Génération de codes d'inférences probabilistes

Marvin Lavechin et Pierre Stefani $28~{\rm ao\hat{u}t}~2015$

Table des matières

1	Pré	sentation du projet					
2	Pré	ésentation du problème					
	2.1	Calcul de probabilité					
		2.1.1 Quelques formules					
		2.1.2 Calcul au sein d'une table de probabilité jointe					
	2.2						
	2.3	Diffusion des probabilités dans les arbres de jonctions \dots					
3	Des	Description générale du projet					
	3.1	Présentation de la structure du projet					
	3.2						
		3.2.1 Opérations préalables					
		3.2.2 Création et Initialisation des potentiels					
		3.2.3 Absorption et Diffusion de l'information					

1 Présentation du projet

De Mars à Juillet 2014, encadré par Mr Pierre Henri Wuillemin, chercheur à l'Université Pierre et Marie Curie, nous avons travaillé sur la génération d'un code pour calculer des probabilités d'un réseau bayésien.

Les réseaux bayésiens sont des faisceaux de probabilités, ordonnés par des liens de parentés. Chacun des événements du réseau bayésien possède une table de probabilités dépendant des valeurs prises par ses parents. L'information peut ainsi être diffusé dans de tels réseaux. Le projet metaGenBayes utilise cette diffusion, appelé inférence, pour calculer une probabilité spécifique appelé target à partir d'un évènement certain(hard evidence) ou connu(soft evidence). Nous reviendrons sur ce vocabulaire plus en détail par la suite. Dans un cadre classique, ce calcul de probabilités selon des observations : P(X|e) est simple. Toutefois, les modèles étant très vite complexes, l'inférence probabiliste devient un problème NP-difficile.

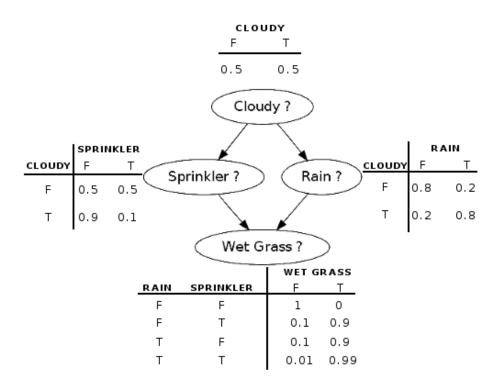


FIGURE 1 – Exemple de réseau bayésien

Le but du projet était de créer un moteur d'inférence probabiliste, qui n'allait pas faire le calcul mais générer des codes calculatoires dans différents langages cibles. Ce moteur s'appuie sur certaines bibliothèques lip6, comme par exemple pyAgrum.

2 Présentation du problème

2.1 Calcul de probabilité

2.1.1 Quelques formules

Comme explicité dans la courte présentation, l'inférence probabiliste s'appuie sur des probabilités conditionnelles, régies par quelques lois de calcul qu'il est important d'introduire :

Soient A et B deux événements que lconques d'un même univers. On s'intéresse à ce que devient la probabilité de A lors qu'on apprend que B est déjà réalisé. On note P(A|B) et on lit "probabilité de A sachant B". La définition mathématique de P(A|B) est :

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}, \quad P(B) \neq 0$$

(Formule de Bayes)

Cette formule s'écrit aussi : P(A|B) α $P(A) \times P(B|A)^1$

Ceci nous amène à considérer deux autres formules. Soit $(A_i)_{i\in I}$ un système complet d'événements de probabilités non nulles. Alors pour tout événement B on a :

$$P(B) = \sum_{i \in I} P(A_i \cap B) = \sum_{i \in I} P(A_i) P(B|A_i)$$

(Formule des probabilités totales)

Si $P(A_1 \cap ... \cap A_n) \neq 0$, on a :

$$P(A_1 \cap \ldots \cap A_n) = \prod_{i=1}^n P(A_i | A_{i+1} \cap \ldots \cap A_n)$$

(Formule des probabilités composées)

2.1.2 Calcul au sein d'une table de probabilité jointe

Soient A_1, A_2, A_3 trois variables aléatoires binaires. On peut écrire une table listant toutes les combinaisons possibles de ces 3 variables, qui sont au nombre de 2^3 .

En effet, on a:

$$(A_1 = true \quad A_2 = true \quad A_3 = true)$$

 $(A_1 = false \quad A_2 = true \quad A_3 = true)$
 $(A_1 = true \quad A_2 = false \quad A_3 = true)$
 $etc...$

Pour chacune des combinaisons, supposons que nous disposions de la probabilité jointe de cette combinaison.

