

# Contribution à la modélisation et l'inférence de réseaux de régulation de gènes

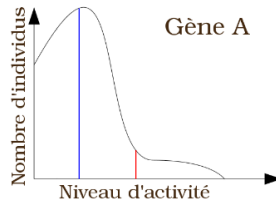
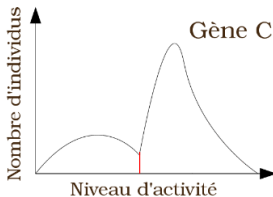
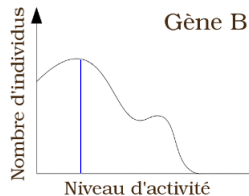
Magali Champion

*Sous la direction de Sébastien Gadat (IMT),  
Christine Cierco-Ayrolles et Matthieu Vignes (INRA)*



05 décembre 2014

# Motivation biologique



# Objectif :

Retrouver le graphe  $\mathcal{G}$  qui modélise les interactions entre les  $p$  gènes étudiés à partir de deux types de données prises sur un échantillon de taille  $n$  :

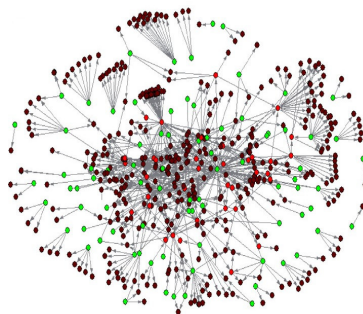
- des données continues

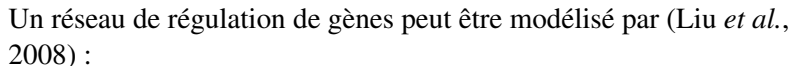
$$E^1, \dots, E^p,$$

- des données discrètes

$$M^1, \dots, M^p.$$

On appelle réseau de régulation de gènes un tel graphe.





---

## Cadre d'étude

---

Un réseau de régulation de gènes peut être modélisé par (Liu *et al.*, 2008) :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad E^j = \sum_{i=1}^p B_i^j E^i + \sum_{i=1}^p A_i^j M^i + \varepsilon^j.$$

Une méthode classique pour résoudre ce type de problèmes consiste à effectuer  $p$  régressions indépendantes à l'aide de méthodes pénalisées du type :

- Lasso (Tibshirani, 1996), ajout d'une pénalité en norme  $\ell_1$ ,
- Dantzig Selector (Candes *et al.*, 2007),

---

## Cadre d'étude

---

Un réseau de régulation de gènes peut être modélisé par (Liu *et al.*, 2008) :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad E^j = \sum_{i=1}^p B_i^j E^i + \sum_{i=1}^p A_i^j M^i + \varepsilon^j.$$

Une méthode classique pour résoudre ce type de problèmes consiste à effectuer  $p$  régressions indépendantes à l'aide de méthodes pénalisées du type :

- Lasso (Tibshirani, 1996), ajout d'une pénalité en norme  $\ell_1$ ,
- Dantzig Selector (Candes *et al.*, 2007),
- Autres formalismes :

Forêts aléatoires (Huynh *et al.*, 2010),

Réseaux bayésiens (Friedman *et al.*, 2000).

---

# Contributions

---

- 1 Algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting et leurs applications
  - Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches
  - Application des algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting à l'analyse de sensibilité pour l'estimation d'indices de Sobol
  
- 2 Apprentissage de liens causaux dans des graphes acycliques dirigés
  - Estimation de graphe par maximum de vraisemblance pénalisé
  - Inégalités en prédiction et en estimation
  - Implémentation d'un algorithme génétique hybride

- 1 Algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting et leurs applications
  - Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches
  - Application des algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting à l'analyse de sensibilité pour l'estimation d'indices de Sobol
- 2 Apprentissage de liens causaux dans des graphes acycliques dirigés
  - Estimation de graphe par maximum de vraisemblance pénalisé
  - Inégalités en prédiction et en estimation
  - Implémentation d'un algorithme génétique hybride



---

## Régressions parcimonieuses

---

On considère un échantillon d'apprentissage  $(X_k, Y_k)_{1 \leq k \leq n}$  constitué de  $n$  copies i.i.d. de  $(X, Y) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m$  avec :

$$Y = f(X) + \varepsilon,$$

où  $\varepsilon$  est une variable aléatoire centrée indépendante de  $X$  modélisant la présence de bruit, et  $f := (f^1, \dots, f^m)$  est inconnue.

## Régressions parcimonieuses

On considère un échantillon d'apprentissage  $(X_k, Y_k)_{1 \leq k \leq n}$  constitué de  $n$  copies i.i.d. de  $(X, Y) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m$  avec :

$$Y = f(X) + \varepsilon,$$

où  $\varepsilon$  est une variable aléatoire centrée indépendante de  $X$  modélisant la présence de bruit, et  $f := (f^1, \dots, f^m)$  est inconnue.

**Objectif :** estimer  $f$  à partir des données.

## Régressions parcimonieuses

On considère un échantillon d'apprentissage  $(X_k, Y_k)_{1 \leq k \leq n}$  constitué de  $n$  copies i.i.d. de  $(X, Y) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m$  avec :

$$Y = f(X) + \varepsilon,$$

où  $\varepsilon$  est une variable aléatoire centrée indépendante de  $X$  modélisant la présence de bruit, et  $f := (f^1, \dots, f^m)$  est inconnue.

**Hypothèse :** il existe un système de fonctions  $(g_j)_{1 \leq j \leq p}$  normées, noté  $\mathcal{D}$  et  $(a_{i,j})_j$ ,  $S^i$ -parcimonieuse de support  $\mathcal{S}^i$ , tels que :

$$\forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket, \quad f^i(X) = \sum_{j=1}^p a_{i,j} g_j(X^i).$$

**Objectif :** estimer  $f$  à partir des données.

## Régressions parcimonieuses

On considère un échantillon d'apprentissage  $(X_k, Y_k)_{1 \leq k \leq n}$  constitué de  $n$  copies i.i.d. de  $(X, Y) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m$  avec :

$$Y = f(X) + \varepsilon,$$

où  $\varepsilon$  est une variable aléatoire centrée indépendante de  $X$  modélisant la présence de bruit, et  $f := (f^1, \dots, f^m)$  est inconnue.

**Hypothèse :** il existe un système de fonctions  $(g_j)_{1 \leq j \leq p}$  normées, noté  $\mathcal{D}$  et  $(a_{i,j})_j$ ,  $S^i$ -parcimonieuse de support  $\mathcal{S}^i$ , tels que :

$$\forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket, \quad f^i(X) = \sum_{j=1}^p a_{i,j} g_j(X^i).$$

**Objectif :** estimer  $f$  à partir des données.

$$\forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket, \quad \hat{f}^i(X) = \sum_{j=1}^p \hat{a}_{i,j} g_j(X^i).$$

Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting ont pour but d'approcher la fonction  $f$  par une succession d'approximations locales. Notons :

- $\hat{G}_k(f)$  l'approximation de la fonction  $f$  à l'étape  $k$ ,
- $\hat{R}_k(f)$  le résidu courant observable :  $\hat{R}_k(f) := Y - \hat{G}_k(f)$ .

