In [1]:

%load_ext autoreload
%autoreload 2

import numpy as np
import utils
import tme5

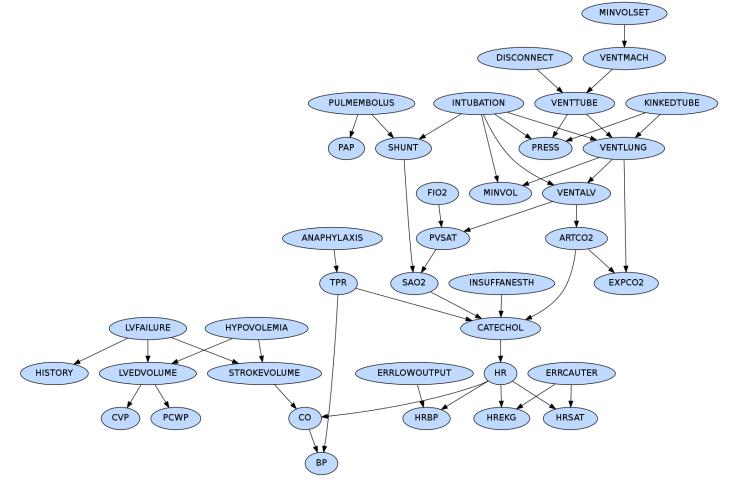
MAPSI semaine 5 : Indépendances conditionnelles et réseaux bayésiens

Exercice: Indépendances conditionnelles et réseaux bayésiens

Dans ce TME, l'objectif est d'apprendre des réseaux bayésiens à partir de bases de données. Hormis la base asia, un exemple jouet relativement petit qui vous permettra de mettre au point les différents algorithmes du TME, les autres bases correspondront à des distributions de probabilité de tailles moins raisonnables :

nom de la base	provenance	nombre d'evenements elementaires
asia	BN repository	256
alarm	BN repository	10^{16}
adult	UCI machine learning repository	10^{12}
car	UCI machine learning repository	6912
agaricus-lepiota	UCI machine learning repository	10^{16}

Apprendre un réseau bayésien consiste à apprendre sa structure graphique ainsi que les paramètres de ses distributions de probabilité conditionnelles. Pour réaliser la deuxième tâche, il suffit d'estimer les paramètres de chaque distribution conditionnelle par maximum de vraisemblance, comme vous l'avez fait dans le TME 3. lci, nous nous focaliserons donc plutôt sur l'apprentissage de structure. Celle-ci reflétant des indépendances conditionnelles entre variables aléatoires, vous devrez exploiter des tests d'indépendance du $\chi 2$ afin d'obtenir des structures graphiques les moins denses possibles (en termes de nombres d'arcs). Ainsi, alarm représente une distribution jointe de plus de 10^{16} événements élémentaires mais, quand cette distribution est décomposée grâce au graphe ci-dessous (les noeuds représentant les variables aléatoires), elle peut être décrite (sans perte d'informations) à l'aide de seulement 752 paramètres. Comme nous l'avons vu en cours, cette représentation permet également d'effectuer très rapidement des calculs probabilistes.



1. Lecture des données

Dans le code ci-dessous, la fonction read_csv(name : str) -> (str np.array, int np.2D-array, Dict|string,int] np.array) vous permettra de lire les données des bases sur lesquelles vous allez travailler, et de les organiser sous une forme adéquate. Par exemple, une base de données est un fichier de la forme :

```
X_0,X_1,X_2,X_3
haut,gauche,petit,bas
bas,droite,grand,gauche
bas,gauche,moyen,bas
```

Dans cette base, nous avons 4 variables aléatoires nommées X_0, X_1, X_2, et X_3, et 3 enregistrements qui représentent des instanciations (observées) de ces 4 variables. Ainsi, X_0 a pour valeurs haut, bas et bas, X_1 a pour valeurs gauche, droite, gauche, etc.