^{1.} P(A|B) est la loi à posteriori, P(A) la loi à priori et P(B|A) la vraisemblance, tandis que P(B) sert de coefficient normalisateur

Si l'on veut la probabilité $P(A_1 \cap A_2)$, la formule des probabilités totales nous dit qu'il suffit qu'on somme les probabilités des combinaisons de la table pour laquelle A_1 est vrai et A_2 l'est aussi.

Si l'on veut la probabilité $P(A_1|A_2)$, la formule de Bayes nous dit qu'il suffit qu'on somme toutes les probabilités des combinaisons de la table pour lesquelles A_1 est vrai et A_2 est vrai en divisant par la somme des probabilités des combinaisons de la table pour lesquelles A_2 est vrai.

On peut donc à partir de la table des probabilités jointes déduire n'importe quelle probabilité conditionnelle. Les tailles de ces tables évoluant de manière exponentielle, il devient impossible d'utiliser simplement cette approche pour le calcul d'inférences probabilistes.

2.2 Arbres de Jonction

Avant de revenir en détail sur les méthodes utilisés pour calculer ces probabilités conditionnelles, nous allons décrire le principe des arbres de jonctions, transformation nécessaire des réseaux bayésiens en arbres dépourvus de toute orientation. La motivation principale de cette étape est de créer des cliques - noeuds regroupants plusieurs probabilités/évènements de notre réseau. Ces cliques seront alors liées sans aucune orientation (évitant ainsi la gestion des cycles). Ces arbres doivent également satisfaire la propriété suivante des arbres de jonctions :

Deux cliques U et V possédant un ensemble S de probabilités communes, sont séparés, lors de leur liaison dans l'arbre de jonction, par cet ensemble S

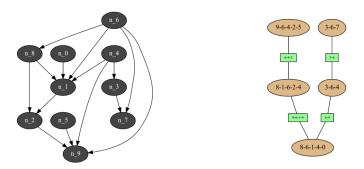


FIGURE 2 – Un réseau bayésien généré (à gauche), et un arbre de jonction possible pour ce réseau (à droite)

La première étape de création de ces arbres est une phase de moralisation : il s'agit de créer un lien entre deux parents d'un même élémént. Dans l'exemple de la Figure 2, un lien est crée entre n2 et n5, deux des parents de n9. Une fois cette moralisation effectuée, la création de supercliques regroupant des élèments connectés du réseau bayésien est quasiment finie. Toute orientation est ensuite enlevée, et la dernière étape est une phase dite de 'triangulation', pour enlever toute possibilité de cycles à la nouvelle structure. Les arbres de jonctions regroupent désormais plusieurs probabilités, et l'on associera à ces ensembles leurs probabilités respectives avec des potentiels dans le lexique des réseaux

bayésiens, qui seront simplement des tableaux de probabilités dans nos langages plus courants.

2.3 Diffusion des probabilités dans les arbres de jonctions

Rappelons notre principal objectif : à partir d'une évidence donnée pour une probabilité A, nous devons calculer la nouvelle probabilité de l'évènement B : l'information de A va donc devoir circuler dans le réseau. La structure d'arbres de jonctions va grandement simplifier ce que l'on appelera la diffusion de l'information. La clique de départ, celle pour laquelle a été transmise l'information (ce choix arbitraire n'a d'influence que sur le temps de réponse du programme) possède un potentiel Φ contenant les probabilités des variables de notre réseau. Pour passer d'une clique A à la clique B, l'information est projetée de A à B selon les séparateurs comme le montre la Figure 3.

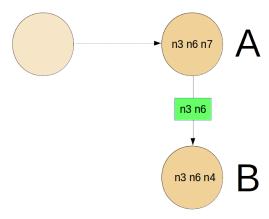


Figure 3 – Exemple de diffusion d'une clique A vers une clique B dans un arbre de jonction

La projection de A sur B suit d'abors la formule de projection sur le séparateur :

$$\Psi_{AB}^{'} = \sum\nolimits_{X_i \in \Phi_A, X_i \notin \Psi_{AB}} \Phi_A$$

Puis du séparateur à la clique B :

$$\Phi_{B}^{'}=\Phi_{B}*\Psi_{AB}^{'}$$

Dans le cas de la figure 3, cela donne :

$$\Phi_{n3,n6,n4}^{'} = \Phi_{n3,n6,n4} * \sum\nolimits_{n7} \Phi_{n3,n6,n7}$$

Ainsi, à partir des évidences fournies à certaines cliques de l'arbre de jonction, toute l'information sera diffusée vers une clique principale, appelée clique racine, dans une étape que nous avons appelée *l'absorption*. Voici l'algorithme utilisé pour définir cette clique racine, vers qui tout converge :