---

### Algorithme $\mathbb{L}_2$ -Boosting

---

**For**  $k = 1$  to  $k_{up}$  **do**

On choisit  $\varphi_k \in \mathcal{D}$  tel que

$$|\langle \hat{R}_{k-1}(f), \varphi_k \rangle_n| = \max_{1 \leq j \leq p_n} |\langle \hat{R}_{k-1}(f), g_j \rangle_n|,$$

On calcule la nouvelle approximation et le résidu associés à  $f$

$$\hat{G}_k(f) = \hat{G}_{k-1}(f) + \gamma \langle \hat{R}_{k-1}(f), \varphi_k \rangle_n \varphi_k.$$

**End**

## Extension au cas multi-tâches

Pour étendre l'algorithme, le point crucial est de choisir à la fois la coordonnée du résidu qui nécessite le plus d'amélioration, et l'élément du dictionnaire le plus pertinent  $\varphi_k \in \mathcal{D}$ .

- Sélection du prédicteur :

$$\sum_{j=1}^p \langle \hat{R}_{k-1}(f^{ik}), g_j \rangle_n^2 = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^p \langle \hat{R}_{k-1}(f^i), g_j \rangle_n^2,$$

- Sélection de l'élément du dictionnaire :

$$|\langle \hat{R}_{k-1}(f^{ik}), \varphi_k \rangle_n| = \max_{1 \leq j \leq p} |\langle \hat{R}_{k-1}(f^{ik}), g_j \rangle_n|,$$

- Calcul de l'approximation courante :

$$\hat{G}_k(f^{ik}) = \hat{G}_{k-1}(f^{ik}) + \gamma \langle \hat{R}_{k-1}(f^{ik}), \varphi_k \rangle_n \varphi_k.$$

## Résultats de consistance ( $m = 1$ )

- $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  :  $p_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(\exp(n^{1-\xi})), \text{ où } \xi \in (0, 1),$
- $\mathbf{H}_\varepsilon$  :  $\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} |\varepsilon^i|^t < \infty, \text{ pour un } t > \frac{4}{\xi}.$

### Théorème (Consistance, Bühlmann (2006))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  et  $\mathbf{H}_\varepsilon$ , il existe  $k_n := C \log(n)$  telle que si

$$S \sqrt{\frac{\log p}{n}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 :$$

$$\mathbb{E} \left\| f - \hat{G}_{k_n}(f) \right\|_n^2 \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}} 0.$$

## Résultats de consistance ( $m = 1$ )

- $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  :  $p_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(\exp(n^{1-\xi})), \text{ où } \xi \in (0, 1),$
- $\mathbf{H}_\varepsilon$  :  $\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} |\varepsilon^i|^t < \infty, \text{ pour un } t > \frac{4}{\xi}.$

### Théorème (Consistance, Bühlmann (2006))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  et  $\mathbf{H}_\varepsilon$ , il existe  $k_n := C \log(n)$  telle que si  $S \sqrt{\frac{\log p}{n}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  :

$$\mathbb{E} \left\| f - \hat{G}_{k_n}(f) \right\|_n^2 \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}} 0.$$



## Résultats de consistance

- $\mathbf{H}_{\text{dim}}^{\text{Mult}}$  :  $m_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(\exp(n^{1-\xi}))$ ,  $p_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(n^{\xi/4})$  où  $\xi \in (0, 1)$ ,
- $\mathbf{H}_{\varepsilon}^{\text{Mult}}$  :  $\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} |\varepsilon^i|^t < \infty$ ,  $t > \frac{4}{\xi}$ , et  $\forall i \neq j$ ,  $\text{Var}(\varepsilon^j) = \text{Var}(\varepsilon^i)$ ,
- $\mathbf{H}_{\text{RE}^{\pm}}$  : La plus petite et la plus grande valeur propre  $\lambda_{\min}$  et  $\lambda_{\max}$  de  ${}^t D_{S^i} D_{S^i}$  sont indépendantes de  $n$  telles que :

$$0 < \lambda_{\min} < \dots < \lambda_{\max} < \infty.$$

### Théorème (Consistance, Champion *et al.* (2014))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{dim}}^{\text{Mult}}$ ,  $\mathbf{H}_{\varepsilon}^{\text{Mult}}$  et  $\mathbf{H}_{\text{RE}^{\pm}}$ , il existe  $k_n := C \log(n)$  telle que si  $S^i \sqrt{\frac{\log p}{n}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  :

$$\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} \left\| f^i - \hat{G}_{k_n}(f^i) \right\|_n^2 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

## Résultats de consistance

- $\mathbf{H}_{\text{dim}}^{\text{Mult}}$  :  $m_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(\exp(n^{1-\xi}))$ ,  $p_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(n^{\xi/4})$  où  $\xi \in (0, 1)$ ,
- $\mathbf{H}_{\varepsilon}^{\text{Mult}}$  :  $\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} |\varepsilon^i|^t < \infty$ ,  $t > \frac{4}{\xi}$ , et  $\forall i \neq j$ ,  $\text{Var}(\varepsilon^j) = \text{Var}(\varepsilon^i)$ ,
- $\mathbf{H}_{\text{RE}^{\pm}}$  : La plus petite et la plus grande valeur propre  $\lambda_{\min}$  et  $\lambda_{\max}$  de  ${}^t D_{S^i} D_{S^i}$  sont indépendantes de  $n$  telles que :

$$0 < \lambda_{\min} < \dots < \lambda_{\max} < \infty.$$

### Théorème (Consistance, Champion *et al.* (2014))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{dim}}^{\text{Mult}}$ ,  $\mathbf{H}_{\varepsilon}^{\text{Mult}}$  et  $\mathbf{H}_{\text{RE}^{\pm}}$ , il existe  $k_n := C \log(n)$  telle que si  $S^i \sqrt{\frac{\log p}{n}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$  :

$$\sup_{1 \leq i \leq m_n} \mathbb{E} \left\| f^i - \hat{G}_{k_n}(f^i) \right\|_n^2 \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

## Recouvrement du support

Notons  $\mathcal{S}_k^i$  le support de  $\hat{G}_k(f^i)$  à l'étape  $k$ .

- $\mathbf{H}_S$  :  $\max_{j \notin \mathcal{S}^i} \|D_{\mathcal{S}^i}^+ g_j\|_1 < 1$ , où  $D^+$  est le pseudo-inverse de  $D$ ,
- $\mathbf{H}_{\text{SNR}}$  :  $\forall j \in \mathcal{S}^i, |a_{ij}| \geq \log(n)^{-\kappa}$ , avec  $\kappa > 0$ .

