Détection de structures et *clustering* dans des réseaux bipartites

Soutenance de Master MathSV

Louis Lacoste, encadré par Pierre Barbillon et Sophie Donnet
Laboratoire MIA Paris-Saclay

29 août 2024

Contexte écologique

- Nombreux réseaux disponibles pour interactions similaires.
- Suivi biodiversité, robustesse et risque d'effondrement ...

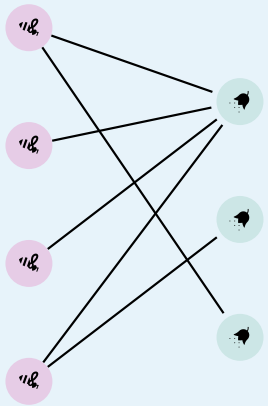


Figure 1 – Exemple d'un réseau plantes-pollinisateurs

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

Matrice d'adjacence associée

Contexte écologique

- Nombreux réseaux disponibles pour interactions similaires.
- Suivi biodiversité, robustesse et risque d'effondrement ...

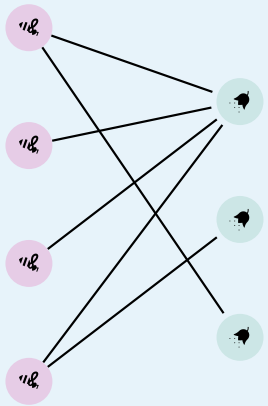


Figure 1 – Exemple d'un réseau plantes-pollinisateurs

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

Matrice d'adjacence associée

Contexte mathématique

Pour un unique réseau : variables latentes, *embedding*, ...
Motivations pour proposer des méthodes adaptées aux collections de réseaux :

- Espèces différentes, rôles analogues.
- Transfert d'informations grands vers petits réseaux.
- Regrouper les réseaux selon leur similarité (*clustering* de réseaux).

Latent Block Model (LBM [1])

Proposé par Govaert et Nadif, 2005.

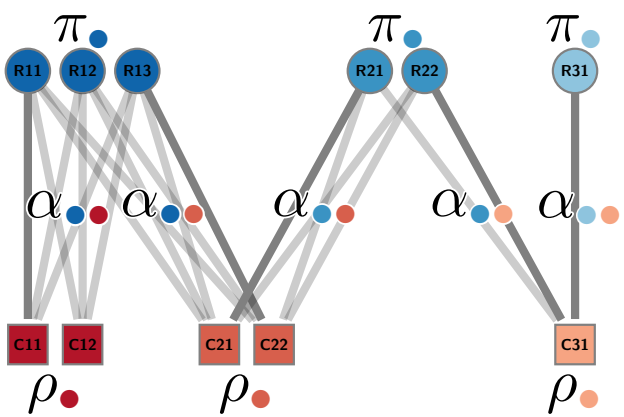


Figure 2 – Exemple de LBM [1]

Pour

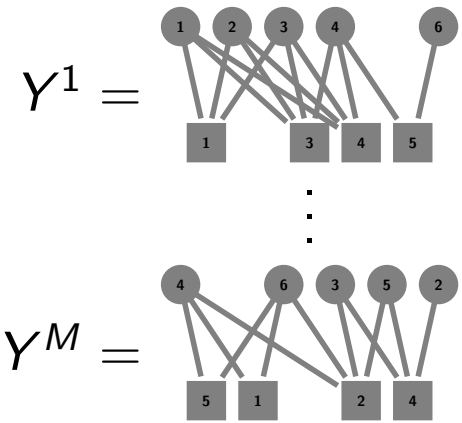
- $Q_1 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en ligne
- $Q_2 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en colonne

Paramètres

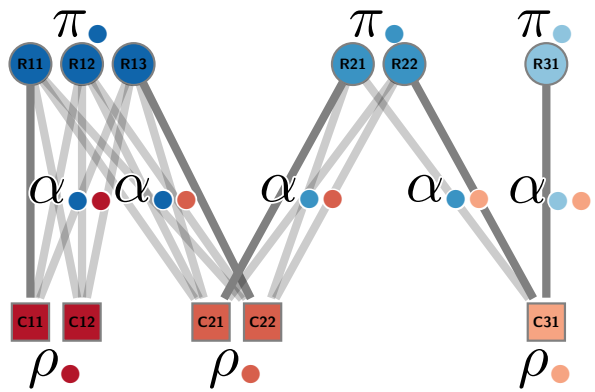
- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$ en ligne et $\rho_\bullet = \mathbb{P}(W_j = \bullet)$ en colonne
- $\alpha_{\bullet\bullet} = \mathbb{P}(X_{ij} = 1 | Z_i = \bullet, W_j = \bullet)$

1. Que j'appellerai par la suite BiSBM

Collections bipartites



$\overset{iid}{\sim}$

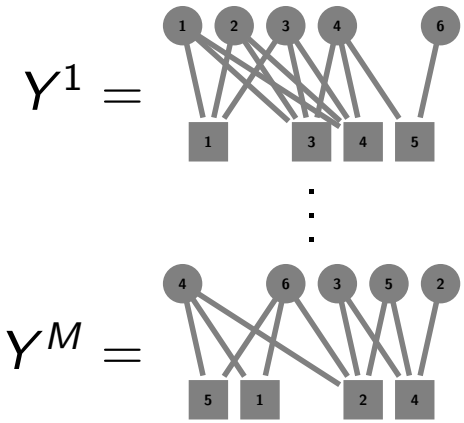


- $Q_1 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en ligne
- $Q_2 = |\{\bullet, \bullet, \bullet\}|$ blocs fixés en colonne

