Méthodes variationnelles pour l'estimation, l'inférence et la décision dans les modèles graphiques

Nathalie Peyrard

Soutenance d'HDR

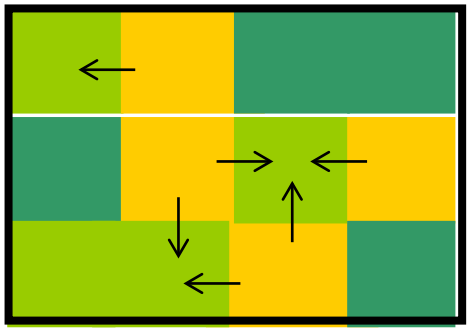
4 octobre 2013

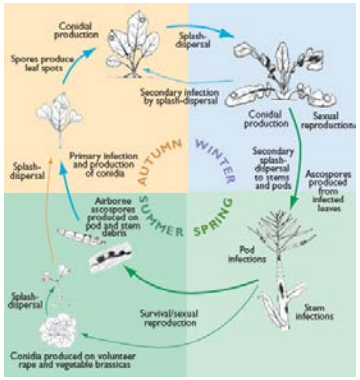
UNIVERSITÉ TOULOUSE 1 CAPITOLE

INRA SCIENCE & IMPACT

MIA TOULOUSE

Gestion collective de variétés résistantes aux pathogènes





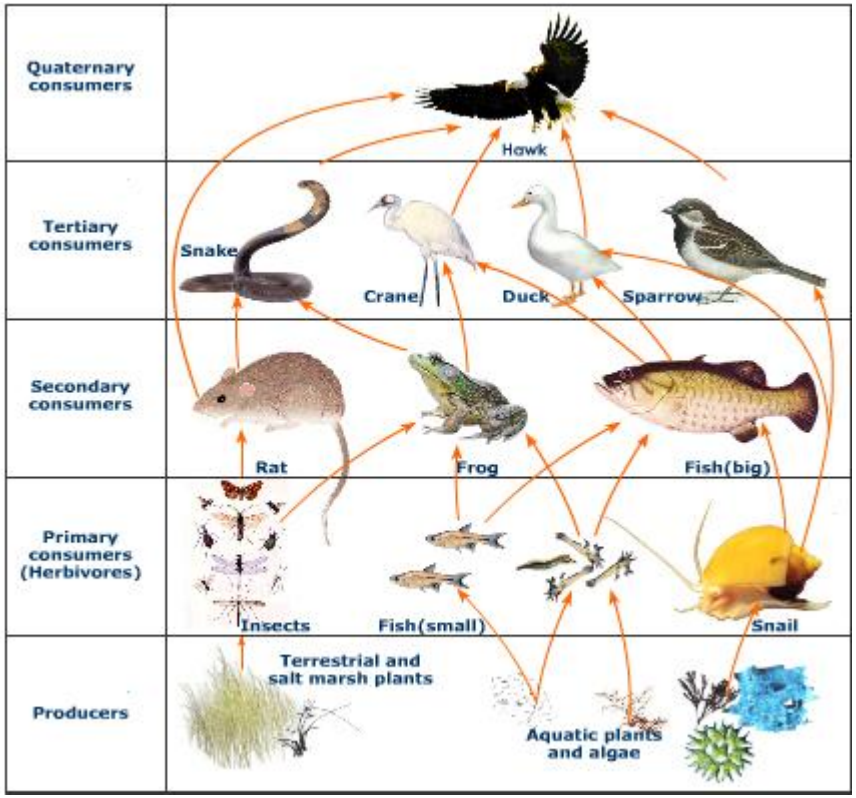
Question : comment répartir dans l'espace et dans le temps les cultivars résistants et non résistants, de sorte à maintenir le rendement et durée de la résistance?