La fonction read_csv prend en argument le nom d'un fichier CSV contenant une base de données et renvoie un triplet composé de :

• 1 tableau numpy de strings contenant les noms des variables aléatoires. Par exemple, pour la base ci-dessus, ce tableau correspond à:

```
n.array (['X_0', 'X_1', 'X_2', 'X_3'])
```

• un tableau numpy 2D contenant les données du fichier CSV encodées sous forme numérique (les valeurs des variables aléatoires sont transformées en nombres entiers): chaque ligne de ce tableau représente les intanciations d'une variable aléatoire et chaque colonne représente un enregistrement de la base de données, c'est-à-dire une instanciation/observation de toutes les variables aléatoires. Pour la base ci-dessus, nous obtiendrions le tableau ci-dessous (la signification des nombres est indiquée dans le dictionnaire précisé plus bas):

```
np.array ( [0, 1, 1], # instanciations de la variable X_{-}0 [0, 1, 0], # instanciations de la variable X_{-}1 [0, 1, 2], # instanciations de la variable X_{-}2 [0, 1, 0]] ) # instanciations de la variable X_{-}3
```

Ainsi, les valeurs observées de la première variable aléatoire X_0 correspondent à la première ligne du tableau (0, 1 et 1). La première colonne correspond à une observation de toutes les variables (X_0=0,X_1=0,X_2=0,X_3=0). C'est essentiellement sur ce tableau numpy que vous travaillerez dans ce TME.

• un tableau numpy de dictionnaires faisant la correspondance, pour chaque variable aléatoire, entre l'encodage numérique du tableau 2D ci-dessus et les données du fichier CSV (le 1er dictionnaire correspond à la variable de la 1ère colonne du CSV, le 2ème dictionnaire à celle de la 2ème colonne, etc.). Ainsi, le dictionnaire est égal à :

```
np.array( [ {'haut': 0, 'bas': 1}, # encodage variable X_{-}0 {'gauche': 0, 'droite': 1}, # encodage variable X_{-}1 {'petit': 0, 'grand': 1, 'moyen': 2}, # encodage variable X_{-}1 {'bas': 0, 'gauche': 1} ] ) # encodage variable X_{-}1
```

On peut ainsi reconstituer le CSV d'origine. Par exemple, la première colonne du tableau 2D ci-dessus, qui est égale à 0,0,0,0 correspond à haut,gauche,petit,bas: "haut" correspondant au 0 de la première variable aléatoire, "gauche" correspondant au 0 de la 2ème variable, etc.

Nous lisons le fichier res/tme5_asia.csv à l'aide de la fonction read_csv ci-dessous: la dernière instruction, names, data, dico = read_csv ("tme5_asia.csv") , vous permettra de récupérer, séparément, les trois champs du triplet renvoyé par la fonction read_csv.

```
# names : tableau contenant les noms des variables aléatoires
 # data : tableau 2D contenant les instanciations des variables aléatoires
 # dico : tableau de dictionnaires contenant la correspondance (valeur de variable -> nombre)
names, data, dico = utils.read csv ( "res/tme5 asia.csv" )
print(f"{names=}")
print(f"{data=}")
print(f"{dico=}")
names=array(['visit to Asia?', 'smoking?', 'tuberculosis?', 'lung cancer?',
       'bronchitis?', 'tuberculos or cancer?', 'dyspnoea?',
       'positive XraY?'], dtype='<U21')
data=array([[0, \overline{0}, 0, ..., 0, 0],
       [0, 1, 1, \ldots, 1, 0, 1],
       [0, 0, 0, \ldots, 0, 0, 0],
       [0, 1, 1, \ldots, 1, 1, 1],
       [0, 0, 1, ..., 1, 0, 0],
       [0, 1, 1, \ldots, 1, 1, 1])
dico=array([{'true': 0, 'false': 1}, {'false': 0, 'true': 1},
       {'true': 0, 'false': 1}, {'false': 0, 'true': 1},
       {'false': 0, 'true': 1}, {'false': 0, 'true': 1},
       {'false': 0, 'true': 1}, {'false': 0, 'true': 1}], dtype=object)
```

Nous présenterons les calculs avec une base minimale.

{'petit': 0, 'grand': 1, 'moyen': 2}, {'bas': 0, 'gauche': 1}],

2. Statistique du χ^2 conditionnel

dtype=object)