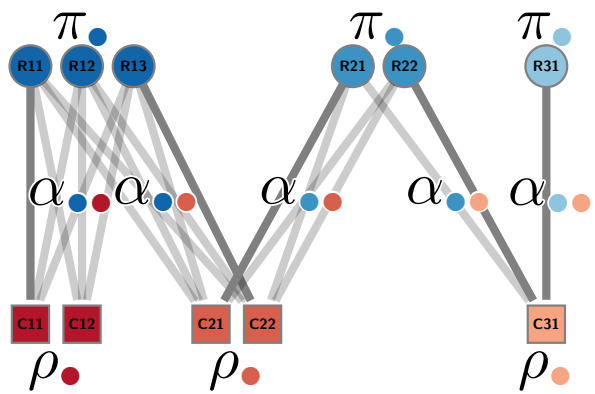
Paramètres

- $\pi_\bullet = \mathbb{P}(Z_i = \bullet)$ 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



$\overset{iid}{\sim}$

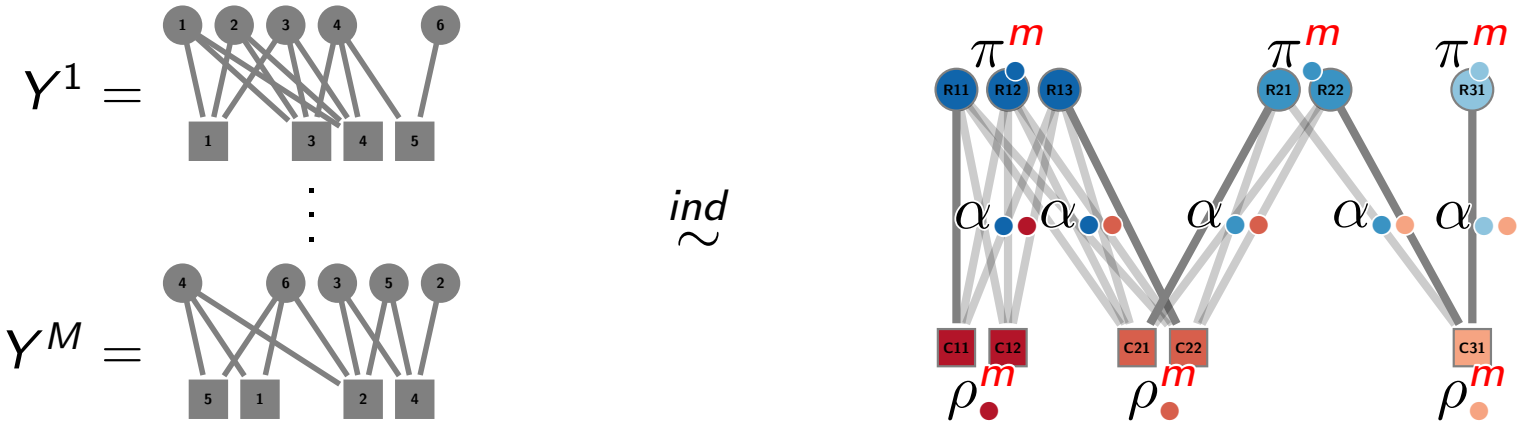


iid-colBiSBM

$\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots \pi_{Q_1})$ et $\boldsymbol{\rho} = (\rho_1, \dots \rho_{Q_2})$

Dans tous les modèles la structure de connectivité $(\boldsymbol{\alpha})$ est supposée identique au sein de la collection.

Différents modèles



$\pi\rho$-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 $\forall r, m \in [\![1, Q_2]\!] \times [\![1, M]\!], \rho_r^m \in [0,1]$

Dans tous les modèles la structure de connectivité $(\boldsymbol{\alpha})$ est supposée identique au sein de la collection.

Estimation des paramètres

En adaptant Chabert-Liddell et al., 2024 qui se base sur la méthode proposée par Daudin et al., 2008 utilisant l'algorithme *Variational EM*.

$$\ell(\mathbf{X};\boldsymbol{\theta}) \geq \sum_{m=1}^{M} \left(Q^m(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{\theta}^{(t)}) + \mathcal{H}(\mathcal{R}_{\mathbf{X}^m,\boldsymbol{\theta}^{(t)}}(\mathbf{Z}^m,\mathbf{W}^m)) \right) =: J(\boldsymbol{\tau};\boldsymbol{\theta})$$

où $Q^m(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{\theta}^{(t)}) = \mathrm{E}_{\mathbf{Z}^m,\mathbf{W}^m \sim \mathcal{R}_{\mathbf{X}^m,\boldsymbol{\theta}^{(t)}}(.)} [\log p(\mathbf{X}^m,\mathbf{Z}^m,\mathbf{W}^m|\boldsymbol{\theta})]$

Approximation variationnelle

$\mathcal{R}_{\mathbf{X}^m,\boldsymbol{\theta}^{(t)}}(\mathbf{Z}^m,\mathbf{W}^m) = P(\mathbf{Z}^m|\mathbf{X}^m,\boldsymbol{\theta}^{(t)})P(\mathbf{W}^m|\mathbf{X}^m,\boldsymbol{\theta}^{(t)})$, c'est à dire avoir une indépendance lignes, colonnes.

Formule développée de l'EM variationnel

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

où ℓ désigne la log vraisemblance.