Collaboration : J.-N. Aubertot et R. Sabbadin sur le cas phoma du colza

Echantillonnage spatial des adventices dans une parcelle

Question : où échantillonner dans l'espace pour atteindre un bon compromis qualité de la carte estimée/coût d'échantillonnage?
Collaboration : M. Bonneau (thèse 2009- 2012), S. Gaba, R. Sabbadin

Conservation d'espèces au sein d'un réseau trophique

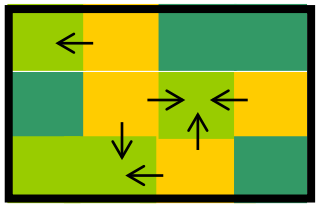


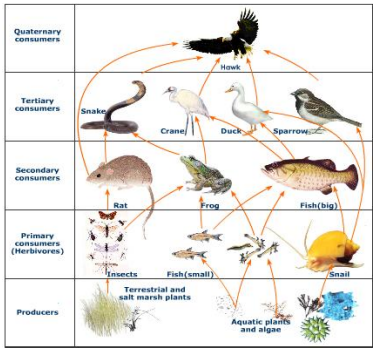
Question : à budget limité, quelles espèces protéger afin de maintenir sur le long terme le plus d'espèces possible?

Collaboration : E. MacDonaldMadden, W. Probert, R. Sabbadin

Deux points communs à ces 3 problèmes

- Le réseau d'interaction … qui peut être représenté par un graphe



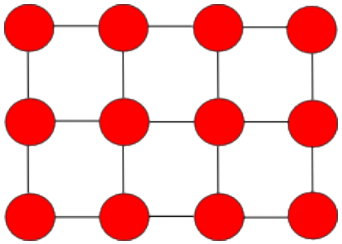
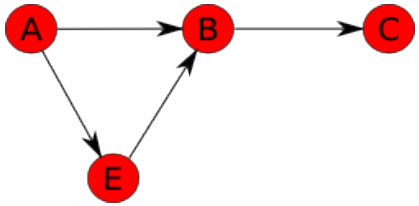
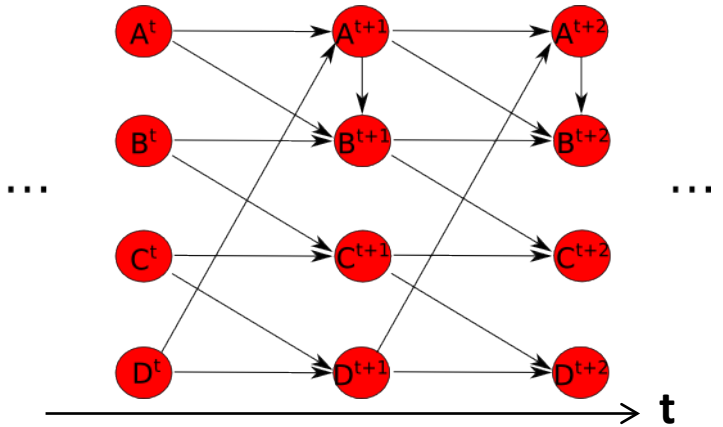
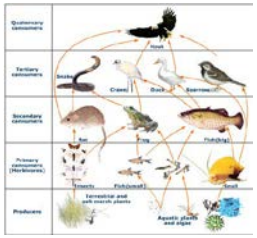
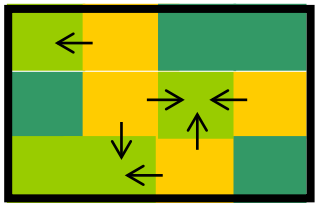
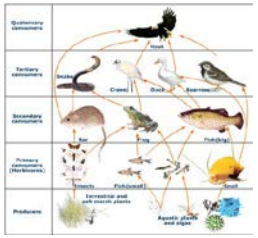


- Stochasticité
  - dispersion des pathogènes et des adventices, identification des adventices et de leur abondance, dynamiques des espèces dans les réseaux trophiques, effet des actions, …

Les modèles graphiques

1. Des modèles pour **prédire ou comprendre** des processus sur graphe

$$P(x_1, \cdots, x_n) \propto \prod_{c \in C} \Psi_c(x_c)$$

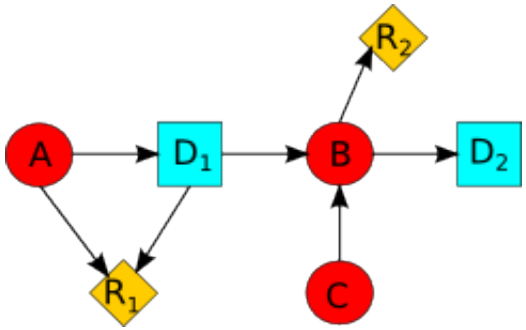
Non orienté	Orienté	Orienté et dynamique
Champ de Markov	*Réseau bayésien*	*Réseau bayésien dynamique*
		