**Théorème (Recouvrement du support, Champion *et al.* (2014))**

*Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{dim}}$ ,  $\mathbf{H}_\varepsilon$ ,  $\mathbf{H}_{\text{RE}^\pm}$  et  $\mathbf{H}_S$ , avec grande probabilité :*

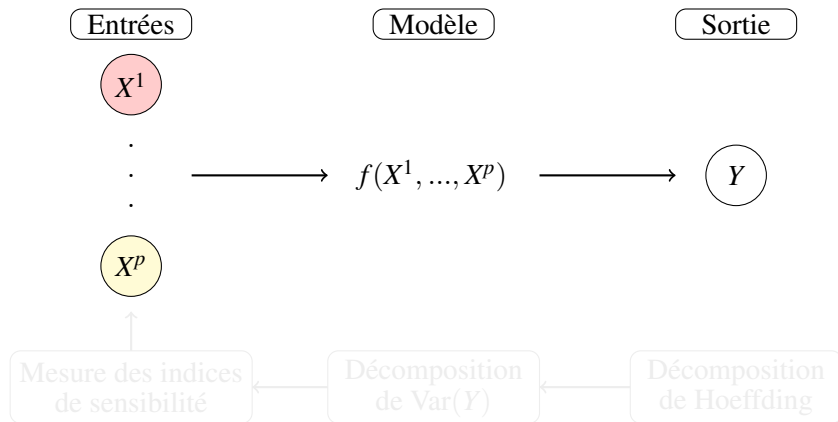
$$\forall k, \mathcal{S}_k^i \subset \mathcal{S}^i.$$

*De plus, si  $\mathbf{H}_{\text{SNR}}$  est satisfaite pour  $\kappa$  suffisamment petit, avec grande probabilité, à la fin des itérations du Boosting :*

$$\mathcal{S}_{k_n}^i = \mathcal{S}^i.$$

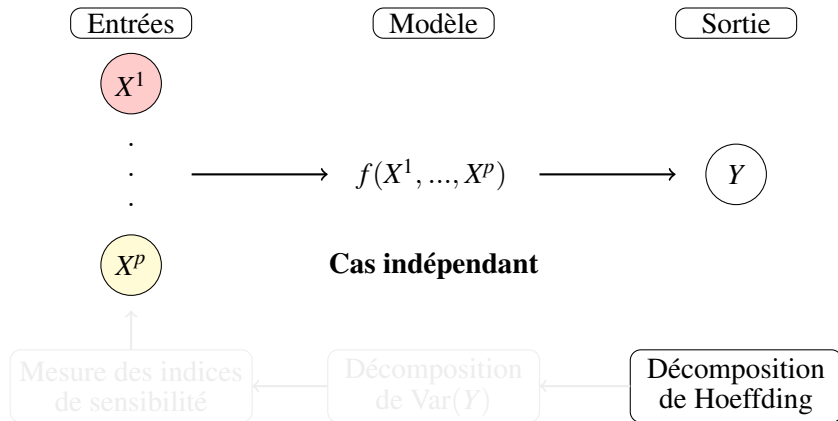
- 1 Algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting et leurs applications
  - Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches
  - Application des algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting à l'analyse de sensibilité pour l'estimation d'indices de Sobol
- 2 Apprentissage de liens causaux dans des graphes acycliques dirigés
  - Estimation de graphe par maximum de vraisemblance pénalisé
  - Inégalités en prédiction et en estimation
  - Implémentation d'un algorithme génétique hybride

# Analyse de sensibilité



**Objectif :** Mesurer la variabilité de la réponse en fonction des paramètres d'entrée.

# Analyse de sensibilité



$$f(X) = f_{\emptyset} + \sum_i f_i(X^i) + \sum_{1 \leq i < j \leq p} f_{ij}(X^i, X^j) + \dots + f_{1, \dots, p}(X) = \sum_{u \in S} f_u(X^u),$$

où  $(f_u)_{u \in S}$  est une famille orthogonale.

# Analyse de sensibilité

Entrées

Modèle

Sortie

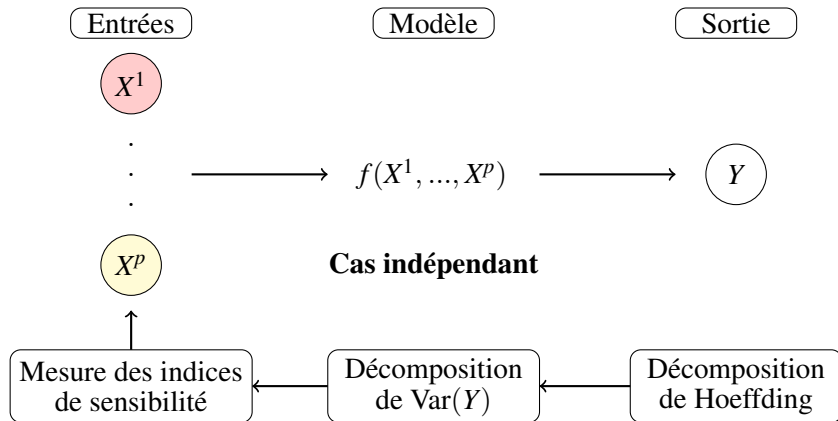
 $X^1$ 

⋮

 $X^p$ 
 $\longrightarrow f(X^1, \dots, X^p) \longrightarrow$ 
 $Y$ **Cas indépendant**Mesure des indices  
de sensibilitéDécomposition  
de  $\text{Var}(Y)$ Décomposition  
de Hoeffding

Alors :  $\text{Var}(Y) = \sum_{u \in S} \text{Var}(f_u(X^u))$ .

# Analyse de sensibilité



où l'indice de sensibilité d'ordre  $|u|$  est :  $S_u = \frac{\text{Var}(f_u(X^u))}{\text{Var}(Y)}$ .



# Décomposition de Hoeffding - cas dépendant

Chastaing *et. al* (2012)

$f$  se décompose de manière unique sous la forme d'une somme de fonctions orthogonalement hiérarchiques :

$$f(X) = \underbrace{f_{\emptyset}}_{\text{constant}} + \sum_i \underbrace{f_i(X^i)}_{\text{effets principaux}} + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \underbrace{f_{ij}(X^i, X^j)}_{\text{effets d'interaction}} + \dots + \underbrace{f_{1, \dots, p}(X)}_{\text{résidu}}$$

où  $(f_u)_u \in H_u$  est hiérarchiquement orthogonale.

## Exemple de décomposition orthogonale hiérarchique

$f_{ij}(X^i, X^j) \in H_{ij}$  vérifie  $\langle f_{ij}(X^i, X^j), f_j(X^j) \rangle = \langle f_{ij}(X^i, X^j), f_i(X^i) \rangle = 0$ .

# Procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt

Cette procédure consiste à construire une base de l'espace  $H_u$ . On considère uniquement les effets d'interactions d'ordre  $|u| \leq 2$ .

- 1 Initialisation : pour tout  $i$ , on considère une base  $(\phi_k^i)_{k=0}^L$  de  $L^2(X^i)$ . Alors :

$$H_i^L = \text{Vect}\{1, \phi_1^i, \dots, \phi_L^i\}.$$

- 2 Pour tout  $(i, j)$ , étant donnés  $H_i^L$  et  $H_j^L$ , on construit  $H_{ij}^L$  :  
 une combinaison linéaire des éléments de  $H_i^L \rightarrow \lambda_1$   
 + une combinaison linéaire des éléments de  $H_j^L \rightarrow \lambda_2$   
 +  $\phi^i(X^i) \times \phi^j(X^j)$

On vérifie que  $(\lambda_1, \lambda_2)$  satisfait les contraintes :

$$A^{ij} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = D^{ij}.$$

# Procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt

Cette procédure consiste à construire une base de l'espace  $H_u$ . On considère uniquement les effets d'interactions d'ordre  $|u| \leq 2$ .