Approximation variationnelle

$\tau_{iq}^{1,m} = P_{\mathcal{R}_m}(Z_{iq}^m = 1 | X_{i\bullet}^m)$ et $\tau_{jr}^{2,m} = P_{\mathcal{R}_m}(W_{jr}^m = 1 | X_{\bullet j}^m)$

Étape *Variational Expectation*

$$\widehat{\boldsymbol{\tau}}^{(t+1)} = \arg\max_{\boldsymbol{\tau}} \mathcal{J}(\boldsymbol{\tau}, \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(t)})$$

$$\begin{cases} \widehat{\tau}_{iq}^{1,m} \propto \widehat{\pi}_q^{m(t)} \prod_{j=1}^{n_2^m} \prod_{r \in \mathcal{Q}_2^m} f(X_{ij}^m; \widehat{\alpha}_{qr}^{(t)})^{\widehat{\tau}_{jr}^{2,m(t+1)}} & \forall i = 1, \dots, n_1^m, q \in \mathcal{Q}_1^m \\ \widehat{\tau}_{jr}^{2,m} \propto \widehat{\rho}_r^{m(t)} \prod_{i=1}^{n_1^m} \prod_{q \in \mathcal{Q}_1^m} f(X_{ij}^m; \widehat{\alpha}_{qr}^{(t)})^{\widehat{\tau}_{iq}^{1,m(t+1)}} & \forall j = 1, \dots, n_2^m, r \in \mathcal{Q}_2^m \end{cases}$$

2. Initialisation des $\widehat{\boldsymbol{\tau}}$ avec un *spectral clustering* sur les réseaux.

Étape *Maximization*

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(t+1)} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{J}(\widehat{\boldsymbol{\tau}}^{(t+1)}, \boldsymbol{\theta})$$

Paramètres de connectivité

$$\widehat{\alpha}_{qr} = \frac{\sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{iq}^{1,m} \tau_{jr}^{2,m} X_{ij}^m}{\sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{iq}^{1,m} \tau_{jr}^{2,m}}$$

Proportions pour *iid*

$$\widehat{\pi}_q = \frac{\sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_1^m} \tau_{iq}^{1,m}}{\sum_{m=1}^{M} n_1^m} \qquad \widehat{\rho}_r = \frac{\sum_{m=1}^{M} \sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{jr}^{2,m}}{\sum_{m=1}^{M} n_2^m}$$

Étape *Maximization*

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(t+1)} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{J}(\widehat{\boldsymbol{\tau}}^{(t+1)}, \boldsymbol{\theta})$$

Paramètres de connectivité

$$\widehat{\alpha}_{qr} = \frac{\sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{iq}^{1,m} \tau_{jr}^{2,m} X_{ij}^m}{\sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_1^m} \sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{iq}^{1,m} \tau_{jr}^{2,m}}$$

Proportions pour $\pi\rho$

$$\widehat{\pi}^m{}_q = \frac{\sum_{i=1}^{n_1^m} \tau_{iq}^{1,m}}{n_1^m} \qquad \widehat{\rho}^m{}_r = \frac{\sum_{j=1}^{n_2^m} \tau_{jr}^{2,m}}{n_2^m}$$

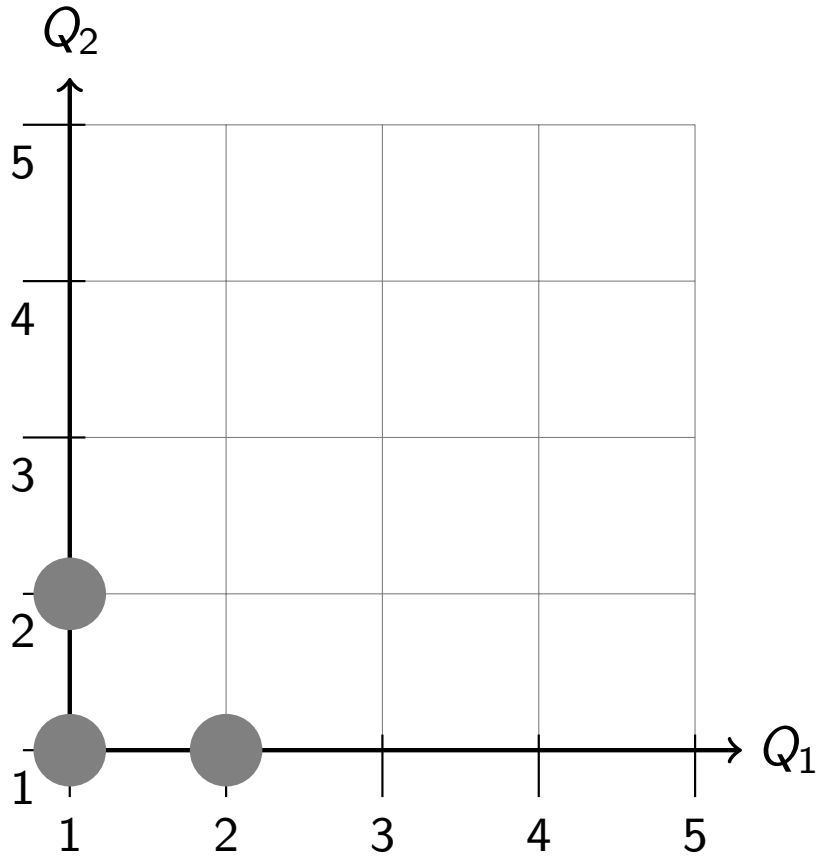
Problème de choix de (Q_1, Q_2)

L'estimation de paramètres se fait à Q_1, Q_2 blocs fixés, il faut donc déterminer les "meilleures" coordonnées. Nous maximisons un critère, le *Bayesian Information Criterion - Like* (BIC-L), de vraisemblance pénalisée en adaptant les formules de Chabert-Liddell et al., 2024.