		 

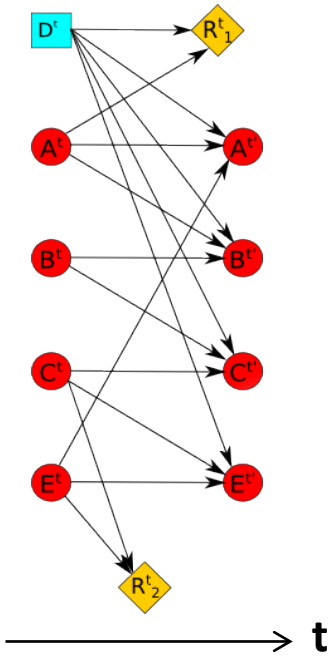
Les modèles graphiques

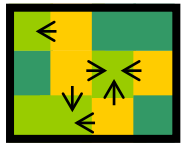
2. Des modèles pour **contrôler / gérer** des processus sur graphe (dynamiques)

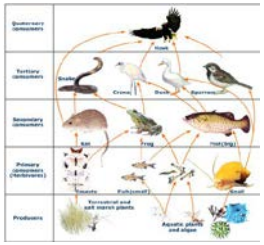
$$P(x_1, \cdots, x_n) \propto \prod_{c \in C} \Psi_c(x_c, action)$$

Horizon fini, temps implicite	Horizon fini ou infini, temps explicite
Diagramme d'influence	*Processus décisionnel de Markov factorisé*









Trois tâches principales pour les MG

- **Estimation (E)** des paramètres du modèle
- **Inférence (I)**: calcul de probabilités
- **Décision (D)**: recherche d'une stratégie optimale

Dans les 3 cas, les méthodes de résolutions exactes ne sont pas applicables pour des problèmes de taille réaliste

Des méthodes de résolution approchées

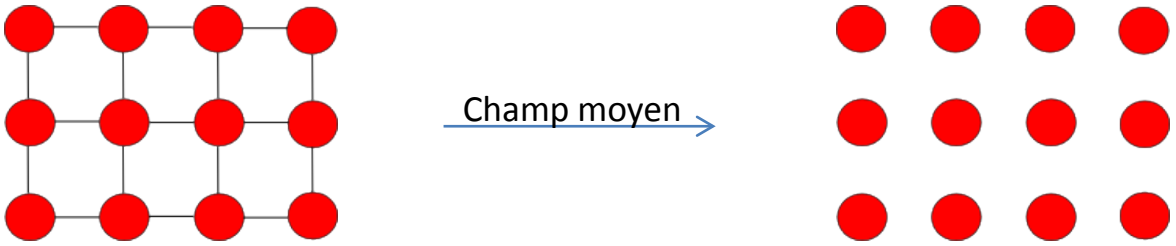
	Approches par simulation	Approches variationnelles
Tâches concernées	E, I, D	E, I *(et très peu en D)*
Avantage	Bonnes propriétés asymptotiques	Rapide *Souvent* de bonne qualité en pratique
Limites	Coûteux en temps de calcul	Pas de garantie théorique sur la qualité de l'approximation

➢ Un projet de recherche autour
des méthodes variationnelles
pour l'estimation, l'inférence et la décision
dans les modèles graphiques

	Contribution	**Application**
Estimation	De nouveaux algorithmes dans le cas de MG à données cachées	Épidémiologie/Agroécologie : cartographie
Inférence	Extension de méthodes variationnelles pour le processus de contact	Epidémiologie : rôle du réseau
Décision	Cadres et algorithmes pour le contrôle et l'échantillonnage dans les PDM factorisés	Epidémiologie/Agroécologie : contrôle et échantillonnage

Et au fait qu'est-ce que c'est les méthodes variationnelles ??