Soit deux variables aléatoires X et Y. Appelons N_{xy} , N_x et N_y , respectivement, le nombre d'occurrences du couple (X=x,Y=y) et des singletons X=x et Y=y dans la base de données. Alors, comme indiqué dans le cours 5, la statistique du χ^2 de X et Y est égale à :

$$\chi^2_{X,Y} = \sum_x \sum_y rac{\left(N_{xy} - rac{N_x imes N_y}{N}
ight)^2}{rac{N_x imes N_y}{N}}$$

où $\{N\}$ représente le nombre de lignes de la base de données. Cette formule permet de tester l'indépendance entre les deux variables $\{X\}$ et $\{Y\}$. On peut aisément généraliser celle-ci pour tester des indépendances conditionnellement à un ensemble de variables $\{Z\}$:

$$\chi^2_{X,Y|\mathbf{Z}} = \sum_x \sum_y \sum_{\mathbf{z}} rac{\left(N_{xy\mathbf{z}} - rac{N_{xz} imes N_{yz}}{N_{\mathbf{z}}}
ight)^2}{rac{N_{xz} imes N_{yz}}{N_{\mathbf{z}}}}$$

où N_{xyz} , N_{xz} , N_{yz} et N_z représentent, respectivement, le nombre d'occurrences du triplet $(X=x,Y=y,\mathbf{Z}=\mathbf{z})$, des couples $(X=x,\mathbf{Z}=\mathbf{z})$ et $(Y=y,\mathbf{Z}=\mathbf{z})$, et du singleton $\mathbf{Z}=\mathbf{z}$. Ainsi, si \mathbf{Z} est un ensemble de 3 variables aléatoires (A,B,C), les valeurs \mathbf{z} seront des triplets (a,b,c).

Afin de vous aider à calculer ces χ^2 , vous pourrez utiliser la fonction utils.create_contingency_table . Celle-ci prend en argument le tableau 2D numpy data et le tableau de dictionnaires dico retournés à la fin de la question 1, ainsi que l'index x d'une variable aléatoire (0 = 1ère variable aléatoire (celle de la 1ère ligne de data), 1 = 2ème variable, etc.), l'index y d'une autre variable et une liste z d'index d'autres variables aléatoires. Elle renvoie un tableau de couples ($\{N_{\bf z}, T_{X,Y,{\bf z}}\}$), pour tous les $\{{\bf z} \in {\bf Z}\}$, où:

• $N_{\mathbf{z}}$ représente le nombre d'occurences de $\{Z=z\}$ dans la base de données. Par exemple, si la base de données est la suivante :

```
X_0,X_1,X_2,X_3
haut,gauche,petit,bas
bas,droite,grand,gauche
bas,gauche,moyen,bas
```

nous avons vu plus haut que le tableau data est égal à :

```
data = np.array ( [0, 1, 1], # instanciations de la variable X_0 [0, 1, 0], # instanciations de la variable X_1 [0, 1, 2], # instanciations de la variable X_2 [0, 1, 0] ) # instanciations de la variable X_3
```

L'application de create_contingency_table(data, dico, 0, 2, [3]) renverra le tableau:

Soit le résultat suivant :

			X2	
ХЗ	хо	0	1	2
0	0	1.0000	0.0000	0.0000
	1	0.0000	0.0000	1.0000
	0	0.0000 0.0000 0.0	0.0000	
'	1	0.0000	1.0000	0.0000

En effet le paramètre [3] indique que ${\bf Z}$ est constitué uniquement de la quatrième variable de la base, autrement dit X_3 . La dernière ligne du tableau data indique les instanciations de X3 et l'on peut observer que la valeur 0 apparaît 2 fois et la valeur 1 apparaît une fois. On a donc $N{Z=0} = 2etN{Z=1} = 1$. Onpeutobserverquelesvaleurs de $N{Z=0}$ sont bien les premiers éléments des couples de resultat. Lors que \mathbf{Z} = \emptyset

 $, `resultat` est un table au avec un seul couple dont le premier\'e l\'e ment correspond pr\'ecis\'e ment\`a N\$, le nombre d'enregistrements de la base de données.$

• $T_{X,Y,\mathbf{z}}$ est un tableau 2D contenant le nombre d'occurrences $N_{xy\mathbf{z}}$ des couples (X=x,Y=y) lorsque $\mathbf{Z}=\mathbf{z}$. La première dimension de ce tableau (les lignes) correspondent aux différentes valeurs de X et la deuxième (les colonnes) à celles de $\{Y\}$.