Problèmes de l'exploration

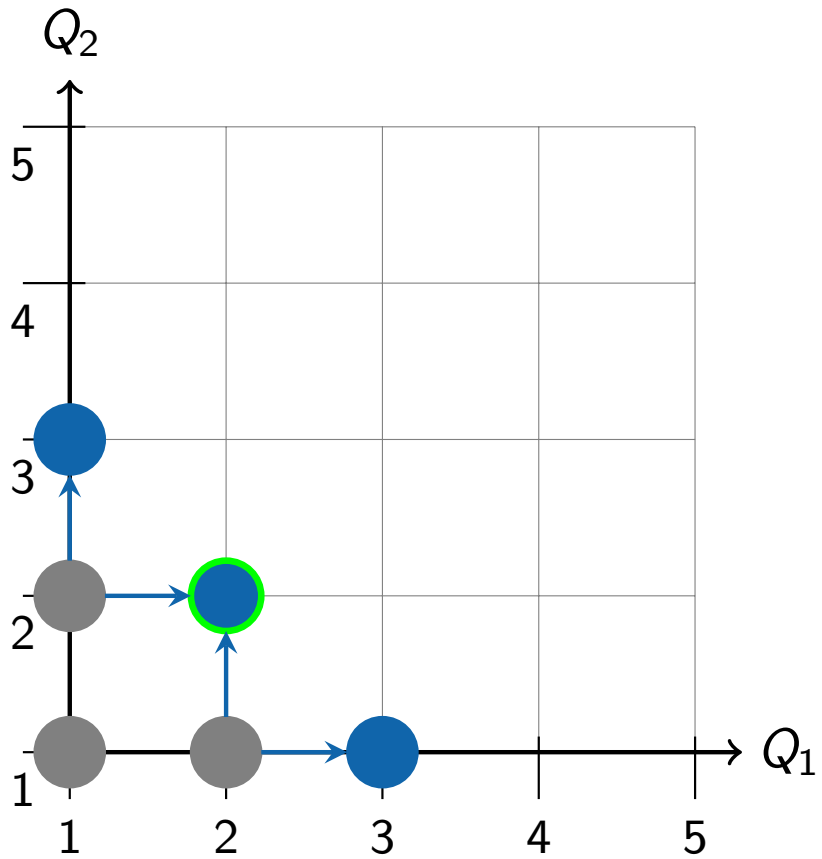
- Exploration de l'espace $\mathbb{N}^2$ coûteux, besoin d'une stratégie.
- Sensibilité aux initialisations et à l'aléatoire.

Choix de (Q_1, Q_2) - Approche gloutonne



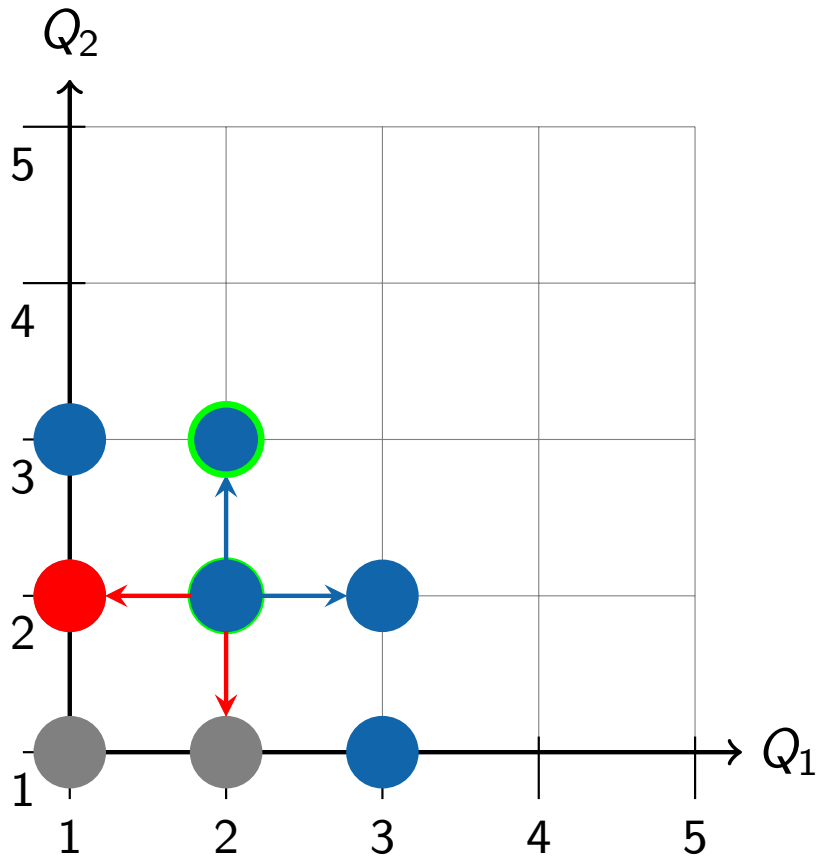
- Modèle initialisé :

Choix de (Q_1, Q_2) - Approche gloutonne



- Modèle initialisé :
- Modèle après *split* :
- Modèle maximisant le critère :

Choix de (Q_1, Q_2) - Approche gloutonne



- Modèle initialisé :
- Modèle après *split* :
- Modèle maximisant le critère :
- Modèle après *merge* :

