même modèle État et Observation, nous chercherons à voir comment éventuellement complexifier celui-ci afin de mieux représenter les domaines étudiés.

Remerciements

À mes encadrants Juliette Dibie, Pierre-Henri Willemin et Cristina Manfredotti.

Bibliographie

- Ben Ishak M., Leray P., Ben Amor N. (2011). Ontology-based generation of object oriented bayesian networks. In *BMAW 2011*, p. 9-17. Spain.
- Cutic D., Gini G. (2014, 18-19th July). Creating causal representations from ontologies and bayesian networks. In P. E. Arai Gini (Ed.), *Proc. workshop nrf-ias*, p. 1-12. Venice, Italy.
- Friedman N., Getoor L., Koller D., Pfeffer A. (1999). Learning probabilistic relational models. In *Proceedings of the sixteenth international joint conference on artificial intelligence, IJ-CAI 99, stockholm, sweden, july 31 - august 6, 1999. 2 volumes, 1450 pages*, p. 1300–1309.
- Getoor L., Taskar B. (2007). *Introduction to statistical relational learning (adaptive computation and machine learning)*. The MIT Press.
- Helsper E. M., Gaag L. C. van der. (2002). Building bayesian networks through ontologies. In *Proceedings of the 15th european conference on artificial intelligence, ecai'2002, lyon, france, july 2002*, p. 680–684.
- Ibanescu L., Dibie J., Dervaux S., Guichard E., Raad J. (2016). Po^2 - A process and observation ontology in food science. application to dairy gels. In *Metadata and semantics research - 10th international conference, MTSR 2016, göttingen, germany, november 22-25, 2016, proceedings*, p. 155–165.
- Manfredotti C. E., Baudrit C., Dibie-Barthélemy J., Willemin P. (2015). Mapping ontology with probabilistic relational models. In *KEOD 2015, volume 2, lisbon, portugal, november 12-14, 2015*, p. 171–178.
- Munch M., Willemin P.-H., Manfredotti C., Dibie J., Dervaux S. (2017). Learning probabilistic relational models using an ontology of transformation processes. In *On the move to meaningful internet systems - 16th international conference, OTM 2017, rhodes, greece, november 23-27, 2017, proceedings*.
- Staab S., Studer R. (Eds.). (2009). *Handbook on ontologies*. Springer.
- Thrun S., Burgard W., Fox D. (2005). *Probabilistic robotics (intelligent robotics and autonomous agents)*. The MIT Press.
- Willemin P., Torti L. (2012). Structured probabilistic inference. *Int. J. Approx. Reasoning*, vol. 53, n° 7, p. 946–968.

Optimisation de la compilation de règles métier probabilistes à l'aide de PRM

**Gaspard Ducamp^{1,2}, Philippe Bonnard²,
Christian De Sainte Marie², Christophe Gonzales¹,
Pierre-Henri Willemin¹**

1. LIP6 (UMR 7606), Sorbonne Université, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France
prenom.nom@lip6.fr

2. IBM France Lab, 9 rue de Verdun, 94250 Gentilly, France
philippe.bonnard@fr.ibm.com, csma@fr.ibm.com, gaspard.ducamp@ibm.com

RÉSUMÉ. Largement adoptées depuis plus de 20 ans par le monde de l'industrie, les règles métiers (business rules) offrent la possibilité à des utilisateurs non-informaticiens de définir des politiques de prise de décision de manière simple et intuitive. Pour faciliter leurs utilisations, des systèmes à base de règles, dits « systèmes de gestion des règles métier », ont été développés, séparant la logique métier de l'application informatique. S'ils sont adaptés pour traiter des données structurées et complètes, ils ne permettent pas aisément de travailler sur des données probabilistes.

Cette étude propose une nouvelle approche pour l'intégration de raisonnement probabiliste dans IBM Operational Decision Manager (ODM), le système de gestion des règles métier développé par IBM, notamment via l'introduction d'une notion de risque, complexifiant la compilation mais augmentant l'expressivité des règles métiers.

ABSTRACT. Widely adopted for more than 20 years in industrial fields, business rules offer the opportunity to non-IT users to define decision-making policies in a simple and intuitive way. To facilitate their use, systems known as Business Rule Management Systems have been developed, separating the business logic from the application one. While suitable for processing structured and complete data, BRMS face difficulties when those are incomplete.

This study proposes a new approach for the integration of probabilistic reasoning in IBM Operational Decision Manager (ODM), IBM's BRMS, especially through the introduction of a notion of risk, making the compilation phase more complex but increasing the expressiveness of business rules.

MOTS-CLÉS : Règle métier, Système de Gestion de Règle Métier, Aide à la décision, Réseau Bayésien, Inférence Bayésienne, Modèle objet, Modèle Graphique Relationnel

KEYWORDS: Business Rule, Business Rule Management System, Decision Making, Bayesian Networks, Bayesian Inference, Object Model, Probabilistic Relational Models

1. Présentation générale

Les systèmes de gestion des règles métier ont été introduits dans les années 90 de manière à faciliter l'édition, le débogage, le déploiement et l'exécution de politiques métier par une équipe experte sous la forme d'un ensemble de règles métiers de type "si condition(s) alors action(s)". Syntaxiquement proche du langage métier, ces dernières permettent de traduire aisément prises de décision et stratégies d'entreprise, les rendant accessibles à des utilisateurs experts non-informaticiens. Un modèle de données objet décrit les différents objets concernés par les règles, ces différents objets étant instanciés de manière dynamique dans une mémoire de travail lors de l'exécution du programme. C'est à partir de celle-ci que des règles seront ou non exécutées, cette décision se faisant grâce à des algorithmes de type Rete (Forgy, 1982; Berstel Da Silva, 2012; *RetePlus*, s. d.).

PROCOP (Probabilistic Rules Optimized ComPilation) est une thèse industrielle s'inscrivant dans la continuité de travaux déjà effectués au sein d'IBM France Lab se fondant sur une hybridation entre règles métiers et modèles graphiques probabilistes comme les réseaux bayésiens (El Ghali *et al.*, 2012) ou les modèles relationnels probabilistes (Agli, 2017).

Un réseau bayésien est une représentation compacte d'une distribution de probabilité jointe sur un ensemble de variables aléatoires. Celles-ci y apparaissent sous forme de nœuds dans un graphe sans circuit orienté (DAG) dont l'absence d'arcs représente des indépendances conditionnelles. Ce type de structure est utilisée comme outil d'aide à la décision dans de nombreux systèmes experts et applications (Pearl, 1988; Weber *et al.*, 2012).

Les modèles relationnels probabilistes (*Probabilistic Relational Model*, PRM) lient quant à eux les notions apportées par les réseaux bayésiens et le paradigme des langages orientés objets (Torti *et al.*, 2010). Aux notions de variables aléatoires et de probabilités conditionnelles viennent s'ajouter celles de classes, de relations, d'interface, d'héritage et d'instanciations. Une telle expressivité permet notamment de répondre à des problèmes de réutilisabilité et de scalabilité des modèles graphiques (Medina-Oliva *et al.*, 2010).

Plusieurs études internes dont (Ait-Kaci, Bonnard, 2011) et une thèse (Agli, 2017) ont montré qu'un couplage faible entre un système de règles métier développé par IBM, *IBM Operational Decision Manager* (ODM), et des modèles graphiques probabilistes (réseaux bayésiens dans un premier temps, PRM dans un second) permettait de raisonner sur des données probabilistes en introduisant la notion de règles de production probabilistes.

La figure 1 montre comment ces travaux s'insèrent dans la chaîne de compilation d'ODM. Différents arbres sémantiques y sont générés après avoir analysé et vérifié la syntaxe du fichier utilisateur décrivant les règles et les objets du modèle (*ARL*). En plus de produire celui décrivant les règles (*SemRuleset*) ces études proposaient d'utiliser le modèle objet afin de générer un modèle graphique (*SemPGM*), puis de

réécrire les expressions probabilisées des règles pour pouvoir faire des appels à un moteur d'inférence (JSmile, aGrUM, ...) à l'aide du fichier généré (*PGM file*) et d'en améliorer les algorithmes (Agli *et al.*, 2016). Une fois les règles réécrites les modèles sont compilés dans un langage proche de Java (IROS) avant d'être traduit en bytecode dans une archive (*JAR*), facilitant le déploiement et l'exécution sur les machines cibles.

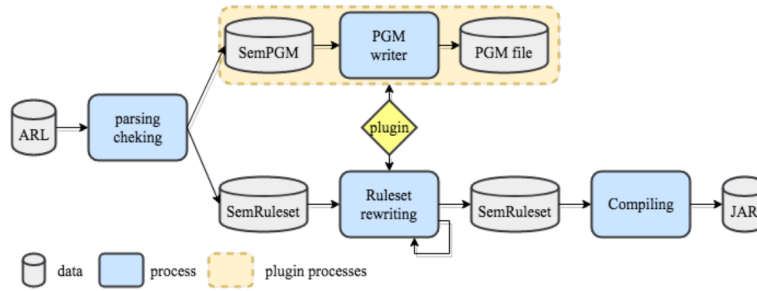


Figure 1. Représentation de la chaîne de compilation d'ODM

Un des exemples développés dans la thèse mentionnée ci-dessus était celui d'une application pour une assurance, un organisme étant chargé de gérer les demandes de remboursements faites par ses clients en fonction de leurs natures (type et coût du remboursement). Un ensemble de professionnels de santé validant pour cela les requêtes émises par les clients.

