Comparaison de structures de réseaux. Applications à des réseaux écologiques

Audition de candidature de thèse à l'EDMH

Louis Lacoste

23 mai 2024

1. Parcours

2. Axes de recherche
   - Axe 1 : Modèles à variables latentes pour une collection de réseaux bipartites
   - Axe 2 : Embedding de nœuds par apprentissage profond pour comparaison des topologies de réseaux
   - Axe 3 : Inférence jointe de réseaux

3. Organisation de la thèse

Parcours

Formations

- 2023–2024, M2 Mathématiques pour les Sciences du Vivant, Université Paris-Saclay
  UC à choix 2nd semestre : modèles à variables latentes, statistiques spatiales et méthodes de stats en grande dimensions
- 2022–2023, Année de césure
- 2020–2022, 1ère et 2ème année en formation Ingénieur AgroParisTech
  Cours optionnels suivis : statistiques spatiales, mathématiques pour la santé, ingénierie par la simulation informatique ...
- 2018–2020, Classe Préparatoire BCPST

Expériences professionnelles

- 2024 Avril–Sept., Détection de structures et clustering de réseaux écologiques. Stage dans l'UMR MIA Paris-Saclay, supervisé par Pierre Barbillon.
- 2023 Janv.–Juillet, Détection de structures dans des collections de réseaux bipartites et écriture du package implémentant la méthode. Stage dans l'UMR MIA Paris-Saclay, supervisé par Pierre Barbillon.
- 2022 Mai–Déc., Stage assistant ingénieur en Qualité chez Eurofins Food France

Axes de recherche

Contexte écologique

- De nombreux réseaux disponibles (« Web of Life : Ecological Networks Database », s. d.) et décrivant des interactions similaires. Par exemple des interactions proies-prédateurs, plantes-pollinisateurs . . .
- Ces réseaux permettent un suivi de la biodiversité, de détecter et d'analyser la robustesse et les changements subies par ces écosystèmes et notamment les risques d'effondrement de la biodiversité.
- En écologie microbienne, les réseaux sont construits sur la base de co-occurences et reconstruits par inférence des liens mais rarement par observation directe.

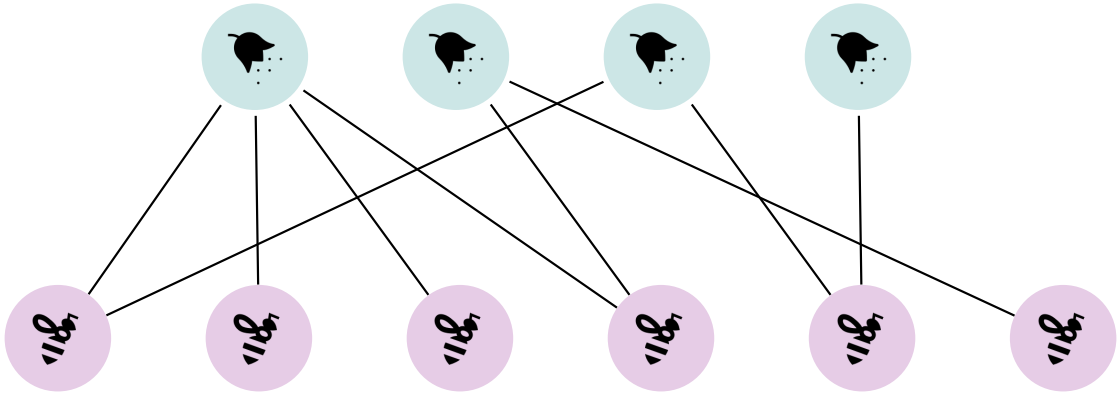


Figure 1 – Exemple d'un réseau plantes-pollinisateurs

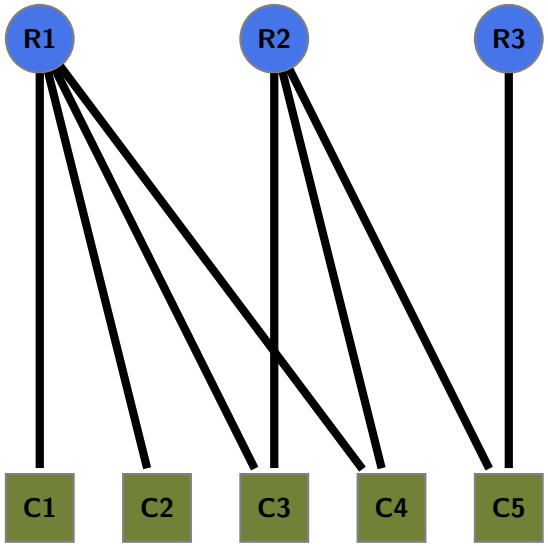
Contexte mathématique

- Faire de la détection de structure réseau par réseau de manière agnostique (SBM, LBM) est bien connu. Mais il y a de l'intérêt à le faire sur plusieurs :
  - Des espèces différentes dans plusieurs réseaux pourrait remplir des rôles similaires
  - Les petits réseaux pourraient bénéficier d'une estimation avec des réseaux plus grands et révéler une structure plus fine.
  - Certains réseaux étant moins bien échantillonnés que d'autre une prise en compte en collection de réseaux pourrait aider à transférer de l'information
- Re-grouper les réseaux selon leur similarité (*clustering* de réseaux)
- Transférer de l'information grâce à la collection (par exemple reconstitution de données manquantes)
- Proposer des comparaisons en extrayant plus d'informations que les métriques classiques

Axe 1 : Modèles à variables latentes pour une collection de réseaux bipartites

Réseaux bipartites

Réseau bipartite



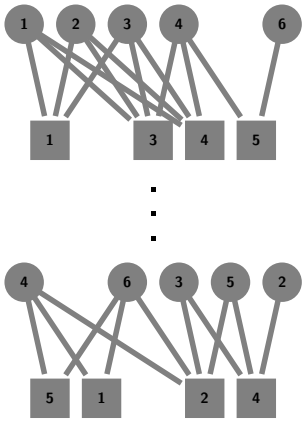
Matrice d'incidence

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

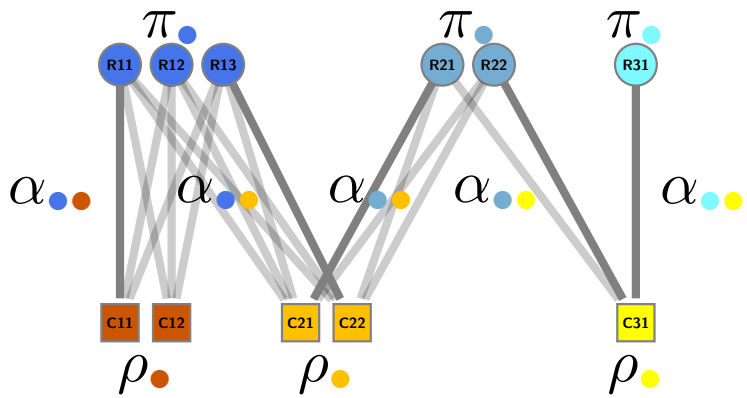
Permet de décrire des interactions impliquant deux agents dont les rôles sont de natures différentes.