Principe général : remplacer une distribution multidimensionnelle complexe par son meilleur représentant dans une famille plus simple de distributions, au sens de la divergence de Kullback-Leibler.



Origine en mécanique statistique, et maintenant exploitées dans les communautés Machine Learning, Statistique computationnelle, Ecologie théorique

Plusieurs dénominations : cluster variational methods, Kikuchi methods, fermeture de moments, algorithme de propagation de messages…

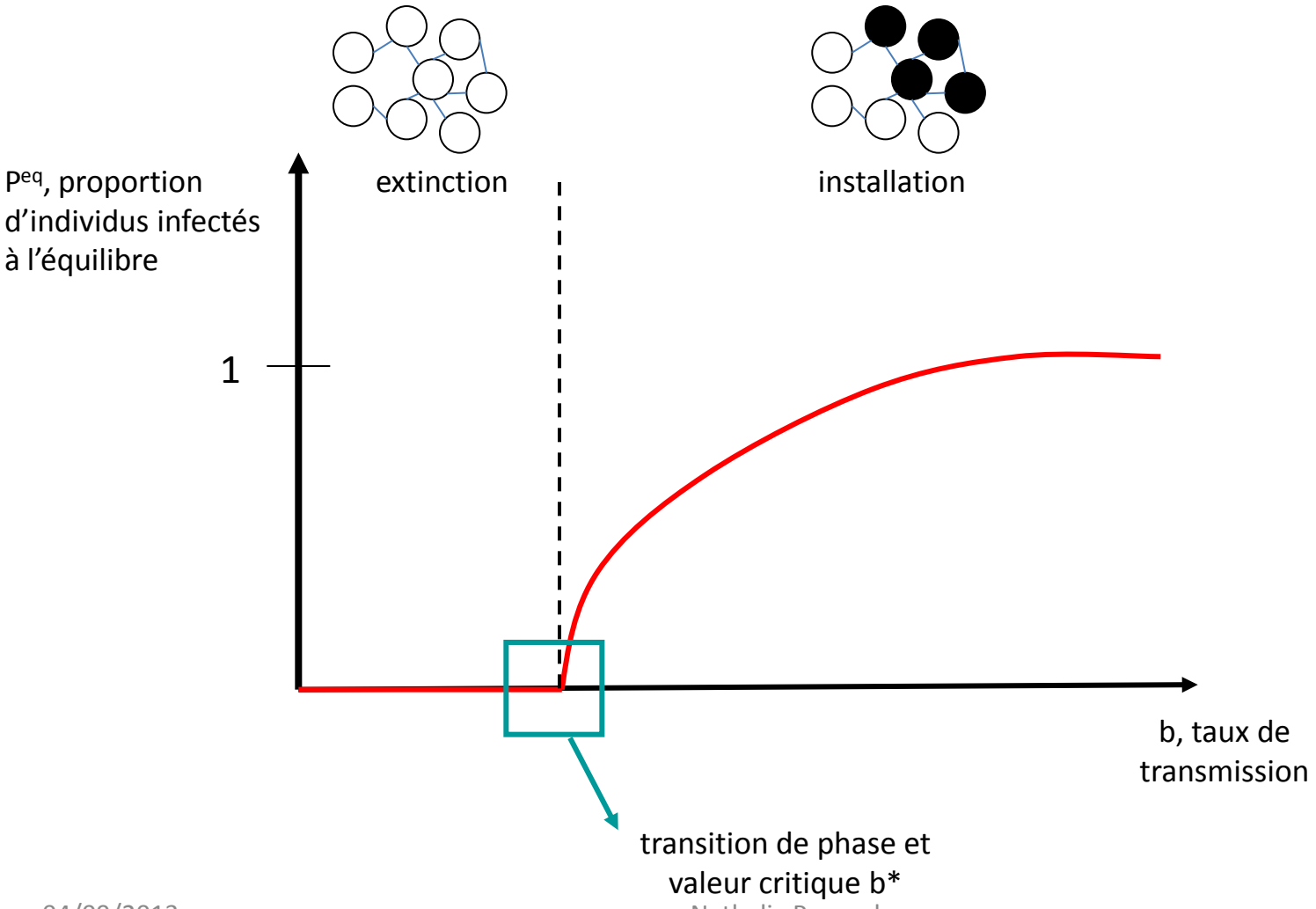
Une amélioration des méthodes variationnelles pour l'inférence dans le modèle de processus de contact