- 1 Initialisation : pour tout  $i$ , on considère une base  $(\phi_k^i)_{k=0}^L$  de  $L^2(X^i)$ . Alors :

$$H_i^L = \text{Vect}\{1, \phi_1^i, \dots, \phi_L^i\}.$$

- 2 Pour tout  $(i, j)$ , étant donnés  $H_i^L$  et  $H_j^L$ , on construit  $H_{ij}^L$  :
  - une combinaison linéaire des éléments de  $H_i^L \rightarrow \lambda_1$
  - + une combinaison linéaire des éléments de  $H_j^L \rightarrow \lambda_2$
  - +  $\phi^i(X^i) \times \phi^j(X^j)$

On vérifie que  $(\lambda_1, \lambda_2)$  satisfait les contraintes :

$$A^{ij} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = D^{ij}.$$

## Comment estimer cette décomposition ?

$$\begin{aligned}
 f(X) = & \underbrace{f_{\emptyset}}_{\text{terme constant}} + \sum_i \underbrace{f_i(X^i)}_{\text{effets principaux}} \\
 & + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \underbrace{f_{ij}(X^i, X^j)}_{\text{effets d'interaction}} + \dots + \underbrace{f_{1,\dots,p}(X)}_{\text{résidu}},
 \end{aligned}$$

Deux problématiques distinctes :

- ① approximation des bases de  $H_u$ ,
- ② estimation parcimonieuse des coefficients dans cette base afin de sélectionner les interactions principales.

---

## Greedy Hierarchically Orthogonal Functional Decomposition

---

*Initialisation* : On coupe  $\mathcal{O}$  en deux  $\mathcal{O}_1 \cup \mathcal{O}_2$  de taille  $(n_1, n_2)$ .

**Step 1** :  $\forall u \in S$ , on utilise la procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt empirique avec  $\mathcal{O}_1$  pour construire une approximation de  $H_u^{L,0}$  :

$$\hat{H}_u^{L,0,n_1} := \text{Vect}\{\hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u\}.$$

**Step 2** : On utilise du  $\mathbb{L}_2$ -Boosting avec  $\mathcal{O}_2$  sur le dictionnaire appris  $\mathcal{D} = \{\hat{\phi}_{1,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u, \dots\}$  pour obtenir une décomposition parcimonieuse.

---

## Greedy Hierarchically Orthogonal Functional Decomposition

---

*Initialisation* : On coupe  $\mathcal{O}$  en deux  $\mathcal{O}_1 \cup \mathcal{O}_2$  de taille  $(n_1, n_2)$ .

**Step 1** :  $\forall u \in S$ , on utilise la procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt empirique avec  $\mathcal{O}_1$  pour construire une approximation de  $H_u^{L,0}$  :

$$\hat{H}_u^{L,0,n_1} := \text{Vect}\{\hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u\}.$$

**Step 2** : On utilise du  $\mathbb{L}_2$ -Boosting avec  $\mathcal{O}_2$  sur le dictionnaire appris  $\mathcal{D} = \{\hat{\phi}_{1,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u, \dots\}$  pour obtenir une décomposition parcimonieuse.

$$f(X) = \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \beta_{l_u}^u \phi_{l_u}^u(X^u) \simeq \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \beta_{l_u}^u \hat{\phi}_{l_u,n_1}^u(X^u).$$

---

## Greedy Hierarchically Orthogonal Functional Decomposition

---

*Initialisation* : On coupe  $\mathcal{O}$  en deux  $\mathcal{O}_1 \cup \mathcal{O}_2$  de taille  $(n_1, n_2)$ .

**Step 1** :  $\forall u \in S$ , on utilise la procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt empirique avec  $\mathcal{O}_1$  pour construire une approximation de  $H_u^{L,0}$  :

$$\hat{H}_u^{L,0,n_1} := \text{Vect}\{\hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u\}.$$

**Step 2** : On utilise du  $\mathbb{L}_2$ -Boosting avec  $\mathcal{O}_2$  sur le dictionnaire appris  $\mathcal{D} = \{\hat{\phi}_{1,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u, \dots\}$  pour obtenir une décomposition parcimonieuse.

$$f(X) = \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \beta_{l_u}^u \phi_{l_u}^u(X^u) \simeq \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \beta_{l_u}^u \hat{\phi}_{l_u,n_1}^u(X^u).$$

---

## Greedy Hierarchically Orthogonal Functional Decomposition

---

*Initialisation* : On coupe  $\mathcal{O}$  en deux  $\mathcal{O}_1 \cup \mathcal{O}_2$  de taille  $(n_1, n_2)$ .

**Step 1** :  $\forall u \in S$ , on utilise la procédure d'orthogonalisation hiérarchique de Gram-Schmidt empirique avec  $\mathcal{O}_1$  pour construire une approximation de  $H_u^{L,0}$  :

$$\hat{H}_u^{L,0,n_1} := \text{Vect}\{\hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u\}.$$

**Step 2** : On utilise du  $\mathbb{L}_2$ -Boosting avec  $\mathcal{O}_2$  sur le dictionnaire appris  $\mathcal{D} = \{\hat{\phi}_{1,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^1, \dots, \hat{\phi}_{1,n_1}^u, \dots, \hat{\phi}_{L,n_1}^u, \dots\}$  pour obtenir une décomposition parcimonieuse.

$$f(X) = \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \beta_{l_u}^u \phi_{l_u}^u(X^u) \simeq \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \hat{\beta}_{l_u}^u \hat{\phi}_{l_u,n_1}^u(X^u).$$



## Convergence de la base approchée

- $\mathbf{H}_b^1$  :  $\sup_{i \in \llbracket 1, p \rrbracket} \|\phi^i(X_i)\|_\infty < +\infty$ ,
- $\mathbf{H}_b^2$  :  $p_n = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(\exp(n^{1-\xi}))$ , avec  $0 < \xi \leq 1$ ,
- $\mathbf{H}_b^3$  : La matrice de Gram  $A$  du système linéaire satisfait :

$$\exists C > 0, \quad \forall (i, j) \in \llbracket 1, p_n \rrbracket^2, \quad \det(A^{ij}) \geq Cn^{-\vartheta}.$$

### Théorème (Champion *et al.* (2014))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_b^{1-3}$ , si  $\vartheta < \xi/2$ , la suite  $(\hat{\phi}^u)_u$  vérifie :

$$\sup_u \|\hat{\phi}^u - \phi^u\| = \mathcal{O}_P(n^{\vartheta-\xi/2}).$$

## Consistance de l'algorithme

- $\mathbf{H}_\varepsilon : \mathbb{E} |\varepsilon|^t < \infty$ , pour un certain  $t > 4/\xi$ ,

Notons •  $S := \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \mathbb{1}_{\beta_{l_u}^u \neq 0}$  la parcimonie de  $f$ ,

- $\hat{f}(X) = \sum_{\substack{u \in S^* \\ |u| \leq d}} \sum_{l_u} \hat{\beta}_{l_u}^u \hat{\phi}_{l_u, n_1}^u.$

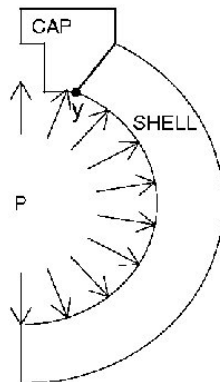
### Théorème (Consistance, Champion *et al.* (2014))

Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_b^{1-3}$  et  $\mathbf{H}_\varepsilon$ , si  $\vartheta < \xi/2$ , il existe  $k_n := C \log n$  telle que, si  $S \sqrt{\frac{\log p}{n}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0$  :

$$\left\| \hat{f} - f \right\| \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}} 0.$$