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

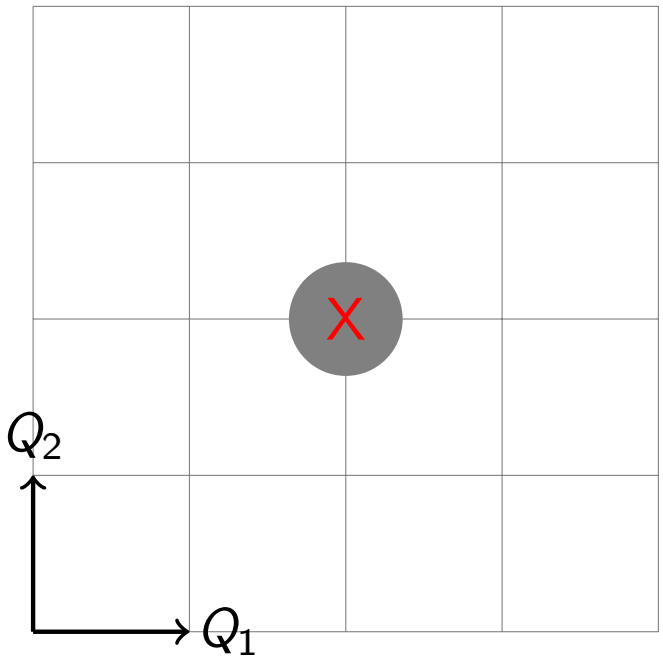


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

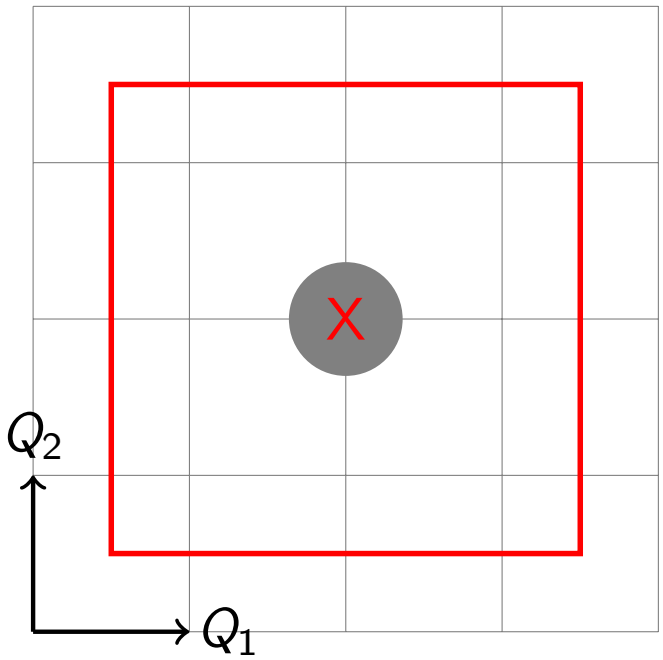


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

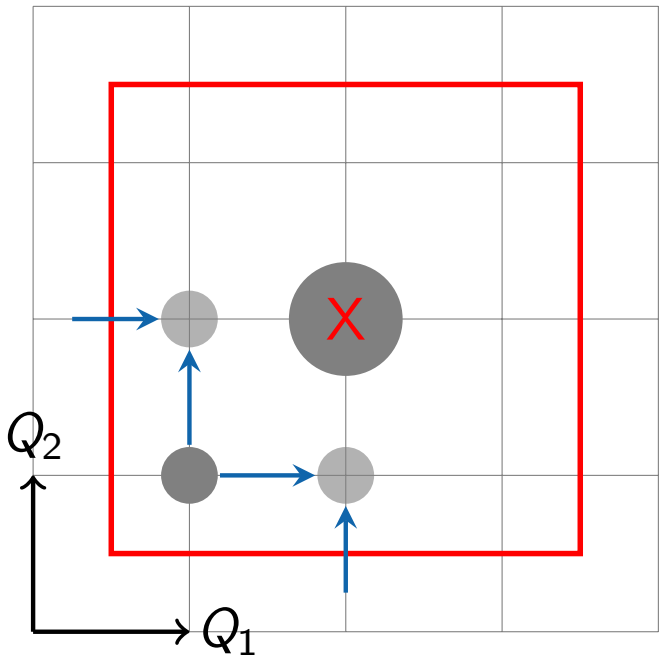


Figure 3 – Fenêtre glissante

Initialisation du modèle si nécessaire