Algorithm 1 Trouver la clique racine

```
Voisins Max = -1 for I \in cliques do for X \in targets do if X \in variables(I) then if nbVoisins(I) > voisins Max then Voisins Max \leftarrow nbVoisins(I) Clique Racine \leftarrow I end if end for end for return Clique Racine
```

Cet algorithme permet à la fois à la clique racine de contenir au moins une target, et donc permettra un calcul rapide pour au moins un résultat, et également d'avoir le maximum de voisins, nous assurant ainsi qu'il ne s'agira pas d'une clique isolée pour laquelle de nombreux calculs inutiles seraient effectués.

Il faut pour calculer la probabilité de la target, revenir sur une clique la contenant, et appliquer une marginalisation :

Soit une target $T \in C$, une clique de notre arbre. Marginaliser revient à calculer :

$$P(T) = \sum_{X \in C, X \neq T} \Phi_C$$

Une fois la phase d'absorption effectuée, notre arbre est dans l'état suivant : toute l'information a convergée et est contenue dans une clique racine. C'est à partir de celle-ci que la seconde étape commence, la *diffusion* vers les targets, pour y appliquer les marginalisations. Une fonction du module **Compiler** -que nous développerons plus tard, crée une liste de diffusion avec les cliques visitées contenant les targets.

Admettons que B et C aient reçu l'information de la diffusion, qui doit maintenant être projetée sur A, clique contenant une target. Il faut 'collecter' l'information dans les cliques voisines, c'est à dire, pour aller de C à A, récupérer les potentiels Φ_B et Φ_D , en plus de Φ_C . Une fois Φ_C actualisé de la sorte, on peut appliquer les formules de projections sur le séparateur puis vers D comme vu précedemment. La clique D et ses potentiels ont alors bien reçu l'information de tout le réseau bayésien.

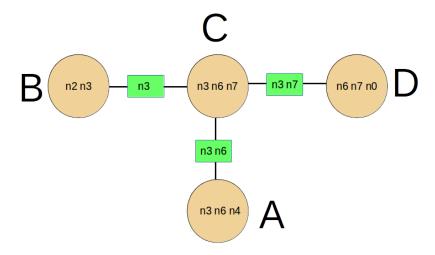


FIGURE 4 – Exemple pour la phase de collecte d'informations de la diffusion

3 Description générale du projet

3.1 Présentation de la structure du projet

Ce projet de génération de code calculatoire a été écrit en python, s'appuyant notamment sur la bibliothèque pyAgrum du département lip6. Parmi les langages implémentés pour la génération, on trouve deux versions Python : une utilisant des fonctions pré-conçues dans pyAgrum, l'autre, plus générale, utilise des tableaux numpy; PHP et Javascript complètent la liste de ces langages. Ce projet nous a donc permis non seulement d'apprendre comment mener ce genre de travaux : écriture, commentaire, gestion du temps et du travail, mais aussi de nous familiariser avec ces nouveaux langages : une étude plus approfondie de Python était nécessaire, et il était important de connaître et comprendre les bases de PHP et Javascript.

L'éxècutable final est un fichier Python, *metaGenBayes.py*, qui récupère les spécifités et les requêtes dans un fichier Yaml, support conçu pour ce genre d'utilisation. Ce dernier se présente ainsi :

- Un réseau bayésien a donner en entrée, le chemin est relatif au fichier config.py fourni avec config.yaml.
- Les évidences : hard et soft evidences sont supportées par le programme, mais doivent être donnés sous forme de dictionnaires python, suivi, pour les soft evidences, du tableau de valeurs prises par celles-ci, et pour les hard evidences, de l'indice pour lequel la valeur est certaine.
- Les targets
- Le langage ('debug' est un langage supporté, il liste les actions effectuées par le programme)

- Le nom de lu fichier généré, qui contiendra les instructions.
- Le nom de la fonction principale du fichier créé.
- Eventuellement, un header pour le fichier généré.

Ce fichier permet de donner au système tous les inputs nécessaires à la construction des fonctions, des fichiers, etc par le compilateur et le générateur du projet. Plus aucune entrée ne sera demandée, et le fichier obtenu en sortie sera configuré comme souhaité par l'utilisateur.