Par exemple : hôtes-parasites, plantes-pollinisateurs, graines-disperseurs ...

Collections bipartites



$\overset{iid}{\sim}$



LBM

Pour

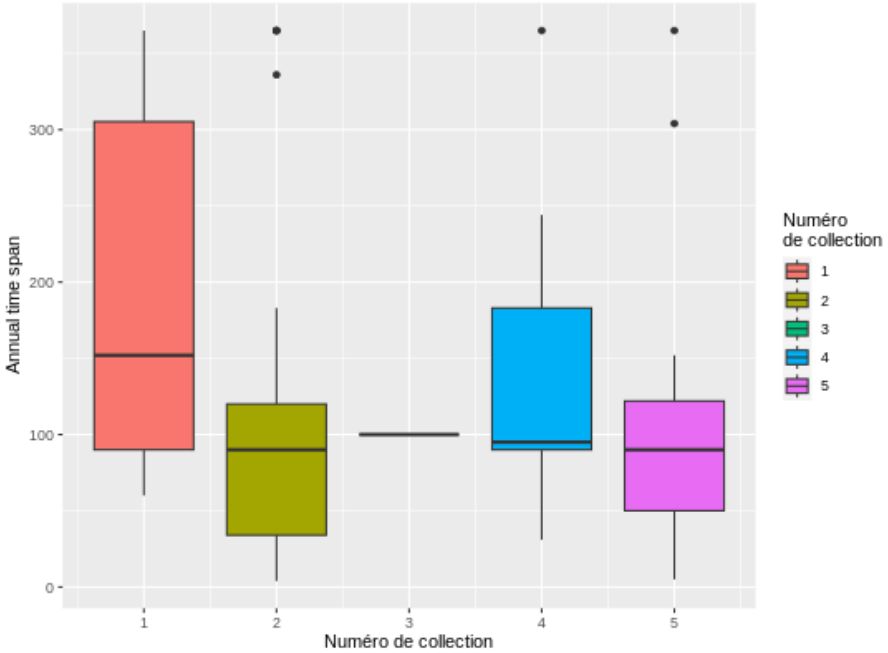
- $Q_1 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en ligne
- $Q_2 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en colonne

Paramètres

- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$ en ligne et $\rho_\bullet = \mathbb{P}(W_j = \bullet)$ en colonne
- $\alpha_{\bullet\bullet} = \mathbb{P}(X_{ij} = 1 | Z_i = \bullet, W_j = \bullet)$

Application, données plantes pollinisateurs

Voici des résultats du modèle *iid-colBiSBM* sur des données plantes-pollinisateurs (Doré et al., 2021 et Thébault et Fontaine, 2020)



N°de collection	1	2	3	4	5
Nombre de réseaux	38	45	1	20	19

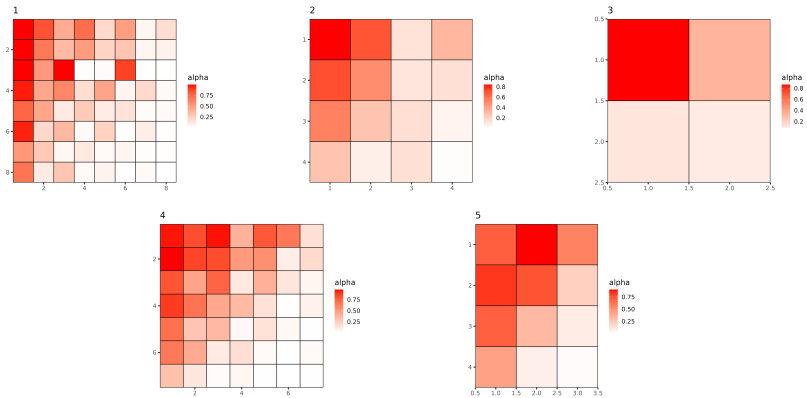


Figure 2 – Connectivités de la partition

Apport déjà réalisé

- Adaptation du modèle mathématique [a] proposé par Chabert-Liddell et al., 2024 aux réseaux bipartites
- Développement algorithmique pour l'exploration de l'espace de paramètres.
- Écriture du code de la partie bipartite s'intégrant au package [b] écrit par Saint-Clair Chabert-Liddell.

---

a. Notamment des formules des étapes VE et M et du calcul de dissimilarité.

b. https://github.com/Chabert-Liddell/colSBM

À finir/à faire

- Finaliser l'analyse d'applications sur données réelles commencée sur Doré et al., 2021 ; Thébault et Fontaine, 2020 avec les interprétations des écologues.
- Preuve d'identifiabilité du modèle (Chabert-Liddell et al., 2024 ; Celisse et al., 2012 ; Keribin et al., 2015 ; Brault & Mariadassou, 2015)

Axe 2 : Embedding de nœuds par apprentissage profond pour comparaison des topologies de réseaux