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

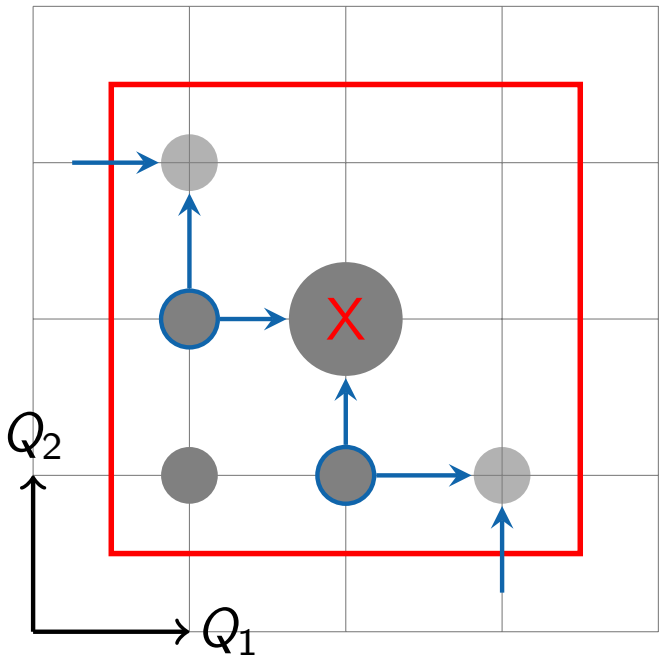


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

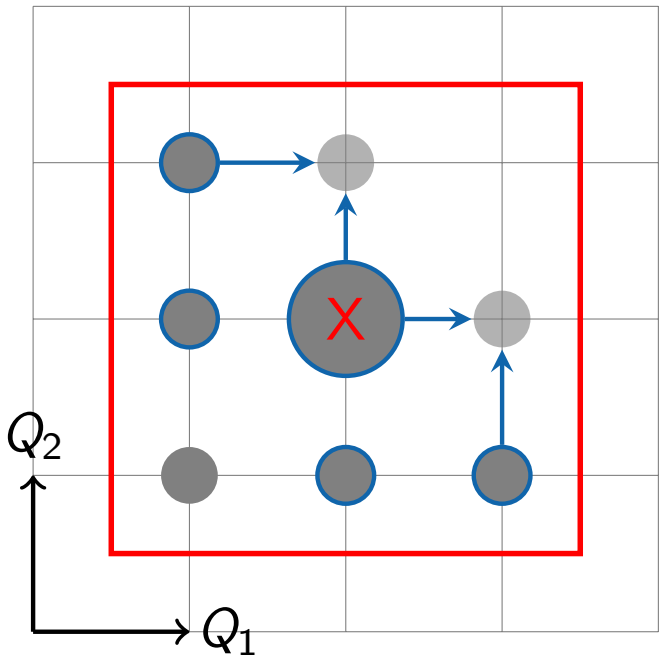


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

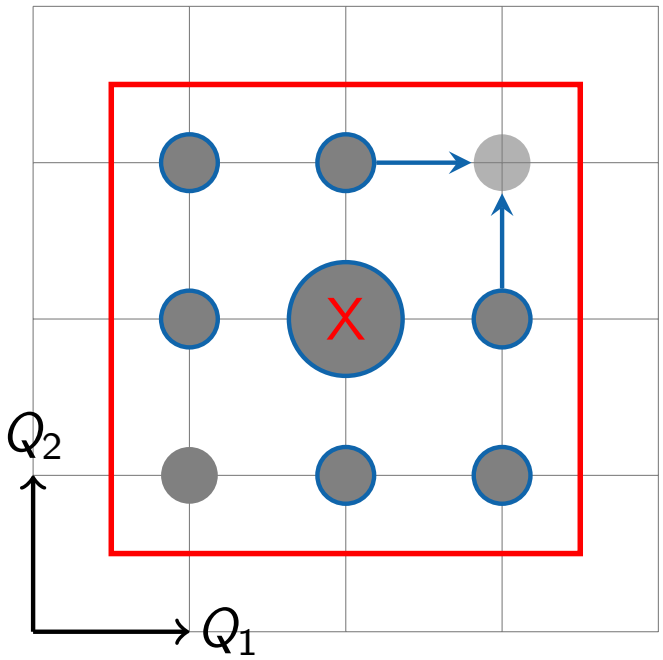


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

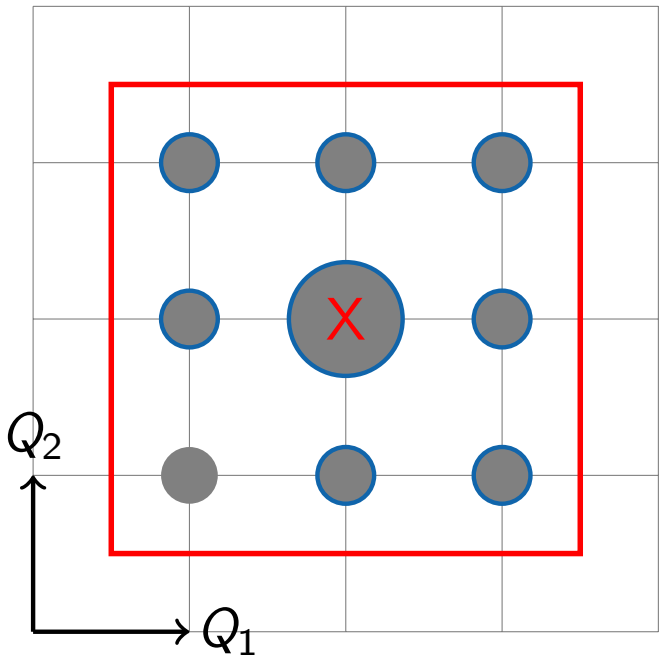