La figure 2 montre un exemple de schéma de relation de classes PRM pour ce problème. Une classe *HealthcareProfessional* décrit les professionnels de santé à partir de plusieurs caractéristiques, notamment leur âge, leur localisation, leur sexe et la liste de clients qu'ils gèrent (*Subscriber*), eux-mêmes caractérisés par un âge et une liste de remboursements (*Reimbursement*).

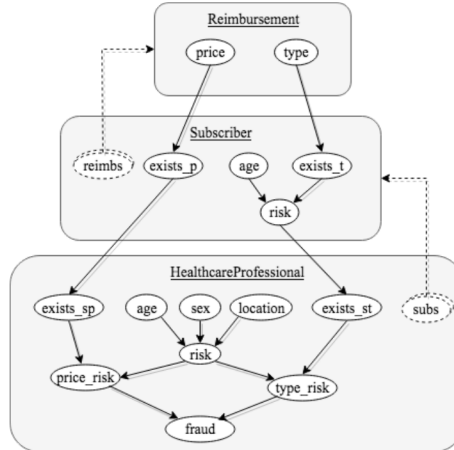


Figure 2. Exemple de schéma de relation de classes dans un PRM

Généré lors de la compilation, ce modèle permet de répondre à un premier ensemble de règles probabilistes. La règle ci-dessous, par exemple, indique qu'il faut marquer comme à risque les clients d'un professionnel de santé ayant une probabilité importante (>80%) de participer à de la fraude sur certains types de remboursements.

Exemple 1. Une règle métier probabiliste

```

1: rule detectInvoiceAnomaly{
2:   when{
3:     hp: HealthcareProfessional(probability(type_risk==high)>.8);
4:     sub: Subscriber () in hp.subs;
5:   }
6:   then{
7:     update sub {risk=true;}
8:   }
9: }
```

Les travaux précédents étant des études de faisabilités certaines limitations en surgissent :

- de telles règles sont difficiles à définir et à comprendre pour un utilisateur expert, le fait d'exprimer une probabilité sur des conditions particulières demandant un niveau de connaissance des modèles probabilistes utilisés important ;
- ODM offre la possibilité aux utilisateurs de définir différents types de conditions (à l'aide de filtres, d'agrégateurs et d'imbrications de conditions, par exemple). Ni ces constructions, plus complexes, ni leurs impacts sur les performances n'ont été étudiés ;
- l'intérêt de l'utilisation de l'algorithme IJTI (Agli *et al.*, 2016) vient de l'hypothèse qui a été faite que les modifications incrémentales de la mémoire de travail n'allaient pas avoir de gros impacts sur la structure de l'arbre de jonction utilisé pour les inférences, d'importantes économies de calculs pouvaient donc y être réalisées. IJTI est donc surtout adapté aux grandes structures connexes ;
- l'algorithme IJTI travaille avec des PRM, mais retranscrits sous la forme de réseaux bayésiens (dits « groundés »). L'intérêt des PRM en est fortement diminué puisque les redondances structurelles de ces réseaux groundés, qui sont encodées dans les PRM qui les ont générés, ne sont pas exploitées, ce qui réduit l'efficacité des inférences ;
- le modèle graphique construit lors de la compilation d'ODM prend en compte un modèle probabilisé des relations entre les objets de la mémoire de travail mais il ne s'adapte pas aux requêtes probabilistes définies dans les règles.

2. Vers une nouvelle définition des règles probabilistes

Pour répondre aux problématiques soulevées ci-dessus, nous souhaitons dans un premier temps redéfinir le traitement de l'incertitude dans l'expression des règles, en remplaçant les seuils de probabilités attachés à des variables particulières par une notion de risque acceptable sur l'évaluation de l'ensemble des conditions d'une règle.

Cela permettra à nos règles probabilistes d'être à la fois plus complexes et intuitives, mais demande une redéfinition de la phase de compilation d'ODM pour redistribuer le risque global sur chaque condition particulière. La partie action d'une règle ne sera donc exécutée que si l'ensemble des conditions est vérifiée avec une probabilité supérieure au risque défini.

Dans la règle ci-dessous la partie **then** ne sera exécutée que si la probabilité que les conditions c1 et c2 soient vraies est supérieure 80%. Les différents prédicats servant à conditionner les valeurs prises par les attributs (dire que *hp.type_risk* est supérieur à moyen ou que *hp.location* est égal à Paris ou Londres, par exemple).

Exemple 2. Un nouveau type de règle métier probabiliste

```

1: rule detectInvoiceAnomaly {
2:   probability > .8;
3:   when {
4:     hp: HealthcareProfessional (predicat1(hp.type_risk) && predicat2(hp.location)); (c1)
5:     r: Reimbursement (predicat3(r.type)) in hp.sub.reimb; (c2)
6:   } then {...}
7: }

```

Pour ce faire, il s'agit de générer le PRM non seulement à partir des modèles objets mais aussi de l'ensemble des règles (cf. Figure 3). Il faut pour cela étudier les différentes formes que peuvent prendre les conditions (agrégateurs, filtres, imbrications, ...) et leurs prédicats. Une étude de faisabilité doit, de ce fait, être effectuée pour définir les limites théoriques et pratiques d'une telle méthode.

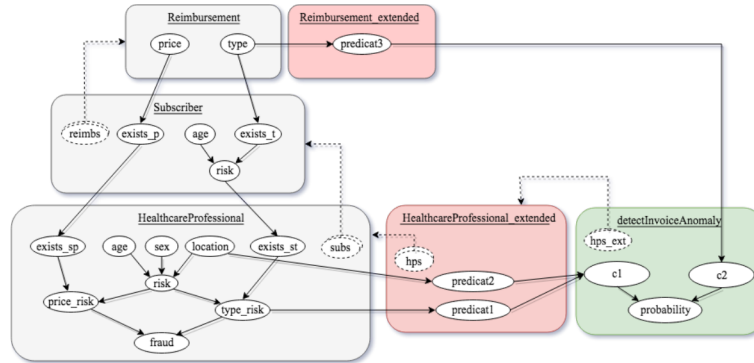


Figure 3. Exemple de PRM généré à la suite de l'analyse de la règle en Exemple 2

Les règles seront par la suite réécrites de manière à prendre en compte nos nouvelles requêtes probabilistes (sur l'attribut *probability* de la classe *detectInvoiceAnomaly*, par exemple). De telles manipulations pourraient cependant modifier l'efficacité du pattern matching opéré par ODM pour la sélection de règles à effectuer, il conviendra donc d'en étudier l'impact.

3. Application et extensions

Une étude sur l'utilisation de modèles temporels via une extension des capacités de modélisation des PRM dans O3PRM² pourrait-être effectuée dans un second temps, ce qui permettrait un raisonnement analogue mais dans le cadre du traitement des événements complexes (Complex Event Processing, CEP; cf. (Luckham, 2002)). L'utilisation de règles avec des expressions temporelles étant à la base des capacités de raisonnement de IBM Decision Server Insights, une application de CEP développée par IBM. Cette étude serait donc utile à la fois sur le plan théorique mais également sur le plan technique et industriel.

Un des avantages de l'expressivité des PRM est qu'il est possible de prendre en compte l'incertitude structurelle d'un modèle (Getoor *et al.*, 2000). Ce faisant, une étude sur une extension prédictive d'ODM pourrait-être réalisée. Le système serait alors capable de raisonner au-delà de la mémoire de travail, permettant de définir de nouveaux types de règles (d'anticipation, par exemple).

Pour finir, ce travail devra fournir une extension du langage de définition de règles métier d'ODM aux concepts probabilistes. Syntaxiquement et sémantiquement proche du langage naturel celui-ci devra permettre à des non-informaticiens de définir des règles métiers probabiliste de manière intuitive.

Bibliographie

- Agli H. (2017). *Raisonnement incertain pour les règles métiers*. Thèse de doctorat non publiée, Sorbonne Université.
- Agli H., Bonnard P., Gonzales C., Willemin P.-H. (2016, juin). Incremental Junction Tree Inference. In *IPMU16*. Eindhoven, Netherlands. Consulté sur <http://hal.upmc.fr/hal-01345418>
- Ait-Kaci H., Bonnard P. (2011). *Probabilistic production rules*. Rapport technique. IBM.
- Berstel Da Silva B. (2012). *Verification of business rules program*. Thèse de doctorat non publiée, Université de Fribourg-en-Brisgau.
- El Ghali A., Bonnard P., El Ghali K., Hromada D., Ait-Kaci H. (2012). *Règles de production et réseaux bayésiens pour l'extraction de mots clés*. Rapport technique.
- Forgy C. L. (1982). Rete: A fast algorithm for the many pattern/many object pattern match problem. *Artificial Intelligence*, vol. 19, n° 1, p. 17 - 37. Consulté sur <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0004370282900200>
- Getoor L., Koller D., Taskar B., Friedman N. (2000). Learning probabilistic relational models with structural uncertainty. In *Proc. of the aaai-2000 workshop on learning statistical models from relational data, technical report ws-00-06*, p. 13–20. Menlo Park, CA., AAAI Press.