Graph Neural Networks I

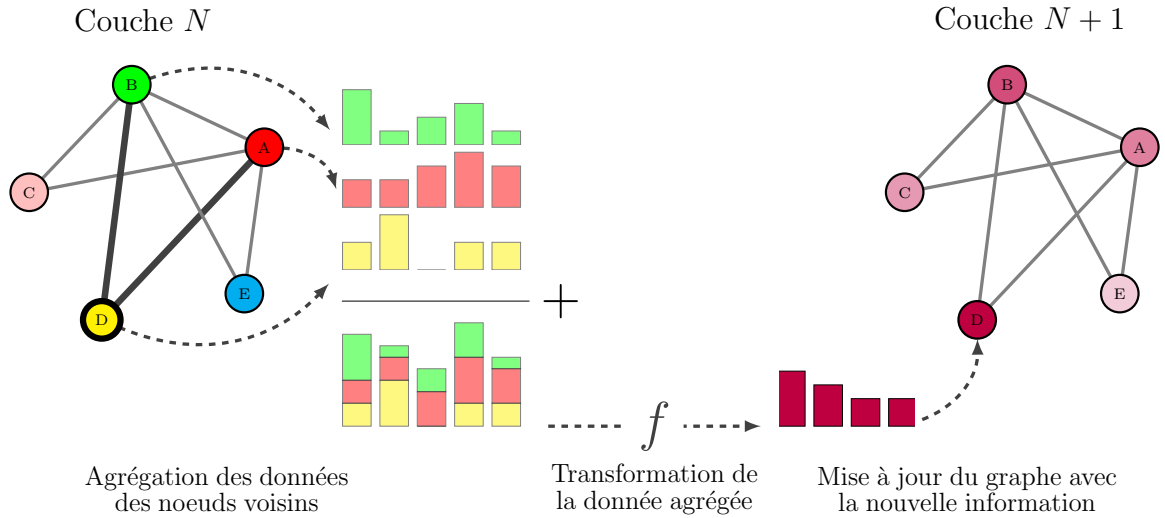


Figure 3 – Illustration du *message passing* au sein d'un graphe. [1]

Graph Neural Networks II

En utilisant les *Graph Convolutional Networks* (GCN) il est possible de réaliser un *embedding* des graphes (Veličković et al., 2018 ; Hamilton et al., s. d. ; Xu et al., 2019) en tenant compte des invariances qui sont inhérentes à ces objets.

Règle de propagation d'une couche de GCN

$$H^{(l+1)} = \sigma\left(\tilde{D}^{\frac{1}{2}}\tilde{A}\tilde{D}^{\frac{1}{2}}H^{(l)}W^{(l)}\right), \tag{1}$$

tirée de Kipf et Welling, 2017.

Pour, par exemple, utiliser des auto-encodeur variationnels ou VAE (Kipf & Welling, 2017, 2016) par exemple et donc permettant d'obtenir par réseau une distribution. Cela permet alors par exemple de calculer une distance de Gromov-Wasserstein afin de comparer les réseaux et de pouvoir réaliser un *clustering* ou une classification.

Graph Neural Networks III

Un des avantages principaux est le *passage à l'échelle* de ces méthodes permettant de traiter des réseaux de plus grande taille.

1. Figure adaptée de Sanchez-Lengeling et al., 2021 par Emré Anakok.

Axe 3 : Inférence jointe de réseaux

Limites des techniques actuelles Matchado et al., 2021. Rôle important pour les réseaux reconstruits notamment en microbiologie.

Organisation de la thèse

Planning prévisionnel de la thèse

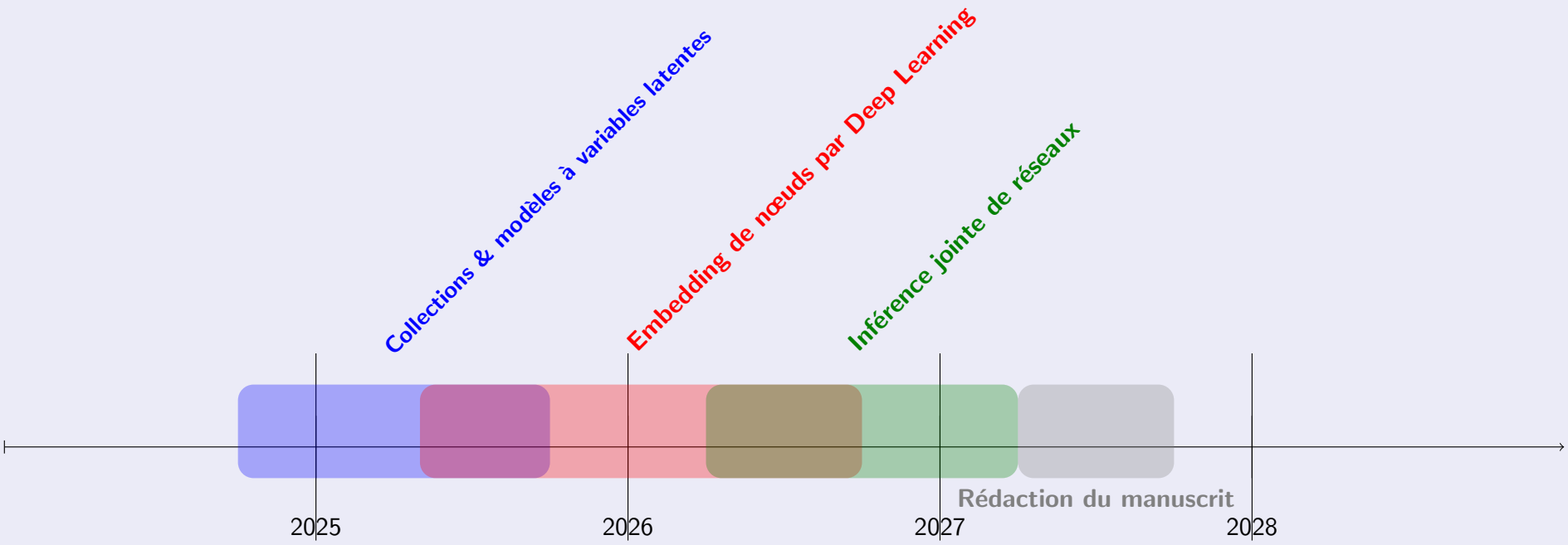


Figure 4 – Chronologie prévue

Financement

L'INRAE, par le département MathNum accorde déjà 50% des financements de la thèse.

Merci pour votre attention.