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

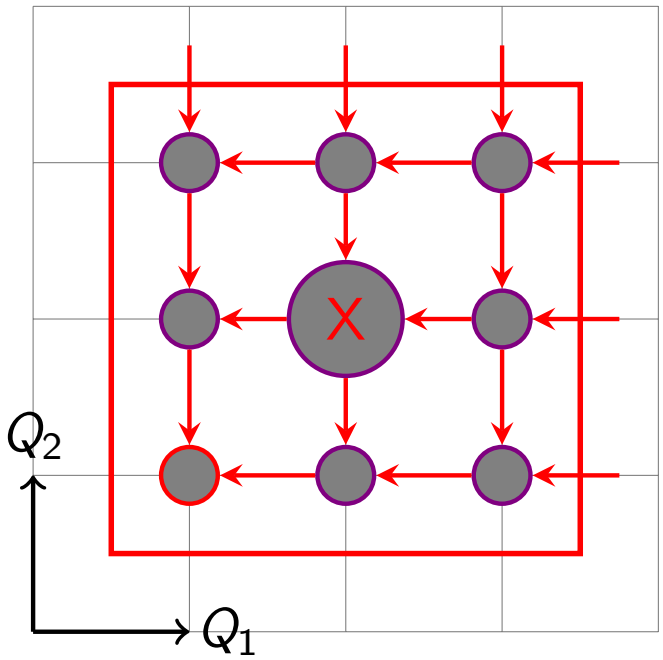


Figure 3 – Fenêtre glissante

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

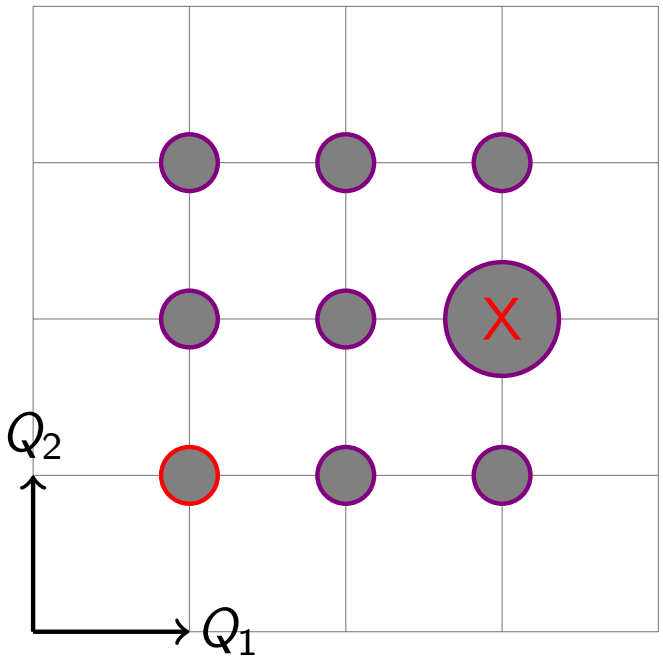


Figure 3 – Fenêtre glissante

Localisation du nouveau mode

Choix de (Q_1, Q_2) - Fenêtre glissante

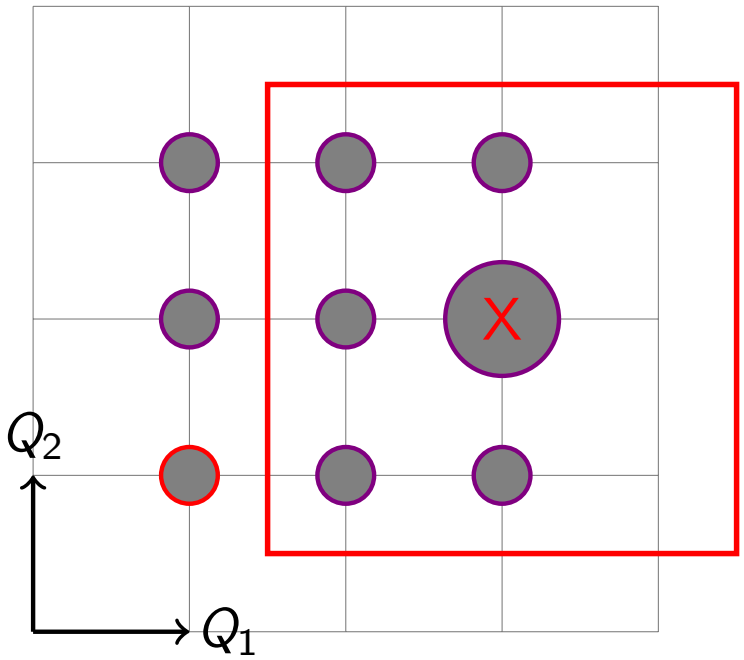
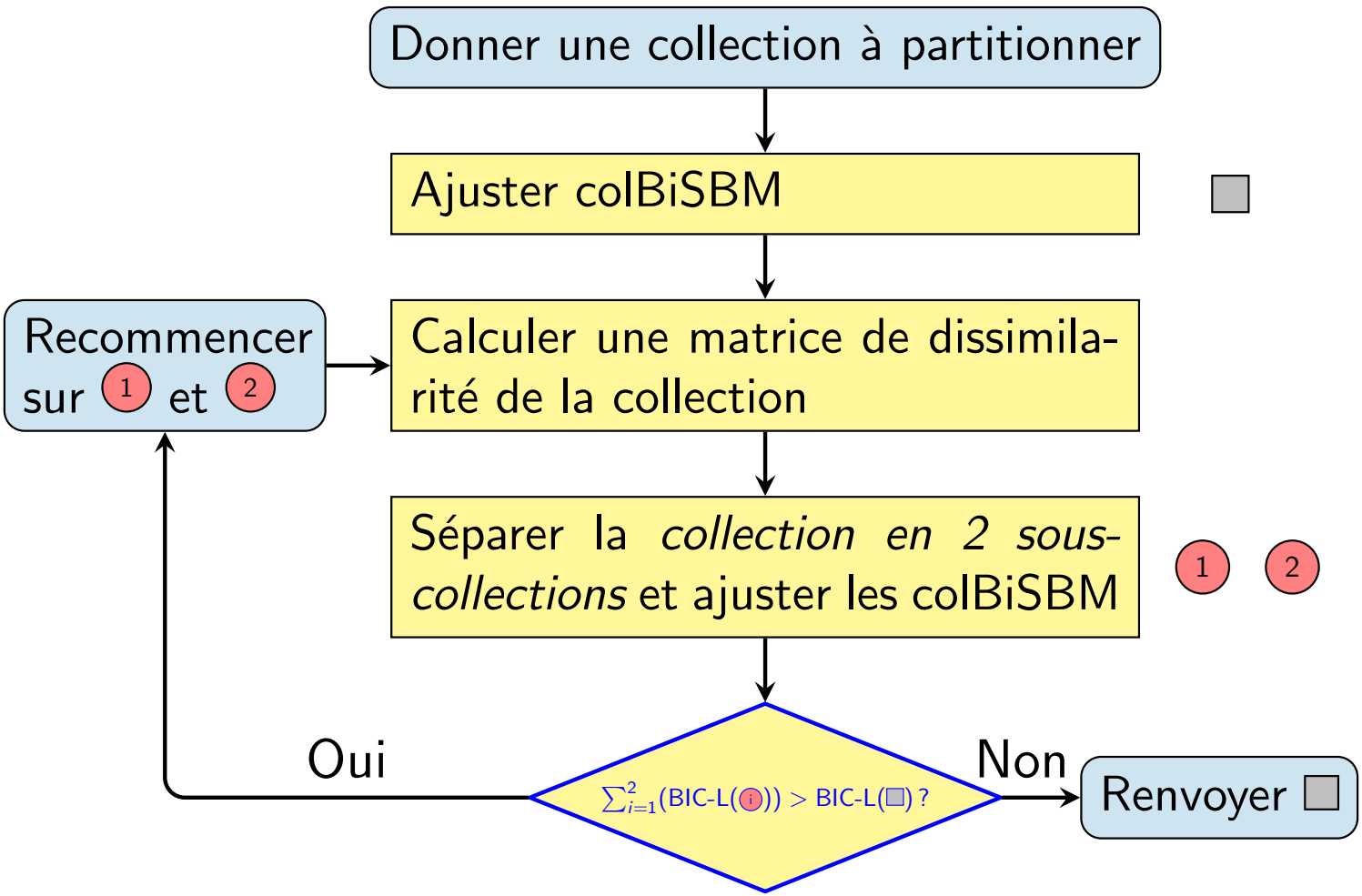