Ainsi, le tableau en haut à droite de resultat est obtenu de la manière suivante: ce tableau correspond à des occurrences de (X,Y) lorsque $\mathbf{Z}=0$. on commence donc par extraire de data le sous-tableau correspondant à la première et à la troisième colonne (les colonnes où X_3=0) et on ne retient que les lignes correspondant à X_0 et X_2 (cf. les paramètres 0 et 2 passés en arguments de **create_contingency_table**). On obtient donc le sous-tableau:

```
np.array ( [ [0, 1], # instanciations de la variable X_0 [ [0, 2] ] ) # instanciations de la variable X_2
```

Ce tableau nous indique que, lorsque $X_3=0$, les couples $(X_0=0,X_2=0)$ et $(X_0=1,X_2=2)$ apparaissent une seule fois et ce sont les seuls couples qui apparaissent dans la base de données. C'est précisément ce que représente le tableau en haut à droite de resultat

En utilisant la structure retournée par la fonction create_contingency_table , écrivez une fonction sufficient_statistics qui prend les mêmes arguments que la fonction utils.create_contingency_table et qui renvoie

• la valeur de $\chi^2_{X,Y|\mathbf{Z}}$. Vous pourrez tirer profit du fait que $N_{x\mathbf{z}} = \sum_y N_{xy\mathbf{z}}$ et $N_{y\mathbf{z}} = \sum_x N_{xy\mathbf{z}}$, ce qui revient à faire des sommes sur chaque ligne ou chaque colonne des tableaux $T_{X,Y,\mathbf{z}}$.

Attention: il peut arriver que certains N_z soient égaux à 0. Dans ce cas, vous ne tiendrez pas compte des N_{xyz} , N_{xz} et N_{yz} correspondants dans la formule de $\chi^2_{X,Y|Z}$ (car vous feriez des divisions par 0, ce qui est mal).

• le degré de liberté de voter statistique qui est égale à

tme5.sufficient statistics (data, dico, 2,3,[5

$$(|X|-1) \times (|Y|-1) \times |\{\mathbf{z} : N_{\mathbf{z}} \neq 0\}|$$

4. Test d'indépendance

En cours, nous avons vu que, pour un risque α donné, si la statistique $\chi^2_{X,Y|\mathbf{Z}}$ est inférieure au seuil critique c_{α} de la loi du χ^2 à DoF degrés de liberté, alors X et Y sont considérés comme indépendants conditionnellement à \mathbf{Z} ($X \perp \!\!\! \perp Y | \mathbf{Z}$). On peut reformuler cette propriété de la manière suivante :

])=(130.0, 2)

$$\operatorname{p-value}(\chi^2_{X,Y|\mathbf{Z}}) \geq \alpha \Longleftrightarrow X \perp \!\!\! \perp Y|\mathbf{Z}$$

La p-value d'un nombre x est l'intégrale de la fonction de densité de la loi du χ^2 de x à $+\infty$ (autrement dit, c'est la surface de la partie grisée sur votre table du χ^2 à partir de l'abscisse x. On a donc p-value $(c_\alpha)=\alpha$. En statistiques, on considère qu'elle n'a du sens que si les valeurs du tableau de contingence sont toutes supérieures ou égales à 5 (autrement dit, un test d'indépendance du χ^2 n'est "valide" que si toutes les valeurs du tableau de contingence sont supérieures ou égales à 5). En informatique, on allège souvent cette règle en considérant que le test est valide dès lors que la valeur moyenne des cases est supérieure ou égale à 5. Cet allègement permet de tester la validité du test sans réaliser celui-ci : si le nombre de lignes du CSV est supérieure ou égale à $d_{min}=5\times |X|\times |Y|\times |\mathbf{Z}|$, le test est considéré comme valide.

Ecrivez une fonction indep_score(int np.2D-array , Dict{str ,int} np.array , int , int , List[int]) -> (float,int) qui, étant donné les mêmes paramètres que ceux de la question précédente, vous renvoie un couple contenant la p-value correspondant à $\chi^2_{X,Y|\mathbf{Z}}$ ainsi que le nombre de degrés de liberté de cette statistique. Vous testerez au préalable si len (data[0]), le nombre de lignes/enregistrements de votre CSV, est supérieur ou non à d_{min} ; si c'est inférieur, vous renverrez le couple (-1,1), qui représente une indépendance. Vous pourrez vous aider de la fonction scipy.stats.chi2.sf (x, DoF) qui renvoie la p-value (x) pour une loi à DoF degrés de liberté.

```
stats.chi2.sf ( x, DoF )

In [6]:
    names, data, dico = utils.read_csv ( "res/tme5_asia.csv" )

    print(f"{tme5.indep_score(data,dico,1,3,[])=}")
    print(f"{tme5.indep_score(data,dico,0,1,[2,3])=}")
    print(f"{tme5.indep_score(data,dico,0,1,[2,3])=}")
    print(f"{tme5.indep_score(data,dico,1,2,[3,4])=}")

tme5.indep_score(data,dico,1,3,[])=2.385201769381993e-19
    tme5.indep_score(data,dico,1,7,[])=1.1256278497870963e-10
    tme5.indep_score(data,dico,0,1,[2,3])=0.0009588282365754292
```