2. O3PRM est un framework développé dans le cadre d'aGrUM permettant la manipulation de PRM : <http://o3prm.gitlab.io>

- Luckham D. (2002). *The power of events: An introduction to complex event processing in distributed enterprise systems*. Addison Wesley.
- Medina-Oliva G., Weber P., Levrat E., Iung B. (2010, juillet). Use of probabilistic relational model (PRM) for dependability analysis of complex systems. In *12th IFAC Symposium on Large Scale Systems: Theory and Applications, LSS 2010*, p. CDROM. Villeneuve d'Ascq, France. Consulté sur <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00549877>
- Pearl J. (1988). *Probabilistic reasoning in intelligent systems: Networks of plausible inference*. Morgan Kaufman.
- Reteplus*. (s. d.). Consulté sur https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/SSQP76_8.9.0/com.ibm.odm.dserver.rules.designer.run/optimizing_topics/tpc_opt_reteplusalgo.html
- Torti L., Wuillemin P.-H., Gonzales C. (2010, septembre). Reinforcing the Object-Oriented Aspect of Probabilistic Relational Models. In *PGM 2010 - The Fifth European Workshop on Probabilistic Graphical Models*, p. 273-280. Helsinki, Finland. Consulté sur <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00627823>
- Weber P., Medina-Oliva G., Simon C., Iung B. (2012). Overview on bayesian networks applications for dependability, risk analysis and maintenance areas. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, vol. 25, n° 4, p. 671 - 682. Consulté sur <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S095219761000117X> (Special Section: Dependable System Modelling and Analysis)

Un réseau bayésien pour le diagnostic des compétences non-techniques en situation critique

Yannick Bourrier¹, Francis Jambon², Catherine Garbay² & Vanda Luengo¹

1. LIP6, UPMC - Paris

[yannick.bourrier, vanda.luengo}@lip6.fr](mailto:{yannick.bourrier, vanda.luengo}@lip6.fr)

2. LIG, UGA - Grenoble

[yannick.bourrier, francis.jambon, catherine.garbay}@imag.fr](mailto:{yannick.bourrier, francis.jambon, catherine.garbay}@imag.fr)

RESUME. Nos travaux portent sur la création d'un environnement informatique pour l'apprentissage humain (EIAH) permettant à des techniciens expérimentés de s'entraîner à la gestion de situations critiques, via la bonne application de compétences non-techniques (CNT). L'objectif final de cet EIAH est de générer dynamiquement des situations critiques présentant une difficulté adaptée à chaque apprenant, et conçues pour mobiliser ces CNT. Nos travaux portent en particulier sur deux aspects cruciaux de la construction d'un tel EIAH : (i) la modélisation des CNT de l'apprenant par suite de ses actions à l'intérieur de l'EIAH, et (ii) le modèle décisionnel pour la génération d'une nouvelle situation d'apprentissage. Ce papier présente le réseau bayésien (RB) conçu afin d'évaluer dynamiquement les CNT de l'apprenant, à partir des performances de ce dernier lors de situations d'apprentissage présentant différents degrés de criticité.

Mots-clés : EIAH, environnements virtuels, compétences non-techniques, situations critiques, réseaux bayésiens.

1. Introduction

De nombreux domaines techniques comme la conduite, la médecine ou l'aviation possèdent des problématiques liées à la sécurité des praticiens ou des personnes sous leur responsabilité. Dans ces domaines, une erreur humaine ou une mauvaise conjonction d'événements peut donner naissance à une situation critique, aux conséquences potentiellement néfastes si elle n'est pas gérée de manière appropriée. Durant ces situations critiques, des études (Flin *et al.*, 2008) ont montré l'importance des CNT : en effet, il arrive fréquemment que des techniciens possédants pourtant

toutes les compétences techniques requises pour désamorcer ces situations critiques perdent une partie de leurs moyens face à ces situations. Cette dégradation des compétences techniques peut s'expliquer par une mauvaise gestion d'une ou plusieurs CNT, c'est-à-dire d'un panel de compétences métacognitives telles que la conscience de la situation, la prise de décision, ou la gestion du stress. Les CNT étant des compétences majoritairement empiriques, nous supposons qu'elles s'acquièrent en priorité par l'expérience répétée de situations où leur mobilisation est requise (Bourrier *et al.*, 2018). Elles sont donc avant tout mobilisées durant des situations critiques, or, le risque intrinsèque de ces situations les rend difficiles à reproduire dans un objectif d'apprentissage. Une situation critique est de plus, par nature, exceptionnelle, ce qui diminue d'autant les opportunités pour de jeunes praticiens de se former aux CNT. De plus, la plupart des formations traitant aux CNT en situations critiques se focalisent sur une situation critique particulière (Flin *et al.*, 2008), ce qui soulève la question de la transférabilité de compétences acquises dans un contexte bien spécifique. Pour ces raisons, la formation aux CNT semble être une problématique où les EIAH ont beaucoup à offrir, car ils permettent (au prix d'un degré d'immersion moindre par rapport à des simulations grande-échelle) de générer dynamiquement des situations critiques variées, permettant à un apprenant d'expérimenter de nombreuses situations critiques conçues pour la formation aux CNT.

Afin de pouvoir fournir des rétroactions adaptées (e.g. : sous la forme de nouvelles situations critiques), un tel EIAH doit posséder un modèle de l'apprenant capable de produire une évaluation dynamique de la qualité de mobilisation de ses compétences techniques. La constitution d'un tel modèle est un problème complexe, identifié comme mal-défini (Lynch *et al.*, 2006), c'est-à-dire résistant aux techniques de modélisation de l'apprenant classiques, dont les caractéristiques ont été décrites en détails dans (Bourrier *et al.*, 2018). L'architecture mise en place pour le diagnostic des CNT d'un apprenant et la modélisation de l'évolution des CNT de ce dernier au fil de ses confrontations avec des situations critiques contient trois modules (Bourrier *et al.*, 2018). Le premier module utilise des éléments de connaissance symbolique d'un domaine, pour sélectionner les fenêtres de temps pertinentes pour l'analyse des CNT au cours d'une session d'apprentissage pouvant durer plus de trente minutes. Le second module fait usage de techniques d'apprentissage pour analyser la performance technique d'un apprenant à partir de ses traces d'activité (perceptions et actions) lors de chacune de ces fenêtres temporelles, via la supervision d'un expert. Ce module permet d'une part, d'établir une estimation de la performance usuelle d'un apprenant en situation non-critique, et d'autre part, d'analyser la performance de ce dernier lors de situations critiques. Finalement, un réseau bayésien est utilisé afin d'expliquer les variations de performance technique d'un apprenant par la bonne ou mauvaise application de CNT déployées afin de faire face à l'augmentation de la criticité. Ce réseau bayésien permet la modélisation explicite des causalités reliant activité cognitive, caractéristiques d'une situation, marqueurs de CNT, et variations de performance.

Ce papier présente le réseau bayésien conçu en réponse au problème mal-défini de superposition des compétences, c'est-à-dire à l'absence de moyen clair de déterminer

l'influence séparée des CNT sur un geste technique. Il explore ensuite les liens entre la précision du modèle de l'apprenant conçu sous la forme d'un RB, et la pertinence des situations d'apprentissage proposées. Le papier est structuré comme suit. Il présente d'abord un rapide état de l'art sur l'utilisation de RB dans les EIAH et les Systèmes Tuteurs Intelligents (STI). La structure du RB (actuellement utilisée pour le diagnostic de 2 CNT, « conscience de situation » et « prise de décision ») est ensuite détaillée, puis des exemples de diagnostics sont présentés sur la base d'apprenants simulés. La discussion se focalise sur les liens entre la précision du RB modélisant le degré de compétence d'un apprenant, et la génération des situations d'apprentissage.

2. Etat de l'art

Les RB sont fréquemment utilisés dans les EIAH, en particulier pour les processus de modélisation de l'apprenant. Citons ANDES (Conati *et al.*, 1997) comme l'un des premiers systèmes tuteurs intelligents utilisant un réseau bayésien pour évaluer les connaissances d'étudiants confrontés à des problèmes de physique Newtonienne. Citons également TELEOS (Chieu *et al.*, 2010), un système tuteur intelligent pour la formation à la chirurgie orthopédique, qui utilise un RB pour modéliser le degré d'acquisition par un apprenant de plusieurs compétences techniques de type perceptivo-gestuel. Les RB sont toujours fréquemment utilisés actuellement dans la communauté des EIAH. En 2017, Tato *et al.* présentent par exemple un RB utilisé afin de diagnostiquer les connaissances, et prédire les réponses d'apprenants face à un système tuteur intelligent visant à tester leurs capacités de raisonnement logique.

3. Réseau bayésien pour le diagnostic des CNT en situation critique

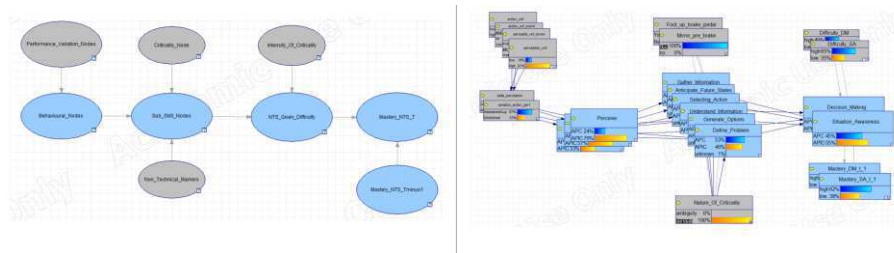


Figure 1. Meta-vue de la structure du réseau bayésien dynamique, et exemple pour un pas de temps. Les nœuds d'observation sont représentés en gris, les nœuds de compétence latents en bleu.

Afin de réaliser le diagnostic des CNT d'un apprenant, le RB utilise plusieurs observations, qui fournissent à ce dernier des informations sur les actions et perceptions de l'apprenant, ainsi que sur la nature de la situation critique auquel ce dernier fait face. Ces nœuds d'observation fournissent des informations à une

succession de nœuds latents, conçus pour franchir le gap sémantique séparant les perceptions et actions d'un apprenant à l'intérieur d'un environnement virtuel, du diagnostic des CNT de ce dernier.