# Applications numériques

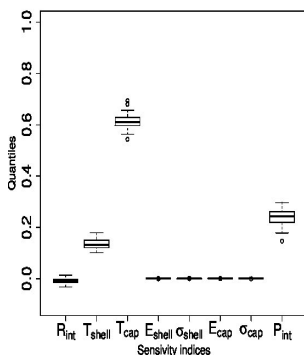
## Variables dépendantes



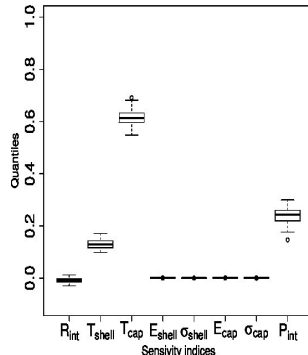
Le critère de von Mises (ou critère énergétique de distorsion élastique) est à expliquer en fonction des variables suivantes :

- le rayon interne de la paroi  $R_{int}$ ,
- l'épaisseur de la paroi  $T_{shell}$ ,
- l'épaisseur du bouchon  $T_{cap}$ ,
- la pression interne  $P_{int}$ ,
- le module de Young  $E_{shell}$ ,  $E_{cap}$ ,
- la limite d'élasticité  $\sigma_{shell}$  et  $\sigma_{cap}$ .

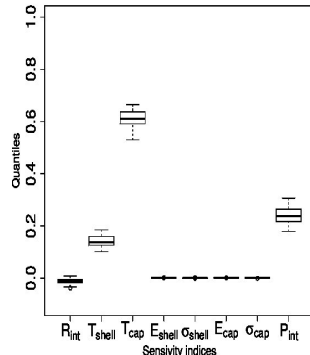
# Résultats numériques



(a) FoBa



(b) Boosting



(c) Lasso

Méthodes	$\ \hat{\beta}\ _0$	Temps de calcul (en s)
$\mathbb{L}_2$ -Boosting	10	0.0266
FoBa	22	0.3741
Lasso	23	0.15

- 1 Algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting et leurs applications
  - Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches
  - Application des algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting à l'analyse de sensibilité pour l'estimation d'indices de Sobol
- 2 Apprentissage de liens causaux dans des graphes acycliques dirigés
  - Estimation de graphe par maximum de vraisemblance pénalisé
  - Inégalités en prédiction et en estimation
  - Implémentation d'un algorithme génétique hybride

- 1 Algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting et leurs applications
  - Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches
  - Application des algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting à l'analyse de sensibilité pour l'estimation d'indices de Sobol
- 2 Apprentissage de liens causaux dans des graphes acycliques dirigés
  - Estimation de graphe par maximum de vraisemblance pénalisé
  - Inégalités en prédiction et en estimation
  - Implémentation d'un algorithme génétique hybride

## Modèle et hypothèses

On s'intéresse au modèle suivant :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad X^j = \sum_{i=1, i \neq j}^p (G_0)_i^j X^i + \varepsilon^j,$$

où  $\varepsilon^j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_j^2)$  et  $(G_0)_i^j \neq 0$  représente l'effet du nœud (gène)  $X^j$  vers le nœud  $X^i$ , sous les hypothèses suivantes :

- ❶ le graphe  $\mathcal{G}_0$  associé à la matrice  $G_0$  est un *Graphe Acyclique Dirigé* (DAG),

## Modèle et hypothèses

On s'intéresse au modèle suivant :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad X^j = \sum_{i=1, i \neq j}^p (G_0)_i^j X^i + \varepsilon^j,$$

où  $\varepsilon^j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_j^2)$  et  $(G_0)_i^j \neq 0$  représente l'effet du nœud (gène)  $X^j$  vers le nœud  $X^i$ , sous les hypothèses suivantes :

- 1 le graphe  $\mathcal{G}_0$  associé à la matrice  $G_0$  est un *Graphe Acyclique Dirigé* (DAG),
- 2 les variables aléatoires  $(X^i)_{1 \leq i \leq p}$  suivent une loi normale,



## Modèle et hypothèses

On s'intéresse au modèle suivant :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad X^j = \sum_{i=1, i \neq j}^p (G_0)_i^j X^i + \varepsilon^j,$$

où  $\varepsilon^j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_j^2)$  et  $(G_0)_i^j \neq 0$  représente l'effet du nœud (gène)  $X^j$  vers le nœud  $X^i$ , sous les hypothèses suivantes :

- 1 le graphe  $\mathcal{G}_0$  associé à la matrice  $G_0$  est un *Graphe Acyclique Dirigé* (DAG),
- 2 les variables aléatoires  $(X^i)_{1 \leq i \leq p}$  suivent une loi normale,
- 3 les variances du bruit sont indépendantes du nœud choisi :  $\sigma_j^2 = \sigma_{j'}^2$  pour tout  $j \neq j'$  (on les supposera égales à 1).

## Modèle et hypothèses

On s'intéresse au modèle suivant :

$$\forall j \in \llbracket 1, p \rrbracket, \quad X^j = \sum_{i=1, i \neq j}^p (G_0)_i^j X^i + \varepsilon^j,$$

où  $\varepsilon^j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_j^2)$  et  $(G_0)_i^j \neq 0$  représente l'effet du nœud (gène)  $X^j$  vers le nœud  $X^i$ , sous les hypothèses suivantes :

- ❶ le graphe  $\mathcal{G}_0$  associé à la matrice  $G_0$  est un *Graphe Acyclique Dirigé* (DAG),
- ❷ les variables aléatoires  $(X^i)_{1 \leq i \leq p}$  suivent une loi normale,
- ❸ les variances du bruit sont indépendantes du nœud choisi :  $\sigma_j^2 = \sigma_{j'}^2$  pour tout  $j \neq j'$  (on les supposera égales à 1).

→ permet de montrer l'**identifiabilité** du modèle (Peters, 2014)

## Estimateur du maximum de vraisemblance

- On suppose que l'on observe un échantillon  $(X_i^1, \dots, X_i^p)_{1 \leq i \leq n}$  i.i.d. de taille  $n$  du modèle précédent, réécrit sous la forme matricielle simplifiée :  $X = XG_0 + \varepsilon$ .
- Pour reconstruire le vrai réseau, une méthode classique en statistiques consiste à trouver l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{G} = \operatorname{argmin}_{G \in \mathcal{G}_{DAG}} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \left( (X - XG)_i^j \right)^2 \right\}$$

où  $\mathcal{G}_{DAG}$  désigne l'ensemble des graphes acycliques dirigés.

## Estimateur du maximum de vraisemblance

- On suppose que l'on observe un échantillon  $(X_i^1, \dots, X_i^p)_{1 \leq i \leq n}$  i.i.d. de taille  $n$  du modèle précédent, réécrit sous la forme matricielle simplifiée :  $X = XG_0 + \varepsilon$ .
- Pour reconstruire le vrai réseau, une méthode classique en statistiques consiste à trouver l'estimateur du maximum de vraisemblance **pénalisée** :

$$\hat{G} = \operatorname{argmin}_{G \in \mathcal{G}_{DAG}} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \left( (X - XG)_i^j \right)^2 + \lambda \mathbf{pen}(G) \right\}$$

où  $\mathcal{G}_{DAG}$  désigne l'ensemble des graphes acycliques dirigés.

