

Entropie, méthodes Cluster Variational et approximations de processus stochastiques sur graphe

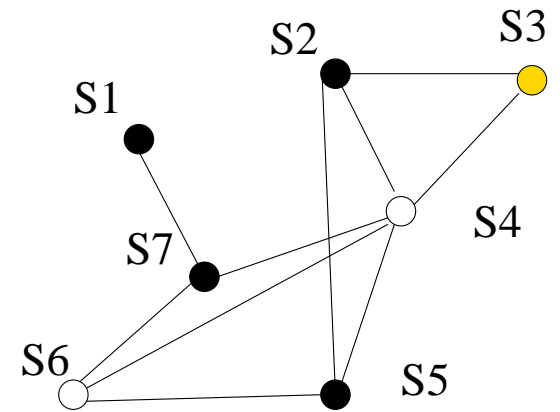
Nathalie Peyrard, dept. MIA - INRA - Toulouse

Alain Franc, dept. EFPA - INRA - Bordeaux

But des Cluster Variational Methods



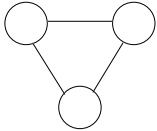
- Approximation de l'entropie d'un système complexe :

- un graphe d'interaction $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, $|\mathcal{V}| = n$
- un champ aléatoire $S = (S_1, \dots, S_n)$
- $S_i \in \Omega_g$ discret
- loi jointe $\mathbb{P}(S = s)$
- p_{pt} , p_{paire} , p_{Δ} , ...
- entropie $\mathcal{H}(\mathbb{P}(S)) = \sum_{s \in \Omega_g} \mathbb{P}(S = s) \log \mathbb{P}(S = s)$

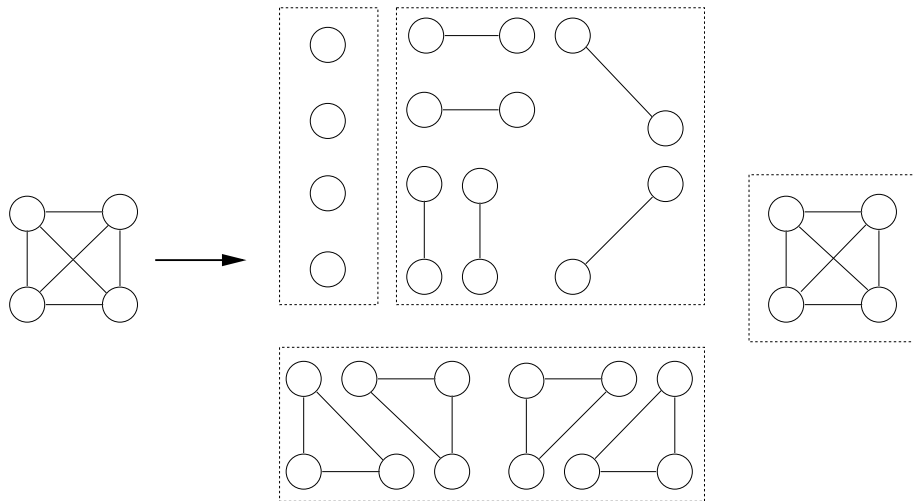


Décomposition de la loi jointe

Formule générale : $\forall A \subset \mathcal{G}, \quad \mathbb{P}(s_A) = \prod_{B \subset A} C_B(s_B)$

$p_{pt} = C_{pt}$	
$p_{paire} = C_{pt}^2 C_{paire}$ $\Rightarrow C_{paire} = \frac{p_{paire}}{p_{pt}^2}$	
$p_{\Delta} = C_{pt}^3 C_{paire}^3 C_{\Delta}$ $p_{\Delta} = \frac{p_{paire}^3}{p_{pt}^3} C_{\Delta}$	

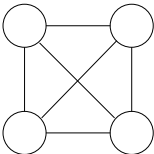
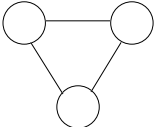
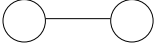

Décomposition de la loi jointe



$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(S_A) &= p_{pt}^4 C_{paire}^6 C_{\Delta}^4 C_{\square} \\
 &= \frac{p_{paire}^6}{p_{pt}^8} C_{\Delta}^4 C_{\square} \\
 &= \frac{p_{\Delta}^4 p_{pt}^4}{p_{paire}^6} C_{\square}
 \end{aligned}$$

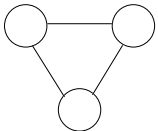


Approximation de la loi jointe

Principe : $C_B = 1$ pour tout B non inclus dans un cluster maximal

Cluster maximal	Approximation de $\mathbb{P}(s_1, \dots, s_n)$
	$p_{pt}^4 C_{pair}^6 C_{\Delta}^4 C_{\square}$
	$\frac{p_{\Delta}^4 p_{paire}^4}{p_{pt}^6}$
	$\frac{p_{paire}^6}{p_{pt}^8}$
	p_{pt}^4

Approximation de l'entropie

Principe : somme de entropies des clusters maximaux \pm les entropies des sous clusters comptés en trop

Cluster maximal	Approximation de $\mathbb{P}(s_1, \dots, s_n)$	Approximation de l'entropie
	$\frac{p_{\Delta}^4 p_{pt}^4}{p_{paire}^6}$	$4\mathcal{H}(p_{\Delta}) - 6\mathcal{H}(p_{paire}) + 4\mathcal{H}(p_{pt})$
	$\frac{p_{paire}^6}{p_{pt}^8}$	$6\mathcal{H}(p_{paire}) - 8\mathcal{H}(p_{pt})$
	p_{pt}^4	$4\mathcal{H}(p_{pt})$

Justification (?)