3.1. Nœuds d'observation

Le RB utilise plusieurs types d'évidence pour diagnostiquer les CNT d'un apprenant. Tout d'abord, l'activité de l'apprenant à l'intérieur de l'environnement virtuel fournit des informations. Cette information peut prendre la forme d'une estimation de la performance perceptuelle et gestuelle de l'apprenant ; cette information est obtenue à l'aide d'un réseau de neurones supervisé par un expert, elle est disponible pour n'importe quelle situation critique générée par le système (meta-nœuds « Performance_variation_nodes »). De plus, dans le cas de situations critiques particulièrement bien maîtrisées par les experts, des marqueurs cognitifs de plus haut niveau sont également fournis en observations au RB, directement rattachables à des sous-processus cognitifs de CNT (meta-nœuds « Non_Technical_Markers »). Ces marqueurs cognitifs sont extraits des traces d'activité de l'apprenant à l'intérieur de l'environnement virtuel, à partir de règles symboliques. En plus des informations obtenues via l'activité de l'apprenant, les connaissances à disposition sur les situations rencontrées par ce dernier permettent de guider le processus d'inférence vers le diagnostic plus ou moins marqué d'une ou plusieurs CNT. Chaque situation est caractérisée par deux valeurs. Premièrement, une dimension de criticité (e.g. : ambiguïté, imprévisibilité, dilemme... nœud « Criticality_node ») ; cette dimension joue un rôle de filtrage permettant au réseau bayésien d'expliquer les performances observées par l'influence d'une CNT en particulier. Deuxièmement, une situation possède un niveau d'intensité de criticité ; cette métrique fournit une estimation des difficultés que rencontrent habituellement les apprenants lorsqu'ils font face à cette situation (nœud « Intensity_of_Criticality »), et modère les diagnostics obtenus sur la base des scores de performance et des marqueurs cognitifs.

3.1. Nœuds latents

L'information se propage depuis les évaluations des variations de performance jusqu'aux nœuds de CNT via une succession de nœuds latents. Ces nœuds ont plusieurs intérêts. D'une part, ils rendent le modèle graphique intelligible aux yeux d'experts du domaine, ce qui leur permet de contribuer au renseignement des probabilités conditionnelles dans le réseau. D'autre part, ils permettent d'inclure des observations à différents niveaux d'abstraction, fonction du degré de proximité que possèdent ces informations avec l'application correcte ou non d'une ou plusieurs CNT. Pour modéliser les liens entre performance perceptuelle et gestuelle et CNT, deux niveaux d'informations intermédiaires sont proposés. Le premier niveau est composé de trois nœuds « comportementaux » : percevoir, comprendre, agir. Ces

nœuds deux utilités : donner une signification sémantique aux variations de performances observées pour un même apprenant entre situation critique et non-critique, et, dans le cas du nœud « comprendre », regrouper les informations obtenues des nœuds de variations de performance gestuelle et perceptuelle. Le second niveau est composé de « sous-compétences » de CNT. Ces sous-compétences ont été identifiées par Flin *et al.* en 2008 comme plusieurs processus cognitifs constituant les fondements d'une CNT (par exemple : « conscience de la situation » est décomposée en 3 sous-processus : Obtenir l'information, Comprendre l'information, et anticiper les états futurs). Ces sous-compétences décomposent une CNT en plusieurs sous-processus dont le degré d'abstraction moindre les rend plus facilement associables à un ou plusieurs marqueurs cognitifs. Ils sont généralement utilisés par les experts d'un domaine pour identifier ces sous-compétences lors de situations critiques bien définies. La présence de ce niveau permet, (i), de fournir une explication de plus haut niveau sémantique pour les variations de performances, et (ii) d'intégrer au diagnostic les observations provenant des marqueurs non-techniques mis en jeu pour un apprenant au cours d'une situation critique. Ces nœuds sont reliés aux nœuds de diagnostic des CNT. Les diagnostics obtenus sont ensuite modulés par la difficulté estimée de la situation critique. Les diagnostics successifs, situation critique après situation critique, sont agrégés au travers de nœuds dynamiques « mastery ». L'évolution de ce nœud au fur et à mesure des situations d'apprentissage rencontrées constitue le cœur du modèle de l'apprenant.

4. Exemple de diagnostic

Afin d'effectuer des premiers tests sur la validité des estimations de CNT du réseau bayésien, nous avons simulé des apprenants réalisant trente situations critiques successives. Pour fournir des observations à notre modèle, nous avons simulé les résultats des analyses de performance issus du réseau de neurone à l'aide d'une fonction de type Item Response Theory standard :

$$p(\text{succès}) = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\theta^L - b(a))}}$$

Où β est une constante, θ^L correspond au degré de compétence de l'apprenant L, et $b(a)$ correspond à la difficulté de l'exercice a. Ce calcul a été effectué deux fois, pour fournir des valeurs d'analyse de performance perceptuelles et gestuelles. Les situations simulées n'incluaient pas de marqueurs non-techniques. La valeur θ^L était mise à jour situation après situation selon un paramètre de progression aléatoire mais avec un léger biais positif (les apprenants simulés finissaient par progresser de manière plus ou moins rapide). De plus deux paramètres de « slip » (erreur inattendue) et « guess » (réussite inattendue) ayant chacun une probabilité d'apparition de 10% étaient inclus afin d'observer la sensibilité du modèle face à des diagnostics inattendus. Par la suite, nous présenterons quatre exemples de diagnostics pour certains apprenants simulés, ayant des degrés de compétences différents et dont le

taux de progression diffère, pour une série temporelle de 30 situations à la difficulté croissante.

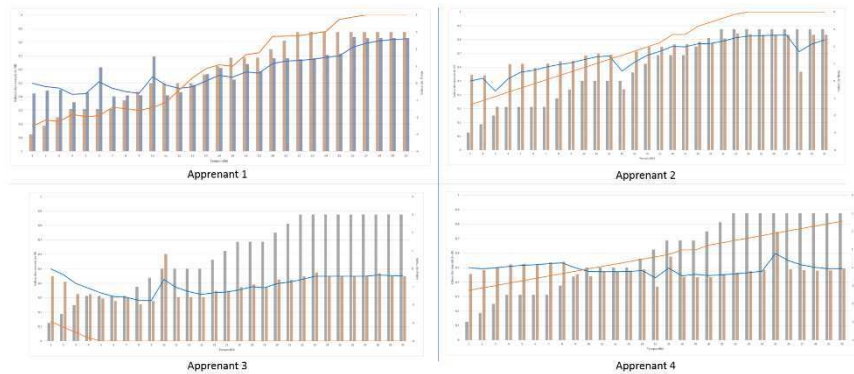


Fig. 2 : présentation de l'évolution des diagnostics de la CNT « prise de décision » pour quatre apprenants simulés. La courbe bleue présente l'évolution des diagnostics « mastery prise de décision ». La courbe orange présente l'évolution du paramètre caché θ^L au fil des situations. Les histogrammes gris indiquent la difficulté de chaque situation rencontrée (difficulté croissante par série de paliers). Les histogrammes orange présentent les résultats des diagnostics statiques « prise de décision »

Les deux premières courbes présentées en fig. 2 présentent deux apprenant ayant un profil de type « challenger », aux performances initialement très faibles (pour le premier) ou faibles (pour le second) mais qui progressent fortement, et de manière régulière pour atteindre le niveau maximal aux alentours de la situation 26. Dans le cas de l'apprenant 1, la courbe « mastery », décroît initialement en réponse aux premières performances faibles, puis progresse régulièrement, en suivant la courbe de θ^L . Pour l'apprenant 2, la courbe de « mastery » progresse dès les premières situations, car l'apprenant possède déjà un niveau suffisant pour réagir de manière adéquate aux premières situations critiques générées, et dont la difficulté est faible. Ce premier exemple indique une bonne précision du diagnostic (plus de tests sont requis pour déterminer à quelle point cette précision est bonne). Cependant, dans les exemples 1 et 2, la difficulté des situations proposées suit de manière régulière la progression du niveau de compétence de l'apprenant. De plus, les situations proposées sont sans doute un peu trop faciles pour les apprenants, qui produisent régulièrement de bonnes performances (valeurs des histogrammes orange correspondant aux diagnostics situation par situation > 0.7). La courbe 3 représente un apprenant au profil « looser », qui ne progresse pas face à des situations difficiles. Dans ce cas, la précision du diagnostic décroît, car le modèle va tendre à surestimer un apprenant d'un niveau faible affrontant des situations trop difficiles, et inversement à sous-estimer des apprenants forts affrontant des situations trop faciles. Cette propriété du diagnostic est inhérente à l'intégration d'une observation sur la difficulté des situations rencontrées par l'apprenant (des performances faibles sont survalorisées si

la difficulté est forte), et suggère que la précision du diagnostic dépend fortement de la pertinence des situations d'apprentissage proposées pour chaque individu. Observons finalement la courbe 4 : la progression de l'apprenant compense tout juste l'augmentation de la difficulté des situations ; les histogrammes orange indiquent des diagnostics aux alentours de 0.5, c'est-à-dire que le RB diagnostique une incertitude forte sur la bonne ou mauvaise application de cette CNT. Cette incertitude se traduit par des variations légères au niveau de la courbe de « mastery », qui ne reflètent pas la progression réelle de ce dernier.