3.2 La Compilation

Pour pouvoir générer en différents langages une même requête, il était nécessaire de passer par une étape dite de compilation, entre les entrées de l'utilisateur et l'écriture dans le langage spécifié. Le résultat de la compilation, un tableau d'instructions, est compréhensible par tous les langages, et le déchiffrage de ce dernier correspondra à la génération. A partir de nos connaissances en réseaux bayésiens, et après avoir travaillé sur quels types de calculs nous allions devoir utiliser, sept opérations de bases sont apparues. Ce sont ces opérations que l'on retrouve dans chacun des index du tableau d'instructions, avec leurs arguments. Voici un example d'instruction pour la création d'un potentiel Φ_{0135} contenant les variables 0, 1, 3 et 5 du réseau bayésien :

['CPO', 'Phi
$$-0 - 1 - 3 - 5'$$
, [0,1,3,5]]

- . Voici les opérations principales :
- L'initialisation des cpts (probabilités de chacune des variables). Instruction particulière avant toute générétion, permettant la copie dans des variables locales des tableaux de probabilités du réseau bayésien.
- La création d'un potentiel, code CPO, qui crée un potentiel dont le *nom* et les *variables* qu'il contient sont passés en paramètres.
- L'instruction ASE, qui initialise un potentiel lié à une évidence. Le nom, la valeur et enfin l'index de l'évidence dans le dictionnaire sont les arguments.
- La multiplication d'un potentiel par une cpt, MUC. Pour la génération, le *nom* du potentiel, ses *variables* sont stockés, ainsi que la *variable* dont le tableau de probabilités sera récupéré.
- La multiplication entre deux potentiels, MUL. Là encore, *noms* et *va*riables sont ajoutés au tableau d'instruction.
- L'instruction MAR pour la marginalisation d'un potentiel selon un autre potentiel. Les mêmes paramètres que pour la multiplication entre deux potentiels sont stockés.
- La normalisation d'un potentiel, identifié par son nom.

Le fichier compiler.py comprend un métacode qui effectue les opérations nécessaires pour ajouter correctement les instructions au tableau petit à petit.

3.2.1 Opérations préalables

Avant de commencer à définir les potentiels à créer, les chemins de diffusion, etc, deux opérations sont nécessaires au bon fonctionnement du métacode.

D'une hard evidence à une soft evidence

Dans le langage probabiliste, on distingue deux types d'informations sur une proobabilité. Une soft evidence est une vraisemblance dont on connait chacune des valeurs. Par exemple, si la probabilité qu'il pleuve aujourd'hui selon qu'il fasse beau, couvert ou orageux est : P(Pluie|Temps) = [0.1, 0.5, 0.8]. Celles-ci sont directement implémentables, en passant le tableau de valeurs au potentiel de l'évidence. L'autre type de vraisemblance, l'hard evidence, est une certitude. Avant toute opération de compilation, on transforme l'input hard evidence en un tableau de valeurs plus classiques où toutes les probabilités sont nulles sauf la certitude, qui vaut 1.

Choix d'une clique principale Comme vu dans la présentation, le coeur de la compilation repose dans l'absorption de l'information par une clique qui diffusera ensuite vers les cliques contenant les targets. Le choix de cette clique racine est important pour le temps de calcul du programme. Une première séléction se fait sur les cliques contenant une target, évitant ainsi au moins un parcours de diffusion dans l'arbre de jonction. Parmi les cliques candidates, celle ayant le maximum de voisins est choisie, optimisant la diffusion de l'information.

3.2.2 Création et Initialisation des potentiels

Dans la bibliothèque pyAGrum, conçue pour travailler avec réseaux bayésiens et arbres de jonctions, chaque clique est considéré comme un potentiel, initialisé avec la commande pyAgrum.potential() sur lequel peuvent s'appliquer les fonctions préconçues de multiplication, marginalisation etc de la bibliothèque pyAgrum. Ces structures n'existant pas dans les autres langages, il faudra initialiser les potentiels de cliques sous forme de tableaux de probabilités. C'est le but de la première partie du métacode de compilation, qui va parcourir l'arbre de jonction, sachant les évidences fournies et les targets demandés, et donnera au tableau d'instructions les variables à créer. Lors de la diffusion de l'information, comme vu dans l'exemple de la figure 4 un peu plus haut, il est nécessaire de collecter l'information, et donc les potentiels, des cliques environnantes afin de diffuser vers la clique suivante. Or, ces potentiels environnants seront modifiés lors du calcul, puisqu'ils diffusent eux aussi de l'information. Afin de garder une version inaltérée du tableau de probabilités d'une clique, nous créeons en plus des potentiels dits de diffusion, c'est ceux-ci qui seront modifiés.