Maximum d'entropie sous contrainte de consistance avec les lois sur les singletons :

- Problème

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbb{P}(S)) \quad \text{maximum} \\ \text{sous} \quad \left| \begin{array}{l} p_{pt}(S_i = a) = \rho_i(a) \quad \forall i, \forall a \\ \sum_s \mathbb{P}(S = s) = 1 \end{array} \right. \end{array} \right\}$$

- Solution: **Champ Moyen**

$$\mathbb{P}(S = s) = \prod_i \rho_i(s_i)$$

→ CVM avec cluster maximal = point

Justification (?)

Maximum d'entropie pour un graphe triangle sous contrainte de consistence avec les lois sur les paires :

- Problème

$$\left| \begin{array}{l} \mathcal{H}(\mathbb{P}(S)) \text{ maximum} \\ \text{sous} \end{array} \right| \left| \begin{array}{l} p_{\text{paire}}(S_i = a, S_j = b) = \rho_{ij}(a, b) \quad \forall i, j \\ \forall a, b \end{array} \right.$$

- Solution : Bethe/Kirkwood

$$\mathbb{P}(S = s) = \frac{\rho_{ij}(s_i, s_j) \rho_{jk}(s_j, s_k) \rho_{ki}(s_k, s_i)}{\rho_i(s_i) \rho_j(s_j) \rho_k(s_k)}$$

→ CVM avec cluster maximal = paire

Questions ?

- Peut-on étendre cette équivalence entre CVM et maximum d'entropie?
- Peut-on exprimer le type d'hypothèse sous-jacente à l'approximation CVM?

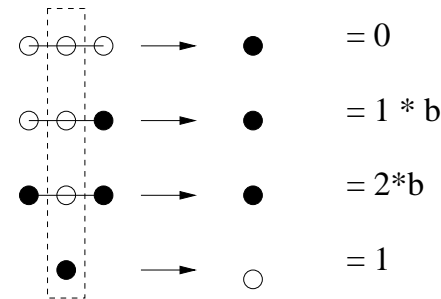
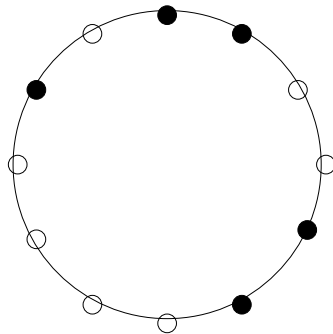
Que fait-t'on avec les CVM?

CVM utilisés pour

- définir une forme de fermeture dans la hiérarchie des lois
- chercher la meilleure approximation d'une loi complexe connue parmi une famille de lois de forme plus simple

Approximation de la dynamique du processus de contact

- Modèle spatio-temporel



- Dynamique exacte et dynamique approchée

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dp_{pt}}{dt} = F_1(p_{pt}, p_{paire}) \\ \frac{dp_{paire}}{dt} = F_2(p_{paire}, p_{\Delta}) \\ \dots \\ \frac{dp_{n-1}}{dt} = F_{n-1}(p_{n-1}, p_n) \end{array} \right. \implies \left\{ \begin{array}{l} \frac{dp_{pt}}{dt} = F_1(p_{pt}, p_{paire}) \\ \frac{dp_{paire}}{dt} = \tilde{F}_2(p_{pt}, p_{paire}) \end{array} \right.$$

Entropie et divergence de Kullback-Leibler

- Divergence de Kullback-Leibler entre deux distributions \mathbb{P} et \mathbb{Q}

$$\text{KL}(\mathbb{Q} \parallel \mathbb{P}) = \mathbb{E}_{\mathbb{Q}} \left[\text{Log} \frac{\mathbb{Q}}{\mathbb{P}} \right] = \mathcal{H}(\mathbb{Q}) - \mathbb{E}_{\mathbb{Q}}[\text{Log} \mathbb{P}]$$

- **Analyse d'images** (Florence, Juliette, Nathalie)

Meilleure approximation, au sens de KL, d'un champ de Markov par un système de variables indépendantes (champ moyen)

$$\mathbb{Q}_i(s_i) = \mathbb{P}(s_i \mid \overline{S_{N(i)}}) \quad (\neq \mathbb{P}(s_i))$$

- **Modèles graphiques** (Yedidia, Freeman et Weiss)

Inférence des lois marginales a posteriori via approximation de Bethe
Calcul exact du min KL pas toujours possible \Rightarrow algorithmes de Belief Propagation

Bibliographie

- Dans Progress of Theoretical Physics Supplement No. 115, 1994
 - Kikuchi, *CVM Entropy Algebra*
 - Ducastelle, *Variational and Mean Field Formulations of the CVM and of the Path Probability Method*
 - Morita, *Formal Structure of the CVM*
- En modèles graphiques
 - Yedidia, Freeman and Weiss, *Bethe free energy, Kikuchi approximations and belief propagation algorithms*, TR-2001-16 May 2001
 - Yedidia, Freeman, and Weiss, *Constructing Free-Energy Approximations and Generalized Belief Propagation Algorithms*, IEEE Transactions on Information Theory, Vol. 51, Issue 7, pp. 2282-2312, July 2005
- Application en écologie
 - *The geometry of ecological interactions: simplifying spatial complexity*, Cambridge Studies in Adaptive Dynamics, Ed. Dieckmann, Law and Metz