5. Discussion et conclusion

Nous avons mis en place un RB pour le diagnostic des compétences non-techniques en situation critique. Ce RB cherche avant tout à fournir une réponse au problème mal-défini suivant : comment produire un diagnostic de l'influence séparée des CNT sur l'activité perceptivo-gestuelle d'un apprenant ? Dans cet objectif, le RB utilise plusieurs types d'observations mises à jour situation après situation. Sa sensibilité et sa précision ont été testées de manière préliminaire, à partir de données simulées, et les tables de probabilités conditionnelles ont été remplies sur la base d'entretiens avec des experts. Nos premières observations mettent en évidence une dépendance forte entre les situations critiques d'apprentissage générées par le modèle décisionnel, et la justesse du diagnostic produit par le RB. Cette dépendance suppose une différence entre la notion de pertinence d'une situation pour l'apprentissage humain, et pertinence d'une situation pour la modélisation de l'apprenant.

Comment définir la pertinence d'une situation pour un apprenant ? Nous considérons que les situations les plus bénéfiques pour l'apprentissage de CNT possèdent un niveau de criticité adapté à l'apprenant. Une situation trop facile ne sera pas considérée critique par l'apprenant et mobilisera moins les CNT. A l'inverse, une situation trop difficile peut certes mobiliser des CNT mais risque également de décourager l'apprenant. Nous faisons le postulat qu'une situation à la criticité adaptée pour l'apprentissage d'une CNT se traduit, au niveau du RB, par un diagnostic à l'incertitude forte. A cet effet, l'apprenant 4 de la figure 2 est celui qui rencontre les situations les plus adaptées. Cependant, on observe qu'une succession de diagnostics à l'incertitude forte fournit peu d'informations au modèle de l'apprenant, donc un système décisionnel cherchant uniquement à renforcer les connaissances d'un apprenant finira par nuire à la précision du modèle de l'apprenant, ce qui impactera également la validité des situations générées dans un objectif d'apprentissage humain. Pour compenser ce phénomène, le modèle décisionnel doit donc de manière alternative chercher à vérifier le degré de connaissances d'un apprenant. En plus de prendre en compte la pertinence d'une situation pour l'apprentissage humain, il faut donc également considérer la pertinence d'une situation en tant qu'observation fournie au modèle de l'apprenant. Intuitivement, la production de situations d'une difficulté moindre devrait générer des diagnostics plus saillants (comme c'est le cas pour les apprenants 1 et 2 de la figure 2), fournissant plus d'informations au RB sur l'apprenant. Ces diagnostics plus saillants devraient permettre de rétablir l'équilibre entre niveau de compétence réel et niveau de compétence diagnostiqué pour un

apprenant. Nos travaux futurs s'intéresseront à la mise en place d'un tel modèle décisionnel, favorisant l'apprentissage humain des CNT. Pour permettre un tel apprentissage, le système devra régulièrement mettre à jour ses connaissances sur l'apprenant, c'est-à-dire, prioriser ses propres besoins en matière de diagnostic pour continuer à proposer des exercices pertinents. De manière similaire à un professeur ayant besoin d'exercices adaptés pour connaître précisément le niveau de ses élèves, la précision du RB pour le diagnostic de l'apprenant dépendra de la qualité des observations fournies sur ce dernier, étant donné le contexte.

Remerciements :

Ces travaux ont été financé par le projet MacCoy-Critical (ANR-14-CE24-0021).

Bibliographie

Bourrier, Y., Jambon, F., Garbay, C., & Luengo, V. (accepted). *A Hybrid Architecture for Non-Technical Skills Diagnosis*. In Intelligent Tutoring Systems, ITS 2018.

Flin, R. H., O'Connor, P., & Crichton, M. (2008). *Safety at the sharp end: a guide to non-technical skills*. Ashgate Publishing, Ltd.

Lynch, C., Ashley, K., Aleven, V., Pinkwart, N. (2006). *Defining Ill-Defined Domains; A literature survey*. Proc. Intelligent Tutoring Systems for Ill-Defined Domains Workshop, ITS 2006.

Conati, C., Gertner, A.S., VanLehn, K., Druzdzel, M.J. (1997). *On-line student modeling for coached problem solving using bayesian networks*. User Modeling. ICMS, vol. 383, p. 231–242.

Chieu, V. M., Luengo, V., Vadcard, L., & Tonetti, J. (2010). *Student modeling in orthopedic surgery training: Exploiting symbiosis between temporal bayesian networks and fine-grained didactic analysis*. International Journal of Artificial Intelligence in Education, vol.20 n°3, p. 269-301.

Tato, A., Nkambou, R., Brisson, J., & Robert, S. (2017). *Predicting Learner's Deductive Reasoning Skills Using a Bayesian Network*. In International Conference on Artificial Intelligence in Education, Wu-Han, China

Prévention de la chute chez les personnes âgées: d'une modélisation ontologique du domaine au raisonnement avec réseau bayésien

Fatma Essghaier, Véronique Delcroix, Kathia de Oliveira

Laboratoire d'Automatique de Mécanique et d'Informatique Industrielles et Humaines - Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis
{Fatma.Essghaier,Veronique.Delcroix,Kathia.Oliveira}@univ-valenciennes.fr

RÉSUMÉ. *Près d'un tiers des personnes âgées de plus de 65 ans chutent chaque année. Les conséquences éventuelles d'une chute peuvent être majeures et ce phénomène constitue la première cause de décès accidentel pour cette population. Même en absence de conséquence traumatique, l'impact psychologique et physiologique d'une chute est important, d'où la nécessité de mise en place des stratégies de repérage du risque de chute et de prévention. Dans le but de répondre à cette problématique, ce travail a pour objectif de fournir un système à base de connaissances capable d'évaluer le risque de chute d'une personne et de lui suggérer des recommandations personnalisées. Pour ce faire nous avons combiné les atouts des ontologies (Gruber, 1995) et des réseaux bayésiens (Pearl, 1988) qui sont deux formalismes de représentation des connaissances complémentaires.*

En pratique, la construction de notre ontologie a été réalisée avec l'aide d'une équipe médicale de spécialistes sur la chute qui nous ont guidés pour identifier les différents concepts liés à ce domaine (caractéristiques de la personne, facteurs de risque, facteurs de gravité et recommandations) et de définir les liens entre eux (associations et règles d'inférences). Nous avons aussi utilisé des articles de recherche sur la prévention des chutes, divers documents de l'hôpital, et des documents officiels au niveau national, tels que ceux émis par la Haute Autorité de Santé (HAS) et l'Institut national de prévention et d'éducation pour la santé (Inpes). Enfin, nous avons aussi exploité les données enregistrées par le service de consultation de la chute du CHRU de Lille pour compléter ce travail d'extraction des connaissances. Ainsi, nous avons pu définir une normalisation des connaissances sur la chute et établir un vocabulaire commun entre les différents acteurs (médecins, informaticiens, applications et autres intervenants) favorisant la réutilisabilité mais aussi de fournir une sorte d'architecture qui résume les liens et les relations entre les différents concepts (plus de 100 concepts).

Récemment, de nouveaux travaux de recherche ont été mené pour enrichir l'ontologie et permettre le raisonnement sous incertitudes (Ding, Peng, 2004 ; Yi, Calmet, 2005 ; Costa, Laskey, 2006 ; Carvalho et al., 2017) mais ces travaux restent prématurés et n'ont pas encore atteint un niveau de maturation suffisant. Alors, nous avons opté pour l'utilisation des réseaux bayésiens qui sont des outils efficaces et qui ont fait leur preuve pour le raisonnement sous

incertitude probabiliste. Dans notre travail, une source d'incertitude est liée à la variabilité naturelle des facteurs dans la population des personnes âgées et aussi provient du fait que le raisonnement s'appuie sur une description incomplète de la personne considérée. Ce modèle graphique probabiliste permet de traduire les liens entre les variables en terme de relations de dépendance et d'indépendance et de rajouter une composante quantitative; définit par les probabilités conditionnelles; qui décrit les connaissances à priori des experts et des nouvelles informations déduites de l'expérience contenue dans les données.

Le réseau bayésien qui a été construit à partir de l'ontologie de la chute constitue le coeur de notre système. Le principe de cette construction est inspiré de (Jeon, Ko, 2007 ; Ko, Sim, 2008 ; Zheng et al., 2008 ; Fenz et al., 2009 ; Rodrigues et al., 2013) qui proposent un mapping entre les deux modèles pour la composante graphique. La quantification a été élaborée par l'application des algorithmes d'apprentissage des paramètres sur les données. L'inférence appliquée sur le réseau permet de prédire le niveau de chute d'une personne seulement avec quelques informations observées et de proposer un certain nombre de recommandations pertinentes adaptées à la personne et à son contexte.

ABSTRACT.

MOTS-CLÉS: Prévention de chute, Ontologie de domaine, Théorie des probabilités, Réseau Bayésien, Raisonnement sous incertitude

KEYWORDS:

DOI:10.3166/RIA..1-3 © 2018 Lavoisier

Bibliographie

- Carvalho R., Laskey K., Costa P. (2017). Pr-owl - a language for defining probabilistic ontologies. *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 91, p. 56-79.
- Costa P., Laskey K. (2006). Pr-owl: A framework for probabilistic ontologies. *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, vol. 150, p. 237-249.
- Ding Z., Peng Y. (2004). A probabilistic extension to ontology language owl. In, vol. 37, p. 1775-1784.
- Fenz S., Tjoa A., Hudec M. (2009). Ontology-based generation of bayesian networks. In, p. 712-717.
- Gruber T. R. (1995). Toward principles for the design of ontologies used for knowledge sharing. *Int. J. Hum.-Comput. Stud.*, vol. 43, n° 5-6, p. 907-928.
- Jeon B.-J., Ko I.-Y. (2007). Ontology-based semi-automatic construction of bayesian network models for diagnosing diseases in e-health applications. In, p. 595-599.
- Ko K.-E., Sim K.-B. (2008). Development of context aware system based on bayesian network driven context reasoning method and ontology context modeling. In, p. 2309-2313.
- Pearl J. (1988). *Probabilistic reasoning in intelligent systems: Networks of plausible inference*. San Francisco, CA, USA, Morgan Kaufmann Publishers Inc.
- Rodrigues F., Bez M., Flores C. (2013). Generating bayesian networks from medical ontologies.