## Estimateur du maximum de vraisemblance

- On suppose que l'on observe un échantillon  $(X_i^1, \dots, X_i^p)_{1 \leq i \leq n}$  i.i.d. de taille  $n$  du modèle précédent, réécrit sous la forme matricielle simplifiée :  $X = XG_0 + \varepsilon$ .
- Pour reconstruire le vrai réseau, une méthode classique en statistiques consiste à trouver l'estimateur du maximum de vraisemblance **pénalisée** :

$$\hat{G} = \operatorname{argmin}_{G \in \mathcal{G}_{DAG}} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \left( (X - XG)_i^j \right)^2 + \lambda \|G\|_1 \right\},$$

où  $\mathcal{G}_{DAG}$  désigne l'ensemble des graphes acycliques dirigés et

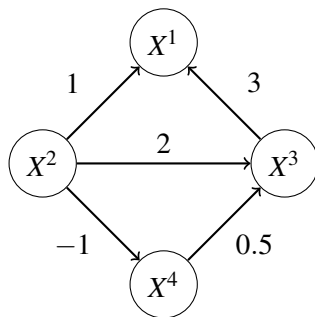
$$\|G\|_1 = \sum_{i,j} |G_i^j|$$

## Décomposition d'un DAG

Une matrice  $G$  est compatible avec un DAG  $\mathcal{G}$  ssi :

$$G = PT^tP,$$

où  $P$  et  $T$  sont respectivement une matrice de permutation et une matrice triangulaire inférieure stricte.



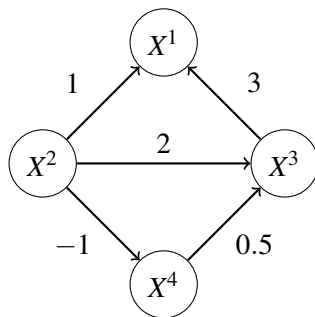
$$G = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & -1 \\ 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0 \end{pmatrix}$$

## Décomposition d'un DAG

Une matrice  $G$  est compatible avec un DAG  $\mathcal{G}$  ssi :

$$G = PT^tP,$$

où  $P$  et  $T$  sont respectivement une matrice de permutation et une matrice triangulaire inférieure stricte.



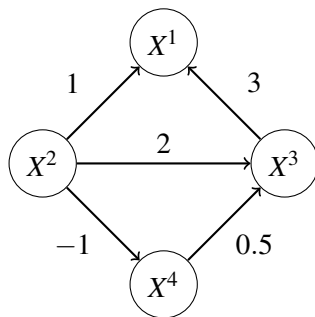
$$T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

## Décomposition d'un DAG

Une matrice  $G$  est compatible avec un DAG  $\mathcal{G}$  ssi :

$$G = PT^tP,$$

où  $P$  et  $T$  sont respectivement une matrice de permutation et une matrice triangulaire inférieure stricte.



$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

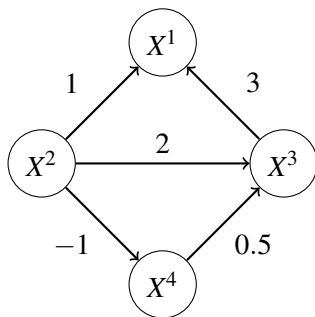


## Décomposition d'un DAG

Une matrice  $G$  est compatible avec un DAG  $\mathcal{G}$  ssi :

$$G = PT^tP,$$

où  $P$  et  $T$  sont respectivement une matrice de permutation et une matrice triangulaire inférieure stricte.



$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\rightarrow \sigma = (1 \ 3 \ 4 \ 2) \in \mathfrak{S}_p$   
 permutation qui ordonne les  
 noeuds du graphe.

## Décomposition d'un DAG

Une matrice  $G$  est compatible avec un DAG  $\mathcal{G}$  ssi :

$$G = PT^tP,$$

où  $P$  et  $T$  sont respectivement une matrice de permutation et une matrice triangulaire inférieure stricte.

On se ramène au problème de minimisation suivant :

$$(\hat{P}, \hat{T}) = \underset{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{n} \|X - XPT^tP\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\},$$

où  $\|X\|_F^2 = \sum_{i,j=1}^p (X_{ij})^2$ .

## D'un point de vue théorique

Considérons  $\hat{G}(\lambda) = \hat{P}\hat{T}^t\hat{P}$ , où

$$(\hat{P}, \hat{T}) = \underset{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{1}{n} \|X - XPT^tP\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

Notons  $\Pi_0$  l'ensemble des permutations telles que :

$$\Pi_0 = \{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), {}^tPG_0P \text{ est triangulaire inférieure stricte}\}.$$

Deux objectifs :

- Est-ce que  $\hat{P}$  appartient à  $\Pi_0$  ?
- Obtention d'inégalités comparant  $\hat{G}(\lambda)$  avec  $G_0$  ?

## Hypothèses sur le modèle

**H<sub>cov</sub>**  $\max_{1 \leq j \leq p} \text{Var}(X^j) \leq \sigma_0^2$ , où  $\sigma_0^2$  est indépendant de  $p, n$ .

**H<sub>RE(S)</sub>** Pour  $s \in \llbracket 1, p^2 \rrbracket$ ,

$$\kappa(s) := \min_{\mathcal{S} \subset \llbracket 1, p \rrbracket^2, |\mathcal{S}| \leq s} \min_{\|M_{\mathcal{S}C}\|_1 \leq 3\|M_{\mathcal{S}}\|_1} \frac{\|XM\|_F}{\sqrt{n} \|M_{\mathcal{S}}\|_F} > 0.$$

**H<sub>S</sub>** Le nombre maximal de parents  $s_{\max}$  d'un nœud du graphe satisfait :

$$s_{\max} \leq C \sqrt{\frac{n}{\log p}} p^{-3/2}.$$

# Hypothèses sur le modèle

**H<sub>cov</sub>**  $\max_{1 \leq j \leq p} \text{Var}(X^j) \leq \sigma_0^2$ , où  $\sigma_0^2$  est indépendant de  $p, n$ .

**H<sub>RE</sub>(s)** Pour  $s \in \llbracket 1, p^2 \rrbracket$ ,

$$\kappa(s) := \min_{\mathcal{S} \subset \llbracket 1, p \rrbracket^2, |\mathcal{S}| \leq s} \min_{\|M_{\mathcal{S}^C}\|_1 \leq 3\|M_{\mathcal{S}}\|_1} \frac{\|XM\|_F}{\sqrt{n} \|M_{\mathcal{S}}\|_F} > 0.$$

**H<sub>s</sub>** Le nombre maximal de parents  $s_{\max}$  d'un nœud du graphe satisfait :

$$s_{\max} \leq C \sqrt{\frac{n}{\log p}} p^{-3/2}.$$

**H<sub>dim</sub>**  $p^3 \log p = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(n).$

## Hypothèses sur le modèle

**H<sub>cov</sub>**  $\max_{1 \leq j \leq p} \text{Var}(X^j) \leq \sigma_0^2$ , où  $\sigma_0^2$  est indépendant de  $p, n$ .