Bibliographie I

Web of Life : Ecological Networks Database. (s. d.). Récupérée juin 17, 2023, à partir de https://www.web-of-life.es/map.php

Doré, M., Fontaine, C., & Thébault, E. (2021).Relative effects of anthropogenic pressures, climate, and sampling design on the structure of pollination networks at the global scale. *Global Change Biology*, *27*(6), 1266-1280. https://doi.org/10.1111/gcb.15474

Thébault, E., & Fontaine, C. (2020, décembre 1). *A Database of Plant-Pollinator Networks* (Version 1). Zenodo. https://doi.org/10.5281/zenodo.4300427

Chabert-Liddell, S.-C., Barbillon, P., & Donnet, S. (2024).Learning Common Structures in a Collection of Networks. An Application to Food Webs. *The Annals of Applied Statistics*, *18*(2), 1213-1235. https://doi.org/10.1214/23-AOAS1831

Bibliographie II

Celisse, A., Daudin, J.-J., & Pierre, L. (2012).Consistency of Maximum-Likelihood and Variational Estimators in the Stochastic Block Model. *Electronic Journal of Statistics*, *6*, 1847-1899. https://doi.org/10.1214/12-EJS729

Keribin, C., Brault, V., Celeux, G., & Govaert, G. (2015).Estimation and selection for the latent block model on categorical data. *Stat Comput*, *25*(6), 1201-1216. https://doi.org/10.1007/s11222-014-9472-2

Brault, V., & Mariadassou, M. (2015).Co-clustering through Latent Bloc Model : a Review. *Journal de la société française de statistique*, *156*(3), 120-139. Récupérée mai 15, 2024, à partir de http://www.numdam.org/item/JSFS_2015__156_3_120_0/

Sanchez-Lengeling, B., Reif, E., Pearce, A., & Wiltschko, A. B. (2021).A Gentle Introduction to Graph Neural Networks. *Distill*, *6*(9), e33. https://doi.org/10.23915/distill.00033

Bibliographie III

Veličković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Liò, P., & Bengio, Y. (2018, février 4). *Graph Attention Networks*. arXiv : 1710.10903 [cs, stat]. Récupérée mai 14, 2024, à partir de http://arxiv.org/abs/1710.10903

Hamilton, W., Ying, Z., & Leskovec, J. (s. d.).Inductive Representation Learning on Large Graphs.

Xu, K., Hu, W., Leskovec, J., & Jegelka, S. (2019, février 22). *How Powerful Are Graph Neural Networks ?* arXiv : 1810.00826 [cs, stat]. https://doi.org/10.48550/arXiv.1810.00826

Kipf, T. N., & Welling, M. (2017, février 22). *Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks*. arXiv : 1609.02907 [cs, stat]. https://doi.org/10.48550/arXiv.1609.02907

Bibliographie IV

Kipf, T. N., & Welling, M. (2016, novembre 21). *Variational Graph Auto-Encoders*. arXiv : 1611.07308 [cs, stat]. https://doi.org/10.48550/arXiv.1611.07308

Matchado, M. S., Lauber, M., Reitmeier, S., Kacprowski, T., Baumbach, J., Haller, D., & List, M. (2021).Network Analysis Methods for Studying Microbial Communities : A Mini Review. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, *19*, 2687-2698. https://doi.org/10.1016/j.csbj.2021.05.001

Govaert, G., & Nadif, M. (2005).An EM Algorithm for the Block Mixture Model. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, *27*(4), 643-647. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2005.69

Bibliographie V

Chabert-Liddell, S.-C., Barbillon, P., & Donnet, S. (2023, mars 27). *Learning Common Structures in a Collection of Networks. An Application to Food Webs*. arXiv : 2206.00560 [stat]. https://doi.org/10.48550/arXiv.2206.00560

Anakok, E., Barbillon, P., Fontaine, C., & Thebault, E. (2022, novembre 29). *Disentangling the structure of ecological bipartite networks from observation processes*. arXiv : 2211.16364 [stat]. Récupérée juin 14, 2023, à partir de http://arxiv.org/abs/2211.16364

Annexes

Modèles à variables latentes pour collection de réseaux bipartites

Latent Block Model (LBM [2])

Proposé par Govaert et Nadif, 2005.

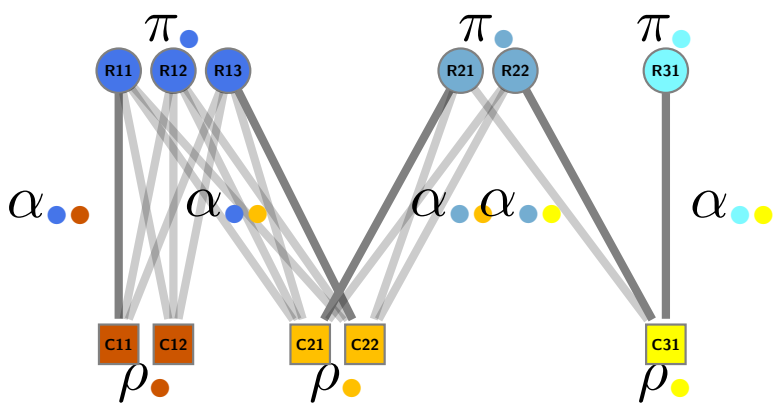


Figure 5 – Exemple de LBM [2]

Pour

- $Q_1 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en ligne
- $Q_2 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en colonne

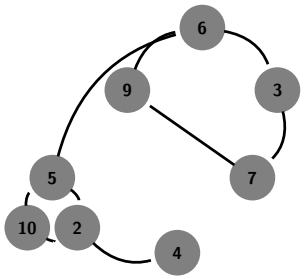
Paramètres

- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$ en ligne et $\rho_\bullet = \mathbb{P}(W_j = \bullet)$ en colonne
- $\alpha_{\bullet\bullet} = \mathbb{P}(X_{ij} = 1 | Z_i = \bullet, W_j = \bullet)$

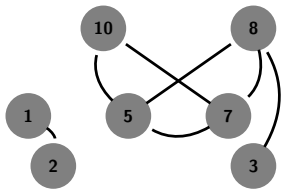
2. Que j'appellerai par la suite BiSBM

colSBM

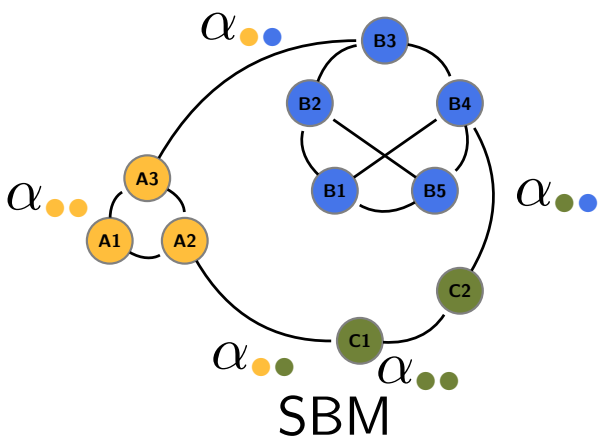
Le modèle *colSBM* (Chabert-Liddell et al., 2023).