- Yi Y., Calmet J. (2005). Ontobayes: An ontology-driven uncertainty model. In, vol. 1, p. 457-463.
- Zheng H.-T., Kang B.-Y., Kim H.-G. (2008). An ontology-based bayesian network approach for representing uncertainty in clinical practice guidelines. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, vol. 5327 LNAI, p. 161-173.

Bibliothèque de calcul « ProBT » dédiée aux Réseaux Bayésiens et à la modélisation probabiliste

Kamel Mekhnacha
Directeur Scientifique
ProBayes
Kamel.Mekhnacha@probayes.com

Nous présentons ProBT, une bibliothèque de calcul dédiée aux Réseaux Bayésiens et leurs extensions (HMM, filtres de Kalman...).

Cette librairie développée et distribuée par Probayes est issue initialement de travaux de recherches d'un laboratoire de recherche INRIA/CNRS dans les années 2000. Depuis, elle continue à gagner en terme de fonctionnalités, de robustesse et de performance. Des *release* régulières sont assurées par Probayes pour répondre aux retours et demandes de nos utilisateurs.

ProBT est un produit commercial mais disponible gratuitement pour les institutions académiques ainsi que pour toutes les utilisations non commerciales. Il est utilisé dans plusieurs laboratoires de recherche en France et à l'international.

Dans cette présentation, nous parlerons des principales fonctionnalités de ProBT :

- Support des distributions discrètes et continues : Multinomial, Binomial, Poisson, Noisy-OR, Softmax, Beta, Dirichlet, Exponential, Gamma, Linear Gaussian, Log-Normal, Normal (univariate/multivariate), Weibull, Von Mises, ...
- Algorithmes pour l'apprentissage des paramètres : Maximum Likelihood, Bayesian (lois conjuguées), Expectation-Maximization (EM)
- Algorithmes pour l'apprentissage de structure : basés sur des scores (MI, BIC, MDL, AIC, ...)
- Algorithmes pour l'inférence exacte : Arbre de jonction, Successive Restrictions (une variance sophistiquée de l'élimination de variables), Viterbi
- Algorithmes pour l'inférence approchée : MCMC (gibbs, Metropolis), Algorithmes génétiques (maximisation de distributions a posteriori), ...
- Support des fonctions *callback* pour le calcul des paramètres des distributions : C++, Python, Java, C#, sources C avec un compilateur embarqué (TTC)
- Support pour la sérialisation des modèles ainsi que pour leurs import/export : Genie, Netica, Hugin, ...
- Des interfaces de programmation dans plusieurs langages : C++, Python (Numpy, Pandas, matplotlib), Java, C#
- Portabilités : Windows, Linux, MacOS, iOS, Android

Nous parlerons également de quelques applications concrètes de ProBT et nous présenterons un notebook Jupyter Python pour illustrer la simplicité de son utilisation.

Étude de la complexité de l'inférence dans des réseaux possibilistes

Salem Benferhat, Amélie Levray, Karim Tabia

*CRIL - CNRS UMR 8188
Université d'Artois - Faculté Jean Perrin
Lens - FRANCE
{benferhat,levray,tabia}@cril.fr*

MOTS-CLÉS : Réseaux possibilistes, inférence, complexité

DOI:10.3166/RIA.28.1-2 © 2014 Lavoisier

1. Résumé

Les réseaux probabilistes et possibilistes (Darwiche, 2009) sont des outils puissants pour la représentation et le raisonnement avec des informations incertaines. Ils permettent une représentation compacte des distributions incertaines en utilisant des graphes dirigés acycliques et des relations d'indépendances. Les réseaux possibilistes sont souvent recommandés pour leurs avantages en termes de flexibilité et de gestion de l'information incomplète et qualitative.

La théorie des possibilités (Dubois, Prade, 1998) est une théorie alternative naturelle de l'incertain particulièrement appropriée lorsque uniquement l'ordre plausible entre événements est utile. Il existe à vrai dire deux définitions de la théorie des possibilités. La première est appelée théorie des possibilités *qualitative*. Dans ce contexte, l'intervalle $[0, 1]$, utilisé pour évaluer les degrés d'incertitude des événements, est vu comme une échelle ordinale. Ainsi, seul les opérateurs du maximum et du minimum sont utilisés pour définir les mesures incertaines. Ce contexte contraste avec la seconde définition de la théorie des possibilités, appelée théorie des possibilités quantitative, où l'intervalle $[0, 1]$ est utilisé dans le sens général. Dans ce travail, nous ne traitons que la définition qualitative de la théorie des possibilités.

Alors que les résultats de complexité de l'inférence dans les réseaux probabilistes sont bien établis (Mauá *et al.*, 2015), il n'y a pas de telle étude pour les réseaux possibilistes. Ce travail remplit ce vide en fournissant l'étude de la complexité calculatoire de deux importantes formes de requêtes dans les réseaux possibilistes qualitatifs: le calcul de *l'explication la plus plausible* (*MPE*) et le calcul du *maximum a posteriori* (*MAP*).

Dans le contexte probabiliste, ces tâches sont connues comme étant très difficile. En effet, les problèmes de décision associés à *MPE* et *MAP* sont *NP*-complet et *NP^{PP}*-complet respectivement. L'objectif de ce travail est de montrer que la complexité de ces deux tâches dans les réseaux possibilistes est moindre que dans les réseaux Bayésiens. En effet, dans le cadre des réseaux possibilistes, les requêtes *MAP* et *MPE* ne nécessitent qu'un nombre constant d'appels à un oracle *NP*-complet.

Bibliographie

- Darwiche A. (2009). *Modeling and reasoning with bayesian networks*. Cambridge University Press.
- De Campos C. P., Cozman F. G. (2005). The inferential complexity of bayesian and credal networks. In *Ijcai*, p. 1313–1318. Professional Book Center.
- Dubois D., Prade H. (1998). Possibility theory: Qualitative and quantitative aspects. In P. Smets (Ed.), p. 169–226. Springer Netherlands.
- Mauá D. D., Campos C. P. de, Cozman F. G. (2015). The complexity of MAP inference in bayesian networks specified through logical languages. In *Ijcai*, p. 889–895. AAAI Press.

Recherche complète à voisinages variables guidée par la décomposition arborescente pour la minimisation d'énergie dans les modèles graphiques

Résumé de l'article paru à la conférence Uncertainty in Artificial Intelligence (UAI-17), pages 550-559, Sydney, Australia, 2017

A. Ouali¹, D. Allouche², S. de Givry², S. Loudni¹, Y. Lebbah³,
F. Eckhardt², L. Loukil³

1. University of Caen Normandy,
CNRS, UMR 6072 GREYC, 14032 Caen,
France
samir.loudni@unicaen.fr, oualiaek@gmail.com

2. INRA
MIA Toulouse, UR-875, 31320 Castanet-Tolosan
France
david.allouche@inra.fr, simon.de-givry@inra.fr

3. University of Oran 1
Ahmed Ben Bella, Lab. LITIO, 31000 Oran,
Algeria
ylebbah@gmail.com, loukil_lakhdar@yahoo.fr

RÉSUMÉ. Les modèles graphiques probabilistes unifient la théorie des probabilités et les modèles graphiques via des variables aléatoires reliées entre elles par une distribution de loi jointe décomposable. L'objectif étudié ici est connu sous le nom de Maximum A Posteriori dans les champs aléatoires de Markov et de Most Probable Explanation dans les réseaux bayésiens, consiste à trouver une affectation globale de toutes les variables ayant une probabilité maximale ou de manière équivalente une énergie minimale. Les méthodes de résolution MAP/MPE sont qualifiées habituellement de complète ou incomplète, selon leur capacité à prouver l'optimalité

ou non. Alors que la plupart des méthodes complètes reposent sur la recherche arborescente, les méthodes incomplètes reposent, quant à elles, sur la recherche locale. Dans cet article, nous proposons une approche itérative potentiellement complète au-dessus d'une recherche à voisinages variables qui utilise la recherche arborescente partielle dans son exploration locale des voisinages. La méthode hybride qui en résulte a été évaluée sur un large éventail de benchmarks issus de l'analyse d'images, la reconnaissance de formes, l'allocation de ressources, la bio-informatique, la bio-physique... Les résultats montrent que comparée aux méthodes de recherche arborescente existantes, notre méthode offre un meilleur compromis entre le comportement anytime et la preuve d'optimalité. Enfin, l'expérimentation de notre version parallèle sur des instances difficiles issues de la conception de protéines a mis en évidence l'efficacité de la version parallèle pour trouver des bonnes solutions. Le solveur est librement téléchargeable sur <https://github.com/toulbar2/toulbar2>.