Collaborateurs : Alain Franc (INRA) et Ulf Dieckmann (IIASA)

Publications associées:

- N. Peyrard and A. Franc, Cluster variation approximations for a contact process living on a graph, *Physica A,* 2005.
- N. Peyrard, U. Dieckmann, A. Franc, Long-range correlations improve understanding the influence of network structure on per contact dynamics, *Theoretical Population Biology*, 2008.

Transition de phase en épidémiologie



Estimation de la valeur critique

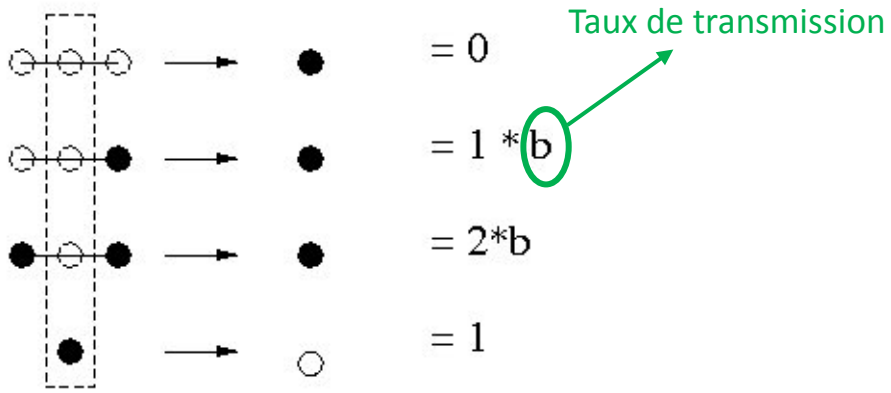
- Pourquoi?
  - Comment contrôler au mieux l'épidémie ?
  - Quelle influence de la structure du graphe ?

- Limites des méthodes variationnelles classiques
  - Mauvaise estimation de la valeur critique
  - Structure du graphe peu prise en compte dans l'approximation

Approche proposée

- Modélisation des dynamiques :

Processus de contact



→ P^{eq}, solution d'un système d'EDO de très grande taille

- Intégration de corrélations longue distance dans les approximations variationnelles classiques de ce modèle et fermeture du système

- Application au cas des graphes à degré homogène

→ prise en compte de nouveaux descripteurs de la structure du graphe dans les équations du système d'EDO réduit

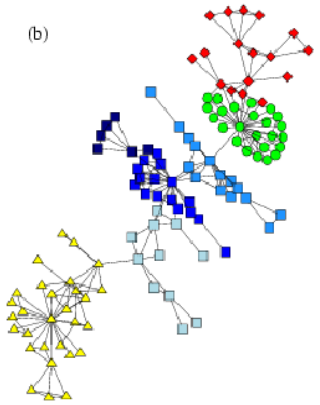
Amélioration de l'estimation de la valeur critique

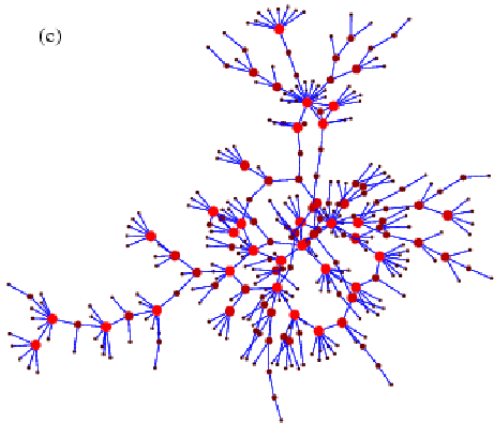
Méthodes variationnelles classiques

Extensions aux corrélations longue distance

Méthode	Estimation de b*
Simulation	0.45
Mean Field	0.25
Pair Approx	0.33
Bethe classical	0.37
Bethe distance 2	0.41
Bethe distance 3	0.42

Perspectives





Etendre la méthode aux cas de graphes avec distribution de degrés quelconques

- Pas de difficulté théorique supplémentaire
- MAIS explosion de la taille du système d'EDO à résoudre

les PDM-G : un cadre pour la décision séquentielle dans l'incertain lorsque état et action sont factorisés

Collaborateurs : R. Sabbadin (INRA)

Publications associées :

- N. Peyrard, R. Sabbadin, Mean Field Approximation of the Policy Iteration Algorithm for Graph-based Markov Decision Processes, *ECAI'06*, 2006.