$\vdots$



$\overset{iid}{\sim}$

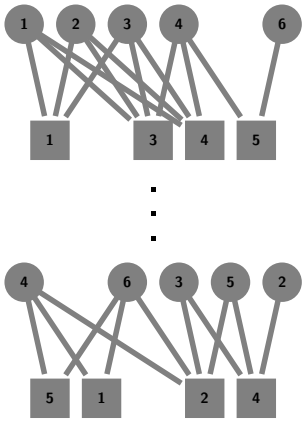


Pour $Q = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés :

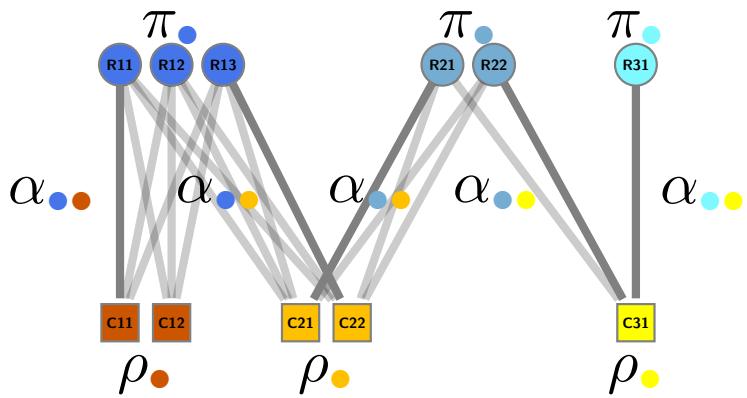
Paramètres

- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$
- $\alpha_{\bullet\bullet} = \mathbb{P}(X_{ij} = 1 | Z_i = \bullet, Z_j = \bullet)$

Collections bipartites



$\overset{iid}{\sim}$



BiSBM

Pour

- $Q_1 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en ligne
- $Q_2 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en colonne

Paramètres

- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$ en ligne et $\rho_\bullet = \mathbb{P}(W_j = \bullet)$ en colonne
- $\alpha_{\bullet\bullet} = \mathbb{P}(X_{ij} = 1 | Z_i = \bullet, W_j = \bullet)$

Différents modèles

iid-colBiSBM

$\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots \pi_{Q_1})$ et $\boldsymbol{\rho} = (\rho_1, \dots \rho_{Q_2})$, tous les réseaux partagent les mêmes paramètres [3]

$\pi\rho$-colBiSBM

$\boldsymbol{\pi} = ((\pi_1{}^m, \dots \pi_{Q_1}{}^m))_{m=1,\dots M}$ et $\boldsymbol{\rho} = ((\rho_1{}^m, \dots \rho_{Q_2}{}^m))_{m=1,\dots M}$
avec $\forall q, m \in [\![1, Q_1]\!] \times [\![1, M]\!], \pi_q^m \in [0, 1]$ et $\forall r, m \in [\![1, Q_2]\!] \times [\![1, M]\!], \rho_r^m \in [0, 1]$

Et également deux autres modèles (π-colBiSBM et ρ-colBiSBM) où seulement une des deux dimensions est libre.

3. Dans tous les modèles la structure de connectivité est supposée identique au sein de la collection.

Estimation des paramètres

Maximisation d'une borne inférieure de la log-vraisemblance des données observées.

$$\ell(\mathbf{X};\boldsymbol{\theta}) \geq \sum_{m=1}^{M} \Bigg(\sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{j=1}^{n_2^m} \sum_{q\in\mathcal{Q}_{1,m}} \sum_{r\in\mathcal{Q}_{2,m}} \tau_{i,q}^{1,m}\tau_{j,r}^{2,m} \log f(X_{ij}^m;\alpha_{qr}) + \sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{q\in\mathcal{Q}_{1,m}} \tau_{i,q}^{1,m} \log {\pi_q}^m + \sum_{j=1}^{n_2^m} \sum_{r\in\mathcal{Q}_{2,m}} \tau_{j,r}^{2,m} \log {\rho_r}^m - \sum_{i=1}^{n_1} \tau_{i,q}^{1,m} \log \tau_{i,q}^{1,m} - \sum_{j=1}^{n_2} \tau_{j,r}^{2,m} \log \tau_{j,r}^{2,m} \Bigg) =: J(\boldsymbol{\tau};\boldsymbol{\theta})$$

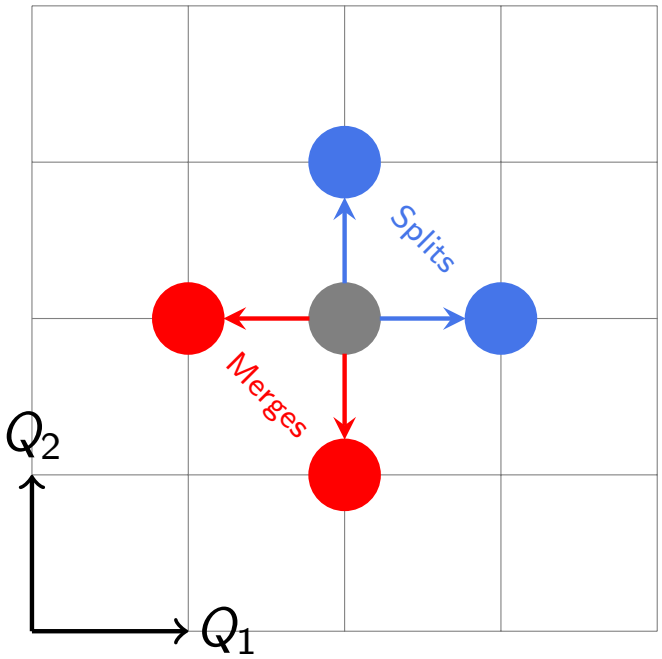
Approximation variationnelle

$\tau_{i,q}^{1,m} = P(Z_i = q|X_{ij}^m)$ et $\tau_{j,r}^{2,m} = P(W_j = r|X_{ij}^m)$ tels que
$P(Z_i = q, W_j = r|X_{ij}^m) = \tau_{i,q}^{1,m} \times \tau_{j,r}^{2,m}$

Sélection de modèle : choix de (Q_1, Q_2) - Approche gloutonne

Le VEM se fait à Q_1, Q_2 fixés, il faut donc déterminer les "meilleures" coordonnées. Nous maximisons un BIC-L [4].