5. Meilleur candidat pour être un parent

tme5.indep_score(data,dico,1,2,[3,4])=0.4752661978937994

import scipy.stats as stats

Ecrivez une fonction best_candidate(int np.2D-array x Dict{str, int} np.array , int , List[int], float) -> List[int] qui, étant donné les tableaux data et dico calculés à la question 1, l'index d'une variable aléatoire X, la liste d'index d'un ensemble de variables aléatoires $\mathbf Z$ et un risque α , détermine la variable Y (en fait, l'index de sa colonne dans le CSV), parmi toutes celles à gauche de X dans le fichier CSV, qui est la plus dépendante de X conditionnellement à $\mathbf Z$, autrement dit, celle qui a la plus petite p-value. Si cette p-value est supérieure à α , cela veut dire que $\chi^2_{X,Y|\mathbf Z}$ est inférieur à c_α et donc que Y est jugée indépendante de X conditionnellement à $\mathbf Z$.

Votre fonction renverra une liste vide si Y est indépendante de X conditionnellement à \mathbf{Z} , sinon elle renverra une liste contenant Y. Vous pourrez tester votre fonction avec α = 0.05:

6. Création des parents d'un noeud

tme5.create parents(data, dico, 6, 0.05) = [4, 5]

tme5.best candidate(data, dico, 5, [6,7], 0.05) = [2]

Ecrivez une fonction create_parents (data, dico, x, alpha) qui, étant donné une variable aléatoire x et un niveau de risque alpha, retourne la liste z de ses parents dans le réseau bayésien. L'algorithme est le suivant : partez de z = l'ensemble vide, puis tant que best_candidate(x, z, alpha) vous renvoie une liste non vide [y], rajoutez y à z. Lorsque vous sortirez de cette boucle, toutes les autres variables seront indépendantes de x conditionnellement à z.

L'algorithme qui consiste à appliquer, pour chaque noeud/variable aléatoire, votre fonction create_parents correspond, en grande partie, à l'article suivant :

Gregory F. Cooper and Edward Herskovits (1992) "A Bayesian method for the induction of probabilistic networks from data", *Machine Learning*, Vol. 9, n°4, pp. 309-347.

7. Apprentissage de la structure d'un réseau bayésien

Ecrivez une fonction learn_BN_structure(data, dico, alpha) qui renvoie un tableau contenant, pour chaque noeud, la liste de ses parents. Ainsi, si votre fonction vous renvoie le tableau ci-dessous,

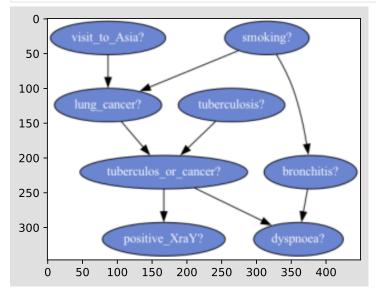
array([[], [], [], [1, 0], [1], [3, 2], [4, 5], [5]])

les noeud correspondant aux 2 premières colonnes du CSV n'ont pas de parents, le noeud de la 3ème colonne a pour parent celui de la 1ère colonne, etc.

Pour visualiser plus aisément votre structure, utilisez la fonction display_BN ci-dessous. Celle-ci prend en paramètres :

- 1. le tableau des noms des variables aléatoires déterminé à la question 1
- 2. la structure que vous avez calculée avec votre fonction learn_BN_structure
- 3. un nom que vous voulez donner à votre réseau
- 4. un style pour afficher les noeuds

```
In [9]: bn_struct = tme5.learn_BN_structure ( data, dico, 0.05 )
    utils.display_BN ( names, bn_struct, "asia")
```