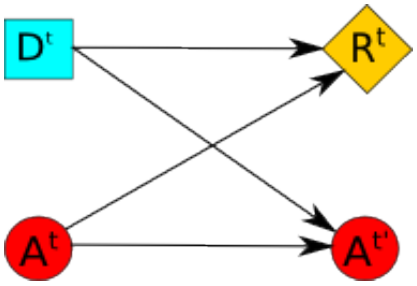
- R. Sabbadin, N. Peyrard, N. Forsell, A framework and algorithms for the local control of spatial processes, *International Journal of Approximate Reasoning*, 2012.

Décision séquentielle dans l'incertain dans le cadre factorisé

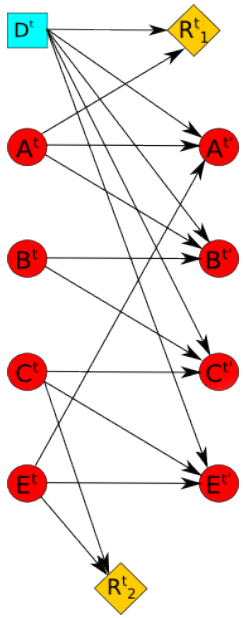
L'existant : 1) les processus décisionnels de Markov factorisés (PDM-F)

- un PDM où la variable suivie est multidimensionnelle

PDM



PDM-F



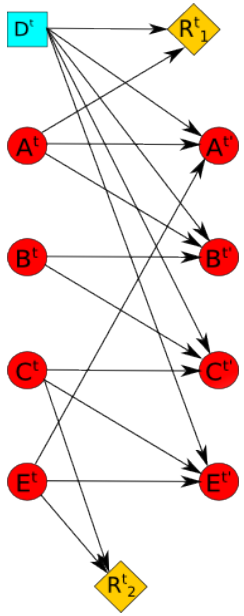
- hypothèse d'une probabilité de transition factorisée (RBD)

Décision séquentielle dans l'incertain dans le cadre factorisé

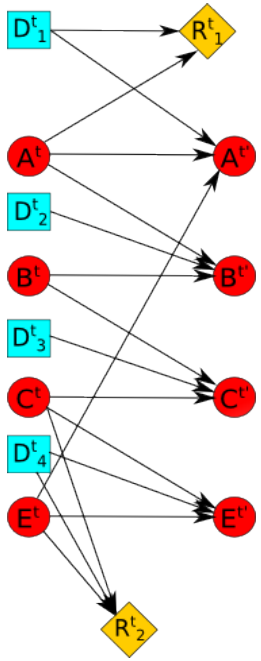
L'existant : 2) les PDMF à actions factorisées (MDP-F-AF)

- un PDM où la variable suivie et l'action sont multidimensionnelles

PDM-F



PDM-F-AF



- pas d'algorithme efficace (exact ou approché) de calcul de la stratégie optimale sauf dans le cas de variables binaires