Détermination d'un premier mode par approche *gloutonne*

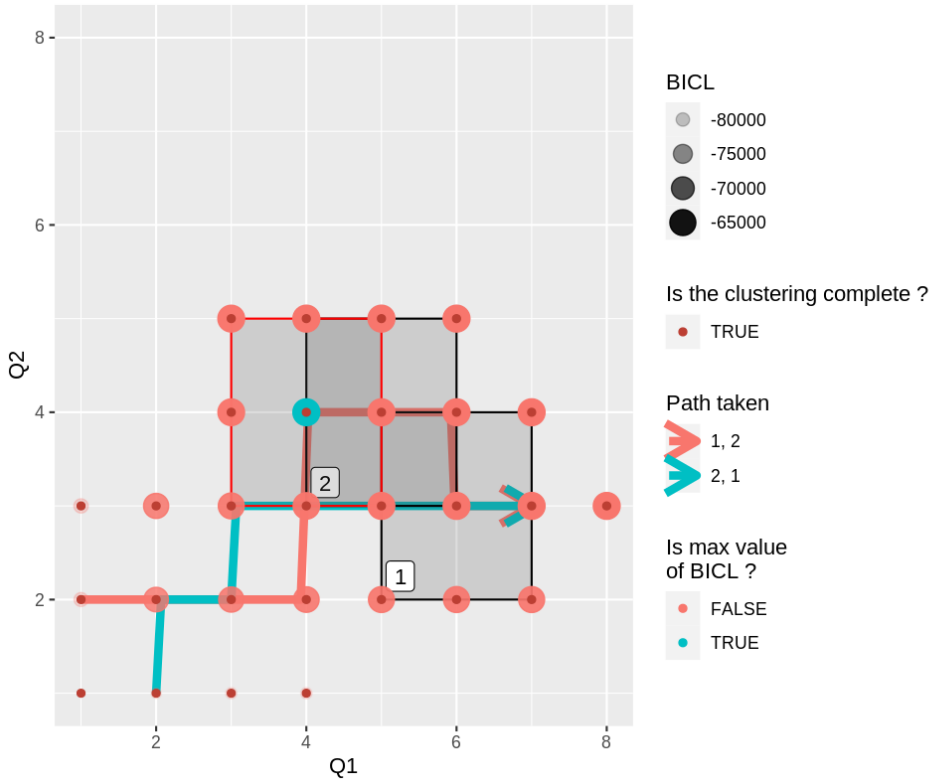


Exploration gloutonne

- Initialisation sur $(1, 2)$ et $(2, 1)$
- Exploration des 4 voisins et déplacement sur le meilleur des 4
- Arrêt après 2 étapes successives sans augmentation du BIC-L

4. *Bayesian Information Criterion - Like*, en adaptant les formules de Chabert-Liddell et al., 2023

Sélection de modèle : choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante



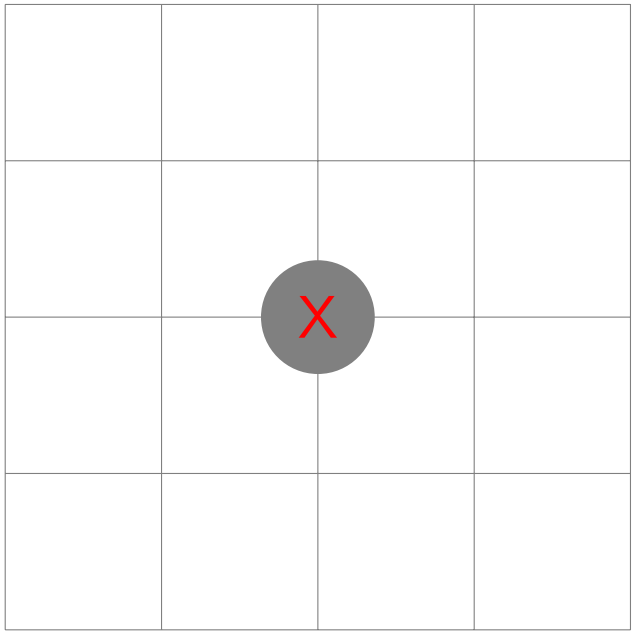
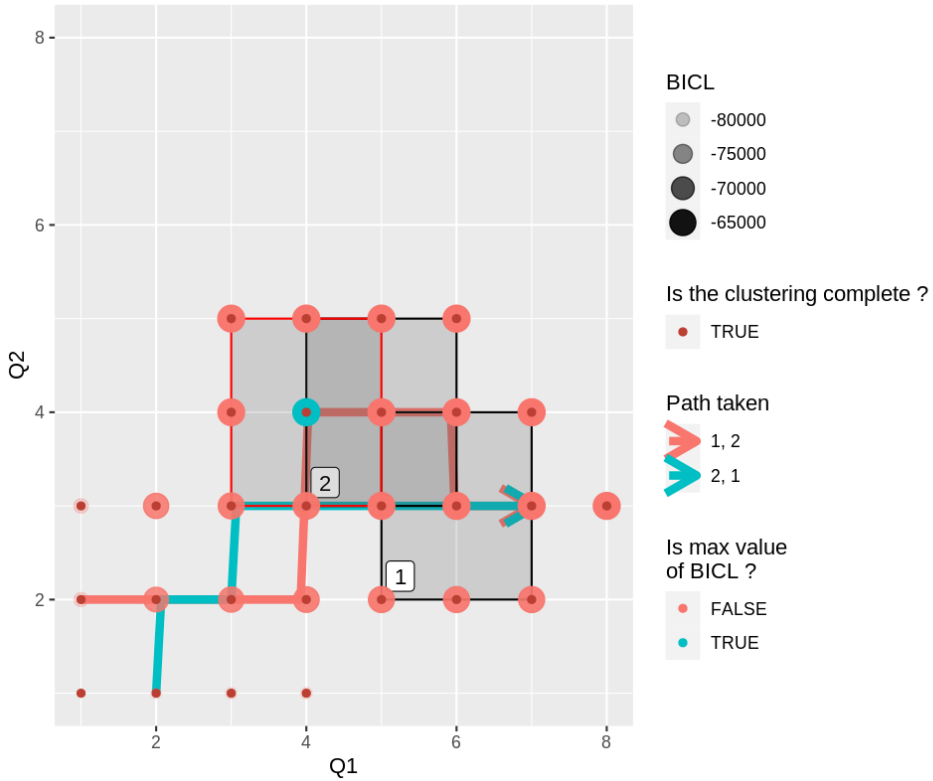


Figure 6 – Exemple de parcours de fenêtre glissante

Sélection de modèle : choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante



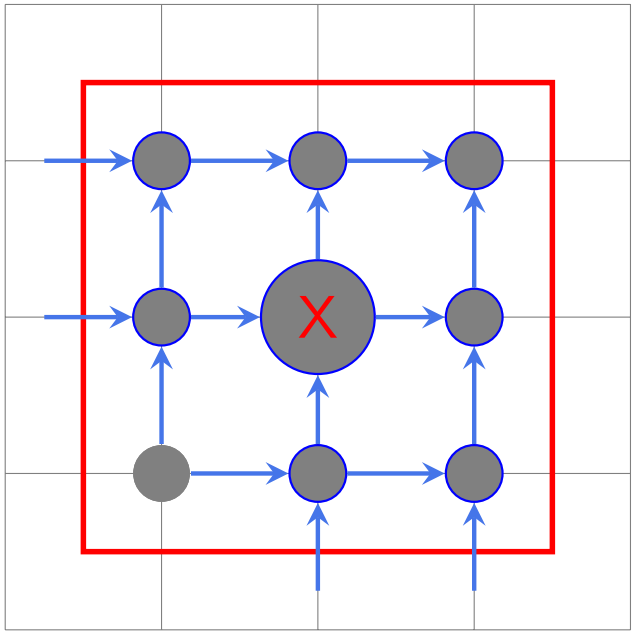
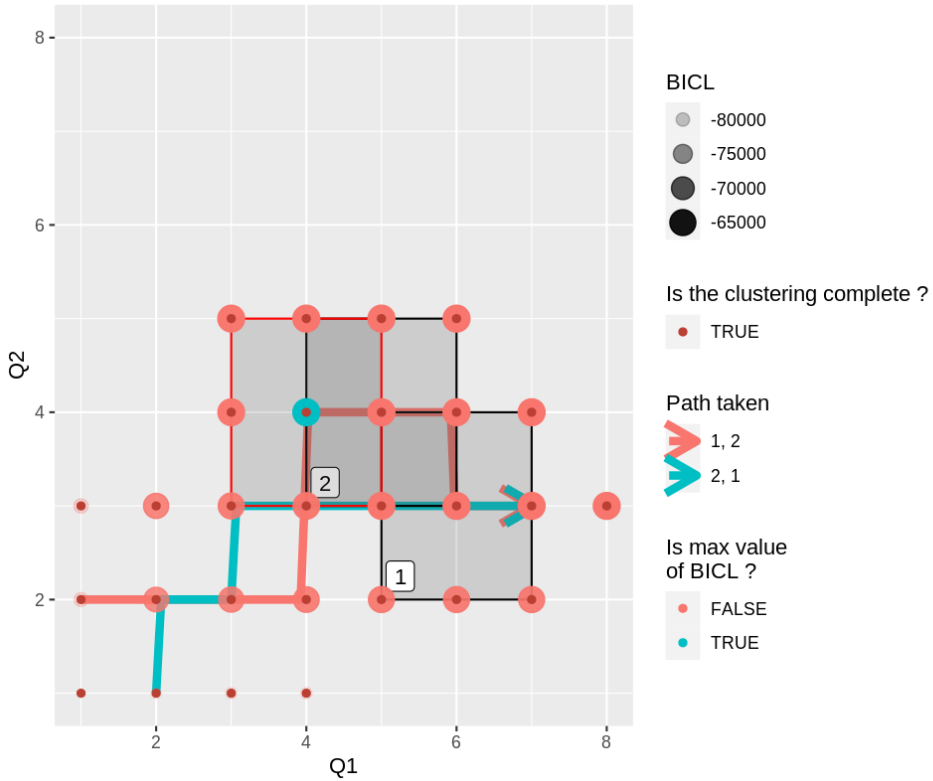


Figure 6 – Exemple de parcours de fenêtre glissante

Sélection de modèle : choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante



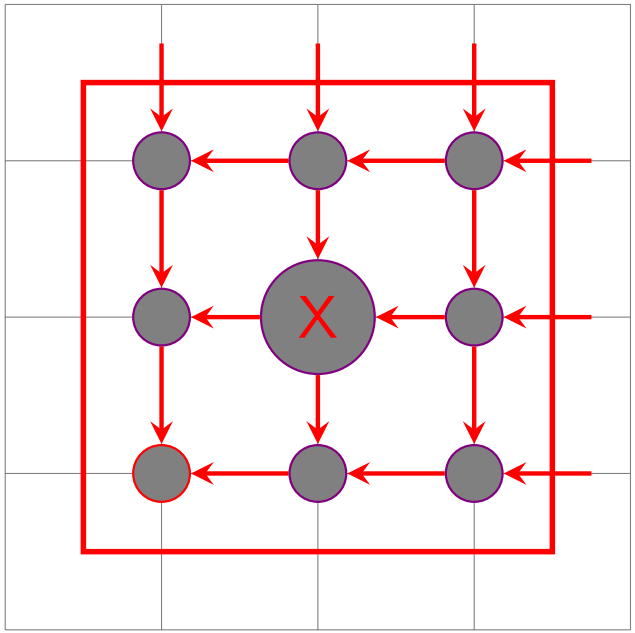
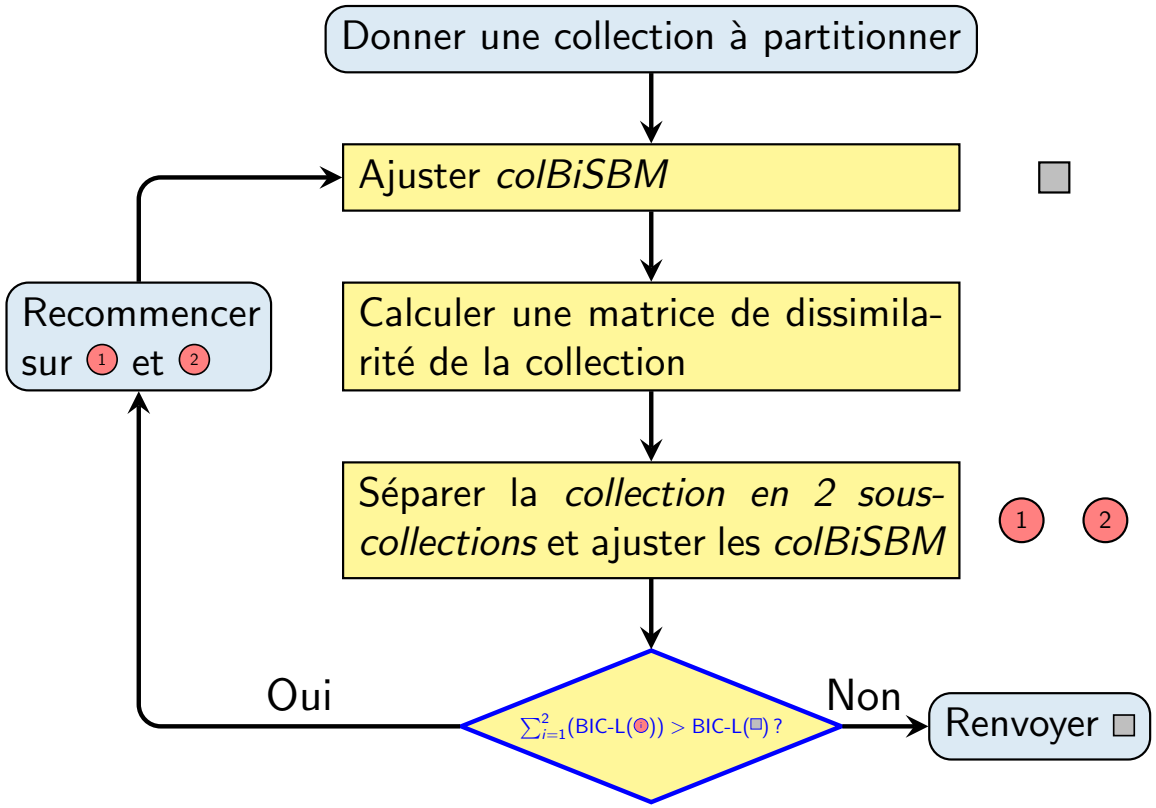