3.2.3 Absorption et Diffusion de l'information

Le métacode commence par appeler la fonction parcours qui va parcourir en profondeur l'arbre de jonction et créer deux listes : une pour l'absorption, l'autre pour la diffusion. Cette fonction récurrente commence depuis la clique racine et retourne un booléen. Elle séléctionne d'abord ses voisins, et vérifie si ceux-ci contiennent une target pas encore rencontrée (une liste des targets est progressivement mise à jour). Si c'est le cas, un couple (clique, target) est enregistré pour signifier à la diffusion que cette clique contient ou mène vers une target. L'appel récursif permet donc d'obtenir une liste d'absorption qui signalera au métacode le chemin à suivre jusqu'à la clique racine, puis une liste de diffusion qui elle donne le chemin de la clique racine vers les cliques les plus proches contenant les targets.

Ci-dessous un exemple, avec un arbre de jonction où les cliques jaunes contiennent

une information/évidence, la clique rouge fait partie des cliques targets, avec la clique numéro 1, clique racine et donc contenant une target également.

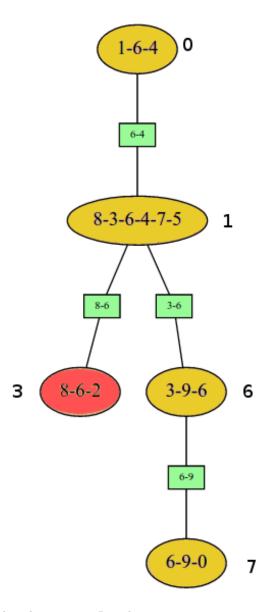


FIGURE 5 – Arbre de jonction. Les cliques en jaunes contiennent une évidence, la clique rouge et la clique 1 contiennent des targets.

Voici les listes d'absorption et diffusion renvoyés par l'algorithme parcours :

Une fois ces listes correctement définies, elles entrent en paramètres des fonctions suivantes du métacode, qui détermineront les opérations à effectuer pour

l'inférence, c'est à dire la transmission de l' information selon le chemin voulu. Un premier parcours de la liste d'absorption crée les potentiels de séparateurs pour l'envoi d'un message d'une clique à une autre. Comme vu dans la partie théorique plus haut, pour cette opération, nous devons marginaliser le potentiel séparateur selon la clique 'émettrice' puis multiplier le potentiel de la clique 'réceptrice' par ce potentiel séparateur marginalisé. La fonction sendMessAbsorb réalise toute ces opérations. Aprés l'ajout de la commande de création du potentiel séparateur au tableau d'instruction, la fonction détermine l'intersection des deux cliques concernées pour créer le potentiel du séparateur, avant d'ajouter les consignes de marginalisation et multiplication selon les bon potentiels de cliques. Les potentiels sont correctement récupérés par l'identifiant unique du tableau d'absorption. Illustrons à nouveau avec un exemple clair :

A ce stade de la compilation, le métacode parcourt la liste pour l'absorption

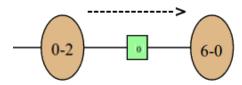


FIGURE 6 – Deux cliques et leurs variables, et un message à passer par le séparateur.

et arrive à cet étape, où l'information doit être transmise du potentiel Φ_{0-2} au potentiel Φ_{6-0} . Une consigne pour la création du potentiel séparateur est crée, $\Psi_{0-2>6-0}$, et les variables du séparateur y sont ajoutés : la variable 0 ici. Ensuite, on ajoute au tableau d'instructions les commandes de marginalisation selon la clique 2-0 : [MAR, $\Psi_{0-2>6-0}$, Φ_{0-2} , [0], [2,0]] et de multiplication de la clique 6-0 par le séparateur : [MUL, Φ_{6-0} , $\Psi_{0-2>6-0}$, [6,0], [0]]. Une première étape consiste à définir les potentiels - et donc futurs variables- à créer et comment les initialiser. Toutes ces instructions donnent un tableau utilisable par les modules de génération qui ont été implémentés par la suite. Leurs arguments permettent de récupérer des informations capitales lors de l'écriture des codes calculatoires et d'effectuer quelques opérations dans la phase suivante. Toutefois, à cet instant là de l'éxécution, la grande majorité des opérations ont été faites.