**H<sub>RE</sub>(s)** Pour  $s \in \llbracket 1, p^2 \rrbracket$ ,

$$\kappa(s) := \min_{\mathcal{S} \subset \llbracket 1, p \rrbracket^2, |\mathcal{S}| \leq s} \min_{\|M_{\mathcal{S}C}\|_1 \leq 3\|M_{\mathcal{S}}\|_1} \frac{\|XM\|_F}{\sqrt{n} \|M_{\mathcal{S}}\|_F} > 0.$$

**H<sub>s</sub>** Le nombre maximal de parents  $s_{\max}$  d'un nœud du graphe satisfait :

$$s_{\max} \leq C \sqrt{\frac{n}{\log p}} p^{-3/2} \leq \mathbf{C}.$$

**H<sub>dim</sub>**  $p^3 \log p = \mathcal{O}_{n \rightarrow +\infty}(n).$

## D'un point de vue théorique

Considérons  $\hat{G}(\lambda)$  avec  $\lambda = 2C\sqrt{\frac{\log p}{n}s_{max}}$ . Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{cov}}$ ,  $\mathbf{H}_{\mathbf{S}}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  et une condition d'identifiabilité\*, avec probabilité au moins  $1 - 5/p$  :

$$\hat{P} \in \Pi_0.$$

\* *Hypothèse permettant de s'assurer qu'on apprend correctement l'ordre des variables.*

## D'un point de vue théorique

Considérons  $\hat{G}(\lambda)$  avec  $\lambda = 2C\sqrt{\frac{\log p}{n}s_{\max}}$ . Sous les hypothèses  $\mathbf{H}_{\text{cov}}$ ,  $\mathbf{H}_{\mathbf{S}}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{dim}}$  et une condition d'identifiabilité\*, avec probabilité au moins  $1 - 5/p$  :

$$\hat{P} \in \Pi_0.$$

### Théorème (Inégalités en prédiction et estimation)

De plus, si on suppose que l'hypothèse  $\mathbf{H}_{\text{RE}}(\mathbf{s})$  est satisfaite pour un certain  $1 \leq s \leq p^2$ , alors, avec probabilité au moins  $1 - 5/p$  :

$$\frac{1}{n} \left\| X\hat{G} - XG_0 \right\|_F^2 \leq \frac{16C^2 s_{\max}^2 \log p}{n\kappa^2(s)},$$

$$\left\| \hat{G} - G_0 \right\|_1 \leq \frac{16C}{\kappa^2(s)} \sqrt{\frac{\log p}{n}} s_{\max}^{3/2}.$$

\* *Hypothèse permettant de s'assurer qu'on apprend correctement l'ordre des variables.*



## Procédure d'optimisation

$$(\hat{P}, \hat{T}) = \operatorname{argmin}_{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \|X - XPT^tP\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

- ❶ Si on connaît  $\hat{P} \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R})$ , le problème devient convexe et on peut trouver  $\hat{T} \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})$  solution de :

$$\hat{T} = \operatorname{argmin}_{T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \|X - X\hat{P}T^t\hat{P}\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

## Procédure d'optimisation

$$(\hat{P}, \hat{T}) = \operatorname{argmin}_{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \|X - XPT^tP\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

- ❶ Si on connaît  $\hat{P} \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R})$ , le problème devient convexe et on peut trouver  $\hat{T} \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})$  solution de :

$$\hat{T} = \operatorname{argmin}_{T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \left\| X - X\hat{P}T^t\hat{P} \right\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

- ❷ L'exploration de l'ensemble des permutations est difficile étant données sa taille et sa structure (ensemble discret et non convexe).

## Procédure d'optimisation

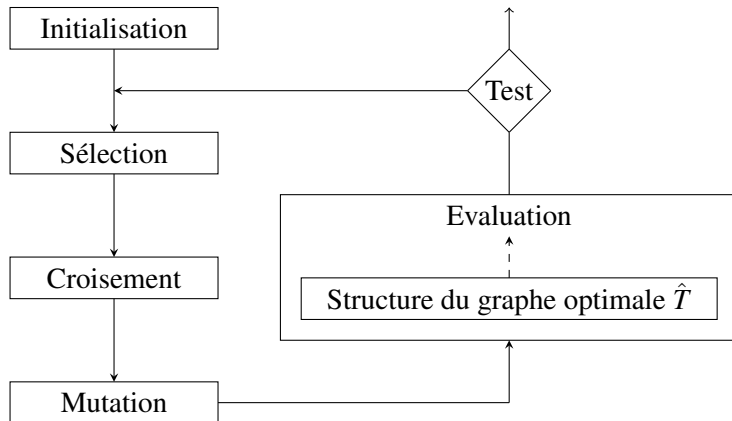
$$(\hat{P}, \hat{T}) = \operatorname{argmin}_{P \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R}), T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \|X - XPT^tP\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

- ❶ Si on connaît  $\hat{P} \in \mathbb{P}_p(\mathbb{R})$ , le problème devient convexe et on peut trouver  $\hat{T} \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})$  solution de :

$$\hat{T} = \operatorname{argmin}_{T \in \mathbb{T}_p(\mathbb{R})} \left\{ \frac{1}{n} \|X - X\hat{P}T^t\hat{P}\|_F^2 + \lambda \|T\|_1 \right\}.$$

- ❷ L'exploration de l'ensemble des permutations est difficile étant données sa taille et sa structure (ensemble discret et non convexe).
- Mise en place d'un algorithme génétique hybride.

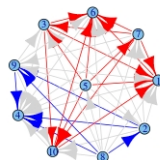
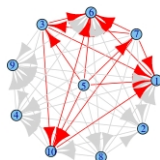
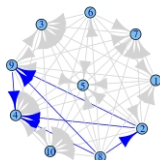
# Algorithme génétique hybride



# Opérateur de croisement

$$\begin{array}{cccccccccc}
 & 4 & 3 & 10 & 7 & 5 & 9 & 1 & 2 & 6 & 8 \\
 + & 6 & 1 & \cancel{9} & \cancel{4} & 10 & \cancel{2} & \cancel{8} & 3 & 7 & 5 \\
 = & 4 & * & * & * & * & 9 & * & 2 & * & 8
 \end{array}$$

Arrows indicating cross-operations: 6 → \*, 1 → \*, 4 → \*, 10 → \*, 2 → \*, 8 → \*, 3 → \*, 7 → \*, 5 → \*

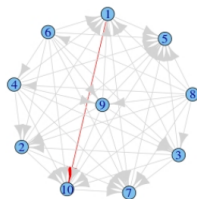
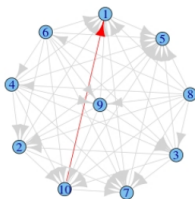


## Opérateur de mutation

5    7    1    10    2    3    9    4    6    8



5    7    10    1    2    3    9    4    6    8



## Résultats numériques I

Pour une valeur de paramètre de pénalisation  $\lambda$  donnée, on compare les arêtes apprises avec les arêtes du vrai réseau afin de calculer

- la sensibilité (ou rappel), mesurant le ratio entre arêtes correctement prédites et arêtes à prédire,

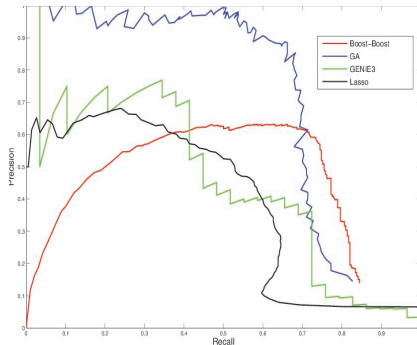
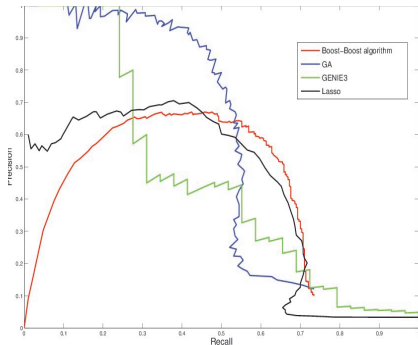
$$\text{sensibilité} = \frac{\text{Vrais Positifs}}{\text{Vrais Positifs} + \text{Faux Négatifs}}.$$

- la précision, mesurant le ratio entre arêtes correctement prédites et arêtes prédites,

$$\text{précision} = \frac{\text{Vrais Positifs}}{\text{Vrais Positifs} + \text{Faux Positifs}},$$

ce qui permet de tracer des courbes précision-rappel en faisant varier le paramètre  $\lambda$ .