ABSTRACT. Graphical models factorize a global probability distribution/energy function as the product/sum of local functions. A major inference task, known as MAP in Markov Random Fields and MPE in Bayesian Networks, is to find a global assignment of all the variables with maximum probability/minimum energy. A usual distinction on MAP/MPE solving methods is complete/incomplete, i.e. the ability to prove optimality or not. Most complete methods rely on tree search, while incomplete methods rely on local search. Among them, we study Variable Neighborhood Search (VNS) for graphical models. In this paper, we propose an iterative approach above VNS which uses (partial) tree search inside its local neighborhood exploration. The resulting hybrid method offers a better compromise between completeness and anytime behavior than existing tree search methods while still being competitive for proving optimality. We further propose a parallel version of our method improving its anytime behavior on difficult instances coming from a large graphical model benchmark. Last we experiment on the challenging minimum energy problem found in Computational Protein Design, showing the practical benefit of our parallel version. Solver is available at <https://github.com/toulbar2/toulbar2>.

MOTS-CLÉS : optimisation combinatoire, modèle graphique, recherche de l'explication la plus probable, recherche à voisinages variables, recherche arborescente partielle, réseau de fonctions de coûts.

KEYWORDS: combinatorial optimization, graphical model, most probable explanation, variable neighborhood search, limited discrepancy search, cost function network.

1. Introduction

Les Modèles Graphiques Probabilistes (MGPs) (Koller, Friedman, 2009) unifient la théorie des probabilités et les modèles graphiques via des variables aléatoires reliées entre elles par une distribution de loi jointe décomposable. Formellement, un MGP est un triplet $(\mathcal{X}, \mathcal{D}, \mathcal{F})$ avec $\mathcal{X} = \{X_1, \dots, X_n\}$ un ensemble de n variables aléatoires discrètes, $\mathcal{D} = \{D_1, \dots, D_n\}$ un ensemble de domaines finis de valeurs, et \mathcal{F} , un ensemble de fonctions sur les variables à valeurs réelles positives (probabilités conditionnelles dans les réseaux bayésiens ou *potentiels* dans les champs de Markov). Une affectation de l'ensemble \mathcal{X} est le tuple $x = (x_1, \dots, x_n)$, avec $x_i \in D_i$. L'ensemble de toutes les affectations possibles de \mathcal{X} est noté $\Delta = \prod_{i=1}^n D_i$. On note $A = \{D'_1, \dots, D'_n\}$, avec $D'_i \subseteq D_i$, une affectation partielle représentant un sous-ensemble de Δ . Soit S un sous-ensemble de $V = \{1, \dots, n\}$, X_S , x_S et Δ_S dénotent respectivement un sous-ensemble de variables aléatoires $\{X_i, i \in S\}$, l'affectation $(x_i, i \in S)$ obtenue à partir de x , et l'ensemble des affectations possibles des variables de X_S . Étant donné S un ensemble de parties de V , l'ensemble $\mathcal{F} = \{f_S\}_{S \in \mathcal{S}}$ définit une factorisation de la distribution de probabilité jointe de \mathbb{P} ssi:

$$\mathbb{P}(x) = \frac{1}{Z} \prod_{f_S \in \mathcal{F}} f_S(x_S) \quad (1)$$

où $Z = \sum_{x \in \Delta} \prod_{f_S \in \mathcal{F}} f_S(x_S)$ est la constante de normalisation. Le problème *Most Probable Explanation* (MPE) consiste à trouver une affectation $x \in \Delta$ de toutes les variables de \mathcal{X} de telle sorte que la probabilité jointe $\mathbb{P}(x)$ soit maximale. Il s'agit d'un problème NP-difficile (Shimony, 1994). Le problème MPE se traduit directement en un *réseau de fonctions de coût* (Mesequer *et al.*, 2006) où l'on cherche à minimiser la somme de fonctions de coûts, appelées aussi *fonctions d'énergie* (Hurley *et al.*, 2016).

Les méthodes de résolution des MGPs sont qualifiées respectivement de méthodes complètes ou incomplètes selon leur capacité à prouver ou non l'optimalité de la solution trouvée. Elles font généralement appel soit à la recherche arborescente soit à la recherche locale. La combinaison de ces deux aspects a été étudiée dans peu de travaux. Parmi eux, les approches qui consistent à explorer les voisinages de la recherche locale par une recherche arborescente de manière systématique ou non systématique.

VNS/LDS+CP (Loudni, Boizumault, 2003) combine une métaheuristique Variable Neighbourhood Search (VNS) (Mladenović, Hansen, 1997) avec une recherche arborescente partielle de type LDS (Harvey, Ginsberg, 1995). Récemment, Fontaine *et al* (Fontaine *et al.*, 2013) ont proposé le premier cadre générique, appelé Decomposition Guided VNS (DGVNS), qui exploite une décomposition arborescente (Robertson, Seymour, 1986) au sein de VNS. Dans ce papier, nous proposons une variante itérative de DGVNS appelée Unified Decomposition Guided VNS (noté UDGVNS) capable de prouver l'optimalité des solutions trouvées si le temps de résolution n'est pas borné.

Algorithme 1 : Unified DGVNS algorithm.

```

Function UDGVNS ( $\ell_{min}, \ell_{max}, +\ell, k_{min}, k_{max}, +k, ub : In/Out, x : In/Out$ ) : boolean
  let  $(C_T, T)$  be a tree decomposition of  $(\mathcal{X}, \mathcal{D}, \mathcal{F})$ ;
   $opt \leftarrow \text{true}$ ;
  1  LDSr ( $\infty, \mathcal{D}, ub, x, opt$ ) ;                                // initial solution
  2  if ( $ub = lb(\mathcal{D})$ ) then  $opt \leftarrow \text{true}$ ;
       $c \leftarrow 1$ ;                                           // current cluster index
       $r \leftarrow 0$ ;                                           // number of iterations
       $\ell \leftarrow \ell_{min}$ ;                                   // initial discrepancy limit
      while ( $\neg opt \wedge \ell \leq \ell_{max}$ ) do
           $i \leftarrow 0$ ;                                       // number of failed neighborhoods
          3   $k \leftarrow k_{min}$ ;                               // initial neighborhood size
              while ( $\neg opt \wedge k \leq k_{max}$ ) do
                   $A \leftarrow \text{getNeighborhood}(x, C_c, k)$ ;
                   $ub' \leftarrow ub, opt \leftarrow \text{true}$ ;
                  4  LDSr ( $\ell, A, ub', x', opt$ ) ;                // neighborhood search
                  5  if ( $ub' = lb(\mathcal{D})$ ) then  $opt \leftarrow \text{true}$ ;
                  6  else if ( $A \neq \mathcal{D}$ ) then  $opt \leftarrow \text{false}$ ;
                  7  if ( $ub' < ub$ ) then
                       $x \leftarrow x', ub \leftarrow ub'$ ;        // new best solution
                      8   $i \leftarrow 0, k \leftarrow k_{min}$ ;
                      9   $r \leftarrow 0, \ell \leftarrow \ell_{min}$ ;
                  else
                       $i \leftarrow i + 1$ ;
                      if ( $k < k_{max}$ ) then
                           $k \leftarrow \min(k_{max}, k_{min} + k \cdot i)$ ;
                      else  $k \leftarrow \infty$ ;
                  10   $c \leftarrow 1 + c \bmod |C_T|$ ;           // get next cluster
                       $r \leftarrow r + 1$ ;
                      if ( $\ell < \ell_{max}$ ) then
                           $\ell \leftarrow \min(\ell_{max}, \ell_{min} + \ell \cdot r)$ ;
                      else  $\ell \leftarrow \infty$ ;
  11  return  $opt$ ;

```

2. DGVNS itératif

L'algorithme 1 décrit le pseudo-code d'UDGVNS. Il restaure l'exhaustivité de DGVNS en appliquant des appels successifs avec des valeurs croissantes d'écart à l'heuristique de choix de valeurs (*discrepancy*, noté ℓ) pour LDS¹, en contrôlant si la recherche arborescente est partielle grâce au drapeau opt et le fait que le voisinage actuel garde certaines variables assignées dans l'affectation partielle A (test à la ligne 6). Dans UDGVNS, l'optimalité peut être prouvée dans deux cas: (i) lorsque le voisinage actuel correspond à l'ensemble des variables du problème et que la valeur ℓ est supérieure ou égale au nombre maximal de branches droites ou (ii) en examinant les bornes au

1. Nous supposons un arbre de recherche binaire où à chaque nœud soit la variable sélectionnée est affectée à sa valeur préférée (branche de gauche) soit la valeur est supprimée du domaine (branche de droite). Chaque suppression correspond à une mauvaise décision prise par la recherche.

nœud racine ($ub = lb(\mathcal{D})$, cf. lignes 2 et 5). Dans ce cas, l’optimalité est prouvée implicitement, l’espace de recherche n’est pas exploré.

La solution initiale est obtenue à la ligne 1 par une version modifiée de LDS, notée LDS^r, qui stoppe après l’obtention de la première solution.

UDGVNS ajuste le compromis entre la preuve d’optimalité et le comportement *any-time* (i.e., l’évolution de la qualité des solutions trouvées au cours du temps) via deux paramètres: la limite de l’écart à l’heuristique (ℓ) et la taille du voisinage (k). Dès qu’une meilleure solution est trouvée par LDS^r dans le voisinage courant (ligne 4), nous arrêtons la recherche afin de réinitialiser les deux paramètres à leur valeur minimale, car il est plus rapide d’explorer des petits voisinages (lignes 8-9). Nous avons évalué trois stratégies de mise à jour de ℓ et k pour l’opérateur $+_{\ell/k}$: augmente d’une unité (add1), multiplie par deux (mult2), enfin selon une suite Luby (Luby *et al.*, 1993)² qui renvoie la valeur $a +_{\ell/k} b = \text{Luby}(a, b) = a \times \text{luby}(1+b)$ pour $\forall a, b \in N^*$.