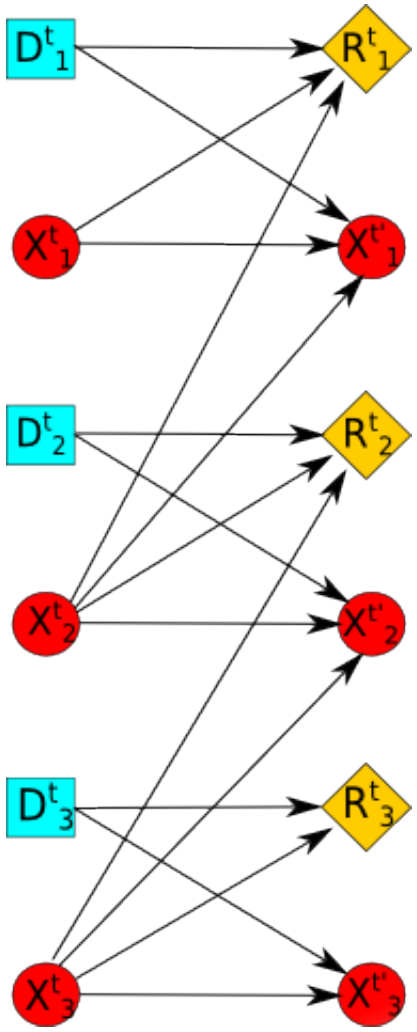
Cadre proposé : les PDM sur graphe

- Un PDM-G est un PDMF-AF particulier
  - Une action et une récompense par variable
  - Une factorisation de la probabilité de transition

$$P\left(x^{t+1} \mid x^t, a^t\right) = \prod_i P\left(x_i^{t+1} \mid x_{N(i)}^t, a_i^t\right)$$

  - Une récompense globale additive

$$R\left(x^t, a^t\right) = \sum_i R\left(x_{N(i)}^t, a_i\right)$$



Calcul de la stratégie optimale dans un PDM-G

- Stratégie : une fonction qui associe à chaque état global une action pour chaque variable
- Valeur d'une stratégie : l'espérance de la somme pondérée des récompenses au cours du temps
- Stratégie optimale : la stratégie de plus grande valeur, quelque soit l'état de départ

Calcul exact trop complexe en pratique :
un algorithme classique de résolution des PDM est
de complexité exponentielle en n!

Une solution pour la résolution approchée

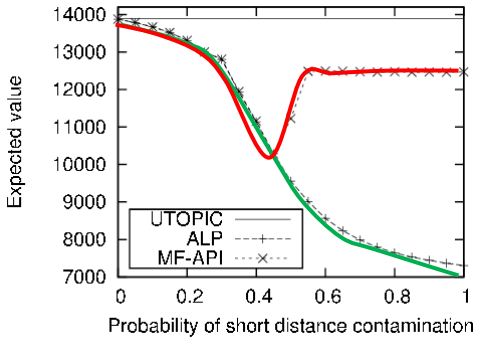
Algorithme d'Itération de la Politique en champ moyen

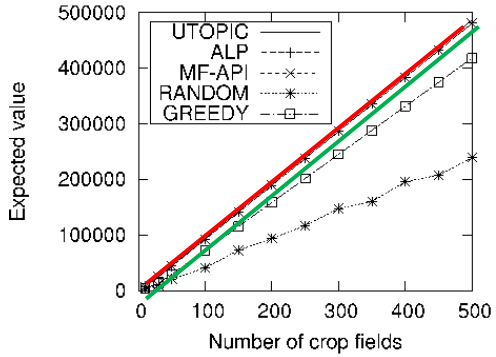
• Principe :
  - restreindre l'espace de recherche à des stratégies locales
  - une approximation en **champ moyen** du RBD associé à une stratégie

• Complexité :
  - quadratique en n (par contre exponentiel en la taille du plus grand voisinage)