## Résultats numériques I



*Courbes précision-rappel pour deux réseaux en “étoile” de taille 30*

algorithme génétique (en bleu)

forêts aléatoires (en vert)

algorithme de Boosting

multi-tâches (en rouge)

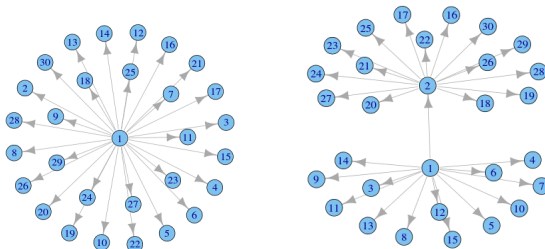
Lasso (en noir).



## Résultats numériques II

Méthode	algo génétique	Boosting	Forêts aléatoires	Lasso
N1	<b>0.5223</b>	0.3947	0.4212	0.4312
N2	<b>0.6919</b>	0.4315	0.4136	0.3920
N3	0.3557	0.3596	0.2718	<b>0.4112</b>
N4	<b>0.4171</b>	0.2332	0.2887	0.3349

**TABLE:** Aire sous la courbe précision-recall pour l'ensemble des réseaux et l'état de l'art.



# Synthèse des travaux

---

- Mise en place d'un algorithme pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches.

# Synthèse des travaux

---

- Mise en place d'un algorithme pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches.
- Adaptation de l'algorithme de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour l'estimation d'indices de sensibilité dans le cas de variables dépendantes.

# Synthèse des travaux

---

- Mise en place d'un algorithme pour la résolution de régressions parcimonieuses multi-tâches.
- Adaptation de l'algorithme de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting pour l'estimation d'indices de sensibilité dans le cas de variables dépendantes.
- Apprentissage de relations causales au sein du graphe : adaptation des résultats théoriques obtenus par van de Geer *et al.* (2013) pour une pénalité en norme  $\ell_0$  et implémentation d'un algorithme génétique hybride.

---

## Conclusion

---

- Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting constituent des méthodes de régression performantes :
  - Pas d'hypothèse nécessaire sur la structure de corrélation du design (cas  $m = 1$ ),
  - temps de calcul inférieurs à ceux des méthodes de l'état de l'art,
  - adaptation au cas multi-tâches pour améliorer l'apprentissage de réseaux,
  - particulièrement adapté à l'analyse de sensibilité.

---

## Conclusion

---

- Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting constituent des méthodes de régression performantes :
  - Pas d'hypothèse nécessaire sur la structure de corrélation du design (cas  $m = 1$ ),
  - temps de calcul inférieurs à ceux des méthodes de l'état de l'art,
  - adaptation au cas multi-tâches pour améliorer l'apprentissage de réseaux,
  - particulièrement adapté à l'analyse de sensibilité.
- Amélioration de l'apprentissage de réseaux en s'intéressant aux relations causales entre les nœuds du réseau
  - gérer les problèmes d'identifiabilité (restriction au cas où les variances du bruit sont égales),
  - exploration de l'ensemble des DAGs par un algorithme génétique hybride.

---

## Perspectives

- Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting :
  - Affaiblir les hypothèses  $\mathbf{H}_{\mathbf{RE}^\pm}$  en autorisant  $\lambda_{max,min}$  à croître avec  $n$ ,
  - Affaiblir l'hypothèse  $\mathbf{H}_{\mathbf{b}}^1$  en considérant des bases de fonctions plus grandes.

---

## Perspectives

- Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting :
  - Affaiblir les hypothèses  $\mathbf{H}_{\mathbf{R}^{\pm}}$  en autorisant  $\lambda_{max,min}$  à croître avec  $n$ ,
  - Affaiblir l'hypothèse  $\mathbf{H}_{\mathbf{b}}^1$  en considérant des bases de fonctions plus grandes.
- L'algorithme génétique hybride :
  - Le tester sur des jeux de données réels, ou de plus grande dimension,
  - Faire un package R,
  - Montrer des résultats de convergence de l'algorithme génétique.



---

## Perspectives

- Les algorithmes de  $\mathbb{L}_2$ -Boosting :
  - Affaiblir les hypothèses  $\mathbf{H}_{\mathbf{RE}^\pm}$  en autorisant  $\lambda_{max,min}$  à croître avec  $n$ ,
  - Affaiblir l'hypothèse  $\mathbf{H}_b^1$  en considérant des bases de fonctions plus grandes.
- L'algorithme génétique hybride :
  - Le tester sur des jeux de données réels, ou de plus grande dimension,
  - Faire un package R,
  - Montrer des résultats de convergence de l'algorithme génétique.
- Gérer les problèmes d'identifiabilité du modèle en considérant des données d'intervention pour orienter les arêtes du graphe apprises sans hypothèses supplémentaires sur les variances du bruit.

# Merci pour votre attention !



E. Candes, T. Tao. The Dantzig selector : statistical estimation when  $p$  is much larger than  $n$ . The Annals of Statistics, 35(6) : 2313-2351, 2007.



M. Champion, C. Cierco-Ayrolles, S. Gadat, M. Vignes. Sparse regression and support recovery with  $\mathbb{L}_2$ -Boosting algorithms. JSPI, 2014, à paraître.



M. Champion, G. Chastaing, S. Gadat, C. Prieur.  $\mathbb{L}_2$ -Boosting for sensitivity analysis with dependent inputs. Statistica Sinica, 2014, à paraître.



G. Chastaing, F. Gamboa, C. Prieur. Generalized Hoeffding-Sobol decomposition for dependent variables. Electronic Journal of Statistics, 6 :2420-2448, 2012.



V. A. Huynh-Thu, A. Irrthum, L. Wehenkel, P. Geurts. Inferring regulatory networks from expression data using tree-based methods. PLoS ONE, 5(9) : e12776, 2010.



B. Liu, A. de la Fuente, I. Hoeschele. Gene network inference via structural equation modeling in genetical genomics experiments. Genetics, 178 : 1763–1776, 2008.



J. Peters, P. Bühlmann. Identifiability of Gaussian structural equation models with equal error variances. Biometrika, 101 :219-228, 2014.



R. Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the lasso. Journal of the Royal Statistical Society, 58(1) : 267-288, 1996.



S. van de Geer, P. Bühlmann.  $\ell_0$ -penalized maximum likelihood for sparse directed acyclic graphs. The Annals of Statistics, 41(2) : 536-567.