8. Fin de l'apprentissage et calcul probabiliste (Partie optionnelle)

Comme précisé au début du TME, apprendre un réseau bayésien consiste à déterminer sa structure graphique et estimer ses paramètres. Vous avez réalisé la première partie. La deuxième, plus simple, peut se faire par maximum de vraisemblance pour chaque table de probabilité des noeuds conditionnellement à leurs parents, comme dans le TME 3. Utilisez la fonction learn_parameters ci-dessous pour effectuer cette tâche. Cette fonction prend en paramètres la structure graphique que vous avez apprise ainsi que le nom du fichier CSV que vous avez utilisé pour votre apprentissage. Elle renvoie un réseau bayésien à la aGrUM. Pour pouvoir utiliser aGrUM, reportez-vous à la [question 7 du TME 2].

```
In [10]: bn = utils.learn_parameters ( bn_struct, "res/tme5_asia.csv" )
```

Vous pouvez maintenant réaliser des calculs probabilistes :

• affichage de la taille du réseau bayésien

```
# création du réseau bayésien à la aGrUM
bn = learn_parameters ( bn_struct, ficname )
# affichage de sa taille
print(bn)
```

• affichage de la table de probabilité conditionnelle d'un noeud du réseau déterminé par son nom (1ère ligne du CSV):

```
# récupération de la ''conditional probability table'' (CPT) et affichage de cette table
gnb.showPotential( bn.cpt ( 'bronchitis?' ) )
```

• affichage graphique d'une distribution de probabilité marginale

```
# affichage de la marginale
gnb.showPosterior( bn, evs={}, target='bronchitis?' )
```

• calcul d'une distribution marginale a posteriori : P(bronchitis? | smoking? = true, turberculosis? = false)

```
gnb.showPosterior ( bn,evs={'smoking?': 'true', 'tuberculosis?' : 'false' },
               target='bronchitis?' ))
           import pyAgrum as gum
           import pyAgrum.lib.notebook as gnb
           print(bn)
           gnb.showPotential( bn.cpt ( 'bronchitis?' ) )
           BN{nodes: 8, arcs: 8, domainSize: 256, dim: 38}
                        bronchitis?
           smoking?
                      false
                               true
                      0.6181 0.3819
             false
                      0.2917 0.7083
             true
            gnb.showPosterior ( bn, evs={}, target='bronchitis?' )
                      bronchitis?
                                 45.51%
           false
            true
                                 54.49%
            gnb.showPosterior ( bn,evs={'smoking?': 'true', 'tuberculosis?' : 'false' }, target='bronchitis?' )
                      bronchitis?
                                 29.17%
           false
                                 70.83%
            true
In [14]:
           gnb.sideBySide(gnb.getInference(bn),gnb.getInference(bn,evs={'smoking?': 'true', 'tuberculosis?' : 'false' }))
                   visit_to_Asia?
                                                     smoking?
                                                                                   visit_to_Asia?
            false
                           1.55%
                                            false
                                                           50.05%
                                                                             false
                                                                                            1.55%
                                                                                                             false
                           98.45%
                                             true
                                                           49.95%
                                                                             true
                                                                                                             true
                                                                                                                           100.009
                   lung_cancer?
                                           tuberculosis?
                                                                                                            tuberculosis?
                                                                                   lung_cancer?
            false -
                            5.32%
                                                    1.40%
                                                                                            0.88%
                                                                                                                   100.00%
                                     false
                                                                             false
                                                                                                     false ·
                           94.68%
                                                   98.60%
                                                                                           99.12%
                                     true -
                                                                                                     true
                             tuberculos_or_cancer?
                                                            bronchitis?
                                                                                              tuberculos_or_cancer?
                                                                                                                             bronchitis?
                                          6.56%
                                                     false
                                                                   45.51%
                                                                                           false
                                         93.44%
                                                                   54.49%
                           true -
                                                     true -
                                                                                           true -
                                                                                                          3.86%
                                                                                                                     true ·
                                                                                                                                   70.83%
                                                            dyspnoea?
                                                                                                                            dyspnoea?
                                 positive_XraY?
                                                                                                  positive_XraY?
                           false
                                                    false
                                                                  45.21%
                                                                                                                                   74.31%
                                          88.79%
                                                                   54.79%
                                                                                            true
                                                                                                                                   25.69%
```

9. (Bonus) Autres bases de données

Inference in 6.31ms

Vous pouvez appliquer vos algorithmes sur des bases un peu plus conséquentes qu'asia:

nom de la base	provenance	nombre d'evenements elementaires
asia	BN repository	256
alarm	BN repository	10^{16}
adult	UCI machine learning repository	10^{12}

Inference in 4.46ms

nom de la base	provenance	nombre d'evenements elementaires
car	UCI machine learning repository	6912
agaricus-lepiota	UCI machine learning repository	10^{16}