L’opérateur $+_k$ contrôle le compromis entre intensification et diversification. Le but de la stratégie de Luby est d’intensifier l’effort de recherche sur les petits voisinages en augmentant exponentiellement le nombre de voisinages de petite taille versus ceux de grande taille, permettant ainsi de passer plus de temps sur les petits voisinages pour améliorer localement la solution actuelle, favorisant ainsi l’intensification. La stratégie mult2 réduit le nombre d’explorations de voisinage pour une valeur ℓ donnée, afin d’essayer plus rapidement des valeurs de ℓ plus grandes. Si le problème peut être résolu par une recherche complète dans les délais impartis, cela permet d’avoir une preuve d’optimalité plus tôt.

L’opérateur $+\ell$ contrôle l’équilibre entre recherche incomplète et complète. L’utilisation d’une stratégie de croissance rapide accentue l’exhaustivité alors qu’une croissance lente devrait favoriser les comportements anytime. Nous avons noté qu’il est plus efficace de couvrir toutes les variables par l’union des voisinages explorés afin de ne pas manquer certaines variables importantes.

Pour exploiter cette idée, nous avons testé une quatrième stratégie, qui exploite la décomposition arborescente du problème, notée (C_T, T) avec $T = (I, A)$ un arbre de sommets I et d’arêtes A , et $C_T = \{C_i \mid i \in I\}$ un ensemble de parties de \mathcal{X} appelées clusters. Elle consiste à modifier k via un incrément lent (de +1) au début jusqu’à $k = \max_{i \in I}(|C_i|) + |C_T| - 1$ puis saute directement à $k = k_{max}$. Afin de garantir que k augmente lentement jusqu’à ce que le plus grand groupe de variables ait été totalement exploré au moins une fois lors d’une recherche dans un voisinage. Ensuite, quand $k = k_{max} = |\mathcal{X}|$, UDGVS effectue une nouvelle recherche de solution via LDS^r sur l’ensemble du problème. S’il ne parvient pas à trouver une meilleure solution, un écart ℓ plus grand est pris et UDGVS poursuit son processus d’intensification en repartant d’un voisinage de petite taille avec un nombre de variables égale à k_{min} (ligne 3).

2. Rappelons que $\text{luby}(i) = \{1, 1, 2, 1, 1, 2, 4, 1, 1, 2, 1, 1, 2, 4, 8, \dots\}$.

3. Expérimentations

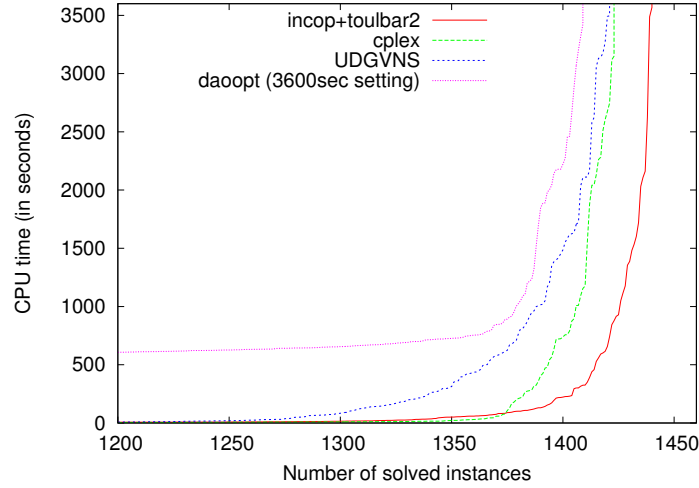


Figure 1. Nombre d'instances résolues à l'optimum en fonction du temps de calcul

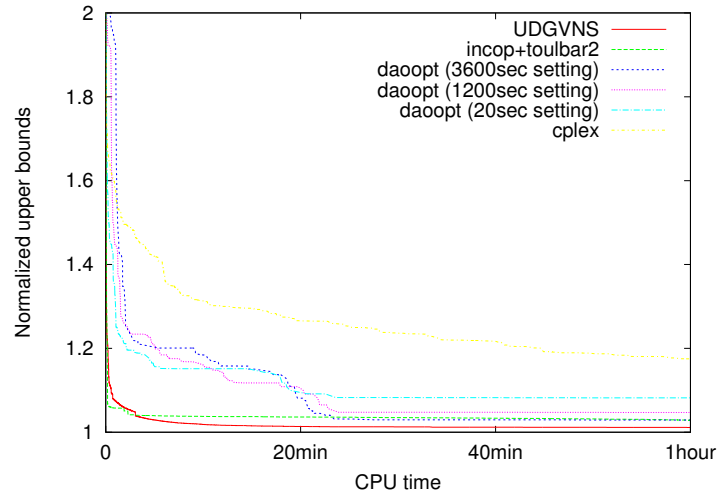


Figure 2. Qualité des solutions au cours du temps pour 114 instances difficiles

UDGVNS a été évalué sur 1669 instances non-triviales issues de compétitions sur les modèles graphiques (Hurley *et al.*, 2016). Elles recouvrent divers domaines d'applications (Probabilistic Inference Challenge, Computer Vision and Pattern Recognition, OpenGM2 benchmark, Cost Function Library). À notre connaissance, ce travail

est la première tentative de restauration de la complétude sur une méthode de recherche locale de type VNS. En pratique, nous avons fixé $k_{min} = 4$, $k_{max} = |\mathcal{X}|$, $+_k = \text{add1} / \text{jump}$, $\ell_{min} = 1$, $\ell_{max} = |\mathcal{X}| \times \max_{i=1}^n (|D_i| - 1)$ et $+_\ell = \text{mult}2$. Les résultats, présentés en Figures 1 et 2, montrent que l’approche offre un bon compromis entre comportement anytime et preuve d’optimalité, comparé à des méthodes de l’état de l’art dont IBM ILOG CPLEX 12.7.0.0 (paramètres EPAGAP, EPGAP, EPINT mis à zéro pour éviter un arrêt prématuré), DAOOPT³ (incluant une recherche locale GLS⁺ suivie d’une recherche arborescente exploitant la décomposition arborescente) et INCOP+TOULBAR2⁴ (ancienne version 0.9.8 avec les paramètres *-i -dee -hbfs* effectuant une recherche locale *IDWalk* suivie par une recherche arborescente hybride meilleure-en-premier *hbfs* (Hurley *et al.*, 2016)). L’article original à UAI-17 présente également une version parallèle d’UDGVNS.

Bibliographie

- Fontaine M., Loudni S., Boizumault P. (2013). Exploiting tree decomposition for guiding neighborhoods exploration for VNS. *RAIRO OR*, vol. 47, n° 2, p. 91-123.
- Harvey W., Ginsberg M. (1995). Limited discrepancy search. In *Proc. of ijcai*, p. 607-615.
- Hurley B., O’Sullivan B., Allouche D., Katsirelos G., Schiex T., Zytnicki M. *et al.* (2016). Multi-Language Evaluation of Exact Solvers in Graphical Model Discrete Optimization. *Constraints*, vol. 21, n° 3, p. 413-434.
- Koller D., Friedman N. (2009). *Probabilistic graphical models: principles and techniques*. The MIT Press.
- Loudni S., Boizumault P. (2003). Solving constraint optimization problems in anytime contexts. In *Proc. of ijcai*, p. 251-256.
- Luby M., Sinclair A., Zuckerman D. (1993). Optimal speedup of Las Vegas algorithms. In *Proc. of tcs*, p. 128-133.
- Meseguer P., Rossi F., Schiex T. (2006). Soft constraints processing. In *Handbook of constraint programming*, chap. 9. Elsevier.
- Mladenović N., Hansen P. (1997, novembre). Variable Neighborhood Search. *Comput. Oper. Res.*, vol. 24, n° 11, p. 1097-1100.
- Robertson N., Seymour P. D. (1986). Graph minors. ii. algorithmic aspects of tree-width. *Journal of Algorithms*, vol. 7, n° 3, p. 309-322.
- Shimony S. (1994). Finding MAPs for belief networks is NP-hard. *Artificial Intelligence*, vol. 68, p. 399-410.

3. graphmod.ics.uci.edu/group/DAOOPT-UAII2

4. www.inra.fr/mia/T/toulbar2

Contrainte Pondérée d'Acyclicité pour l'Apprentissage de Réseaux Bayésiens

Simon de Givry, George Katsirelos, and Fulya Ural

MIAT, UR-875, INRA, F-31320 Castanet Tolosan, France
{simon.de-givry,georgios.katsirelos,fulya.ural}@inra.fr

Abstract. Le problème étudié est celui de l'apprentissage de la structure d'un réseau bayésien à partir d'observations. On suppose les variables aléatoires entièrement observées pour un ensemble de réalisations et la difficulté est de retrouver la structure qui maximise la vraisemblance pénalisée des observations. Il s'agit d'un problème d'optimisation combinatoire NP-difficile avec un espace de recherche constitué d'un nombre super-exponentiel de graphes dirigés sans circuit. Plusieurs approches ont été développées pour tenter de résoudre de façon optimale ce problème dont la logique propositionnelle, la programmation dynamique, la programmation linéaire en nombre entiers et la programmation par contraintes. Le travail de recherche est constitué de l'étude d'une nouvelle approche inspirée des techniques de reformulation par cohérence locale souple dans les réseaux de fonctions de coûts. Différentes modélisations sont étudiées et comparées dont une approche utilisant la fermeture transitive du graphe dirigé représentant le réseau bayésien. Une modélisation implicite sous forme de contrainte globale est envisagée.

Keywords: Réseau bayésien · graphe dirigé acyclique · programmation par contraintes · réseau de fonctions de coûts.