Figure 6 – Exemple de parcours de fenêtre glissante

Clustering de réseaux

Objectif

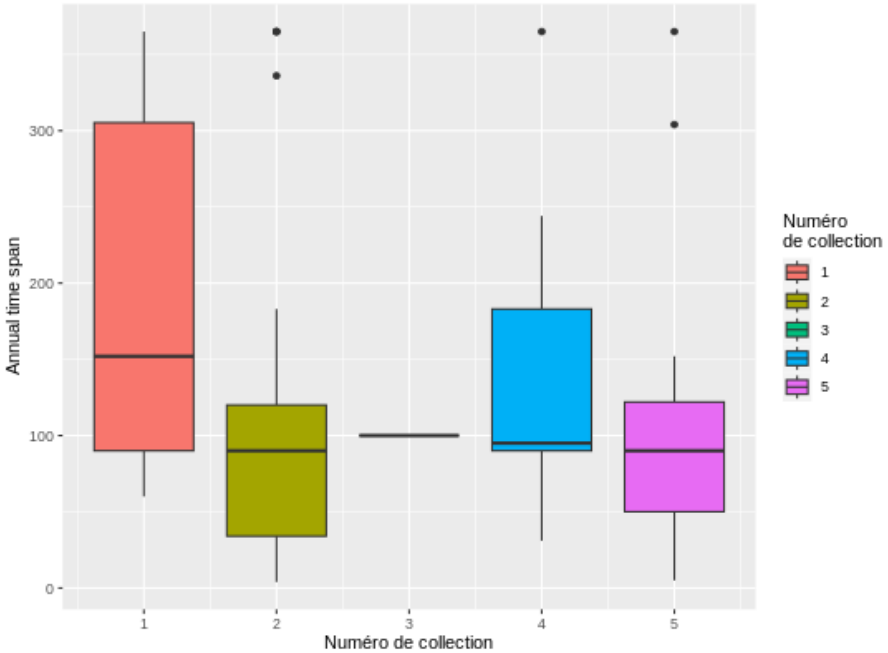
Déterminer une partition qui maximise la somme du BICL de ses sous-collections.



Même approche que Chabert-Liddell et al., 2023

Application, données plantes pollinisateurs

Voici des résultats du modèle *iid-colBiSBM* sur des données plantes-pollinisateurs (Doré et al., 2021 et Thébault et Fontaine, 2020)



N°de collection	1	2	3	4	5
Nombre de réseaux	38	45	1	20	19

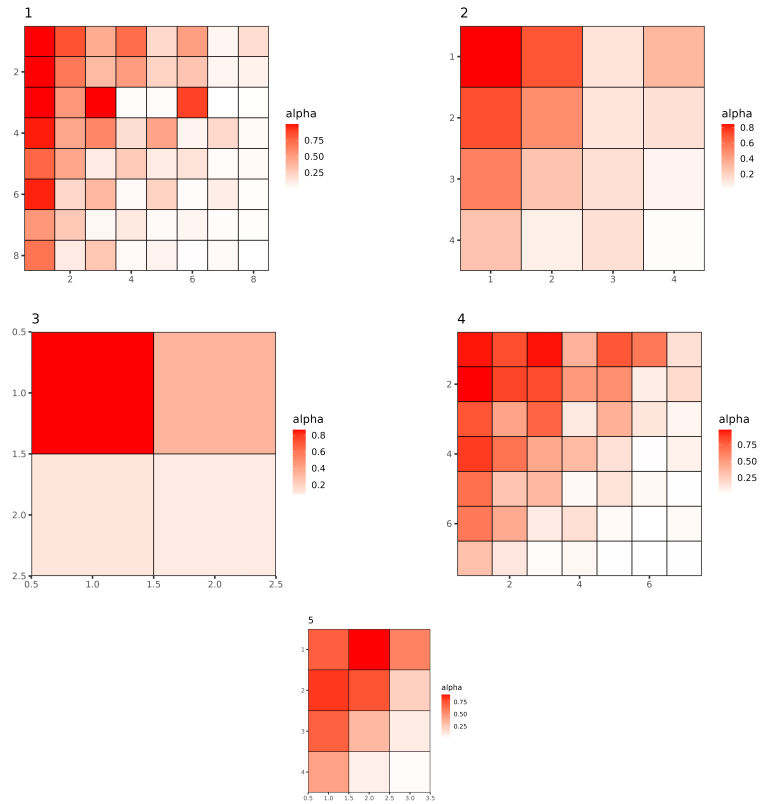


Figure 7 – Connectivités de la partition

Perspectives sur *colSBM*

- 4 modèles dont 3 qui ont une flexibilité sur au moins une des dimensions (adaptabilité aux données)
- Partitionner un ensemble de réseaux selon leurs structures
- Comparer les *clusterings* de réseaux obtenus entre données brutes et données corrigées (par exemple par la méthode *CoOPLBM*[5])

Le package est disponible sur GitHub :
https://github.com/Chabert-Liddell/colSBM

5. Anakok et al., 2022