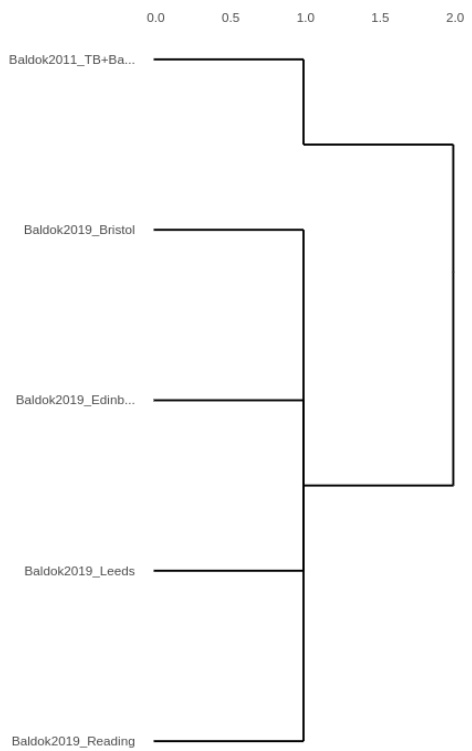
Figure 3 – Fenêtre glissante

Déplacement sur le nouveau mode puis itération

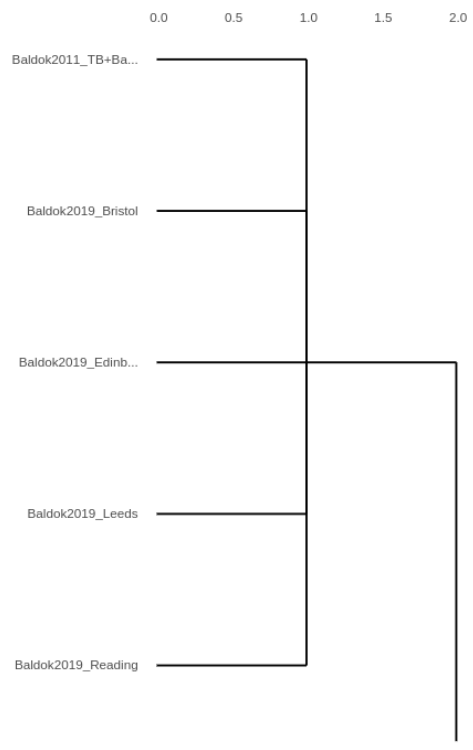
Clustering de réseaux



Application à Baldock et al., 2011, 2019 I



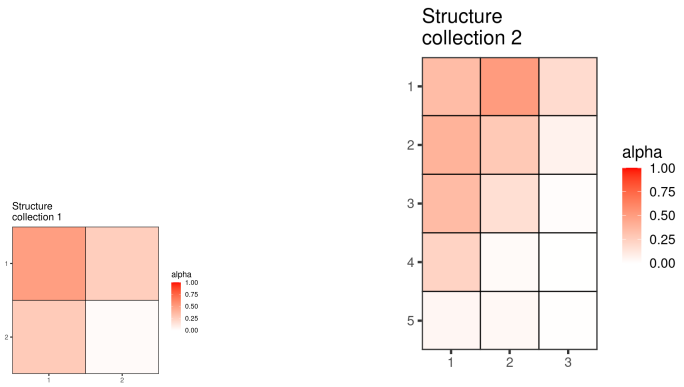
(a) Modèle *iid*,
séparent réseau africain et réseaux anglais



(b) Modèle $\pi\rho$,
fusionnent réseaux africain et anglais

Figure 4 – Partitionnement des réseaux de Baldock et al., 2011, 2019

Application à Baldock et al., 2011, 2019 II



(a) Modèle *iid*,
séparent réseau africain et réseaux anglais

(b) Modèle $\pi\rho$,
fusionnent réseaux africain et anglais

Figure 5 – Structures détectées pour les réseaux de Baldock et al., 2011, 2019

Conclusion et perspectives

Capacités

- 4 modèles dont 3 qui ont une flexibilité sur au moins une des dimensions (adaptabilité aux données).
- Détecter structures classiques et moins classique de façon agnostique.
- Partitionner un ensemble de réseaux selon leurs structures.

Perspectives

- Investiguer stabilité face à l'aléatoire et aux *optima* locaux.
- Preuve d'identifiabilité du modèle $\pi\rho$.
-

Package et applications

- Intégration au package `colSBM` et publication CRAN
- Intégrer possibilité d'un critère supplémentaire pour le clustering
- Appliquer clustering données de Pichon et al., 2024 ; Doré et al., 2021
-

Merci pour votre attention !

Bibliographie I

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

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

Daudin, J.-J., Picard, F., & Robin, S. (2008).A mixture model for random graphs. *Stat Comput*, *18*(2), 173-183. https://doi.org/10.1007/s11222-007-9046-7

Baldock, K. C. R., Memmott, J., Ruiz-Guajardo, J. C., Roze, D., & Stone, G. N. (2011).Daily temporal structure in African savanna flower visitation networks and consequences for network sampling. *Ecology*, *92*(3), 687-698. https://doi.org/10.1890/10-1110.1

Bibliographie II

Baldock, K. C. R., Goddard, M. A., Hicks, D. M., Kunin, W. E., Mitschunas, N., Morse, H., Osgathorpe, L. M., Potts, S. G., Robertson, K. M., Scott, A. V., Staniczenko, P. P. A., Stone, G. N., Vaughan, I. P., & Memmott, J. (2019).A systems approach reveals urban pollinator hotspots and conservation opportunities. *Nat Ecol Evol*, *3*(3), 363-373. https://doi.org/10.1038/s41559-018-0769-y

Pichon, B., Le Goff, R., Morlon, H., & Perez-Lamarque, B. (2024).Telling mutualistic and antagonistic ecological networks apart by learning their multiscale structure. *Methods in Ecology and Evolution*, *15*(6), 1113-1128. https://doi.org/10.1111/2041-210X.14328

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

Bibliographie des annexes I