•Une toolbox matlab en cours de développement

Comparaison avec une approche basée sur la programmation linéaire



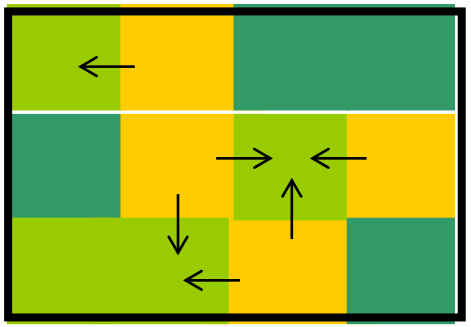


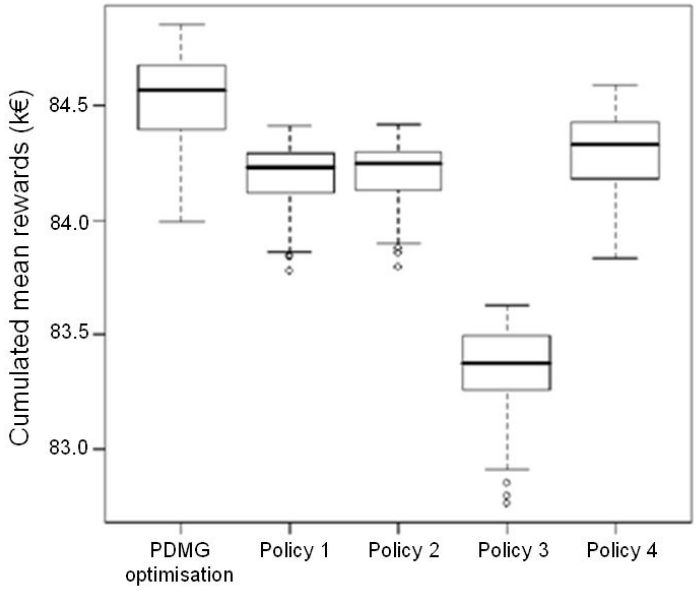
➢ IP en champ moyen

- fournit une stratégie de qualité égale ou meilleure
- estime mieux la valeur d'une stratégie
- est plus lent

que la programmation linéaire

Application à la gestion collective du phoma du colza





Parfois des bons résultats ….
mais pas toujours.

Perspectives méthodologiques

Un cadre et des algorithmes

pour la décision séquentielle factorisée dans l'incertain

- Un cadre :
  - celui des PDMF-AF, moins restrictif que celui des PDMG
- Des algorithmes :
  - dans l'esprit « planning as inference »,
  - au-delà du champ moyen, méthodes variationnelles d'ordre 2

Perspective finalisée

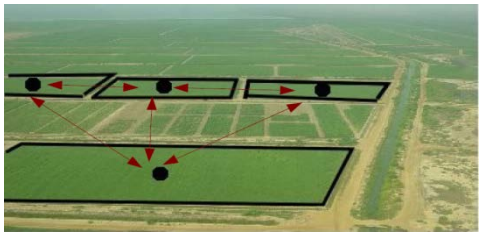
Gestion des services écosystémiques rendus par les adventices

Gérer pour maintenir un compromis

Gérer à l'échelle du paysage

\+

\-



Thèse de J. Radoszycki, ED Math/Info, 2012-2015

Co-encadrement : R. Sabbadin et S. Gaba (INRA Dijon)

LSDP et BP-max : deux heuristiques pour la conception de stratégies adaptatives d'échantillonnage dans les champs de Markov

Collaborateurs : M. Bonneau (thèse 2009-2012), R. Sabbadin (INRA Toulouse), S. Gaba (INRA Dijon)

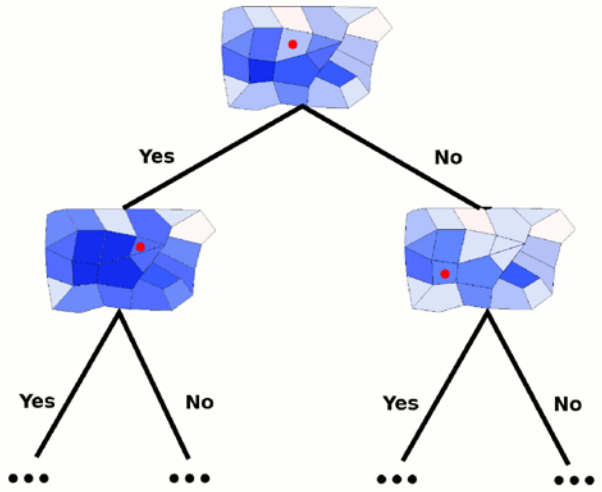
Publications associées :

- N. Peyrard, R. Sabbadin, D. Spring, B. Brook, R. Mac Nally. Model-based adaptive spatial sampling for fire ants invasion map construction, *Statistics and Computing,* 2011
- M. Bonneau, N. Peyrard, R. Sabbadin. A Reinforcement-Learning Algorithm for Sampling Design in Markov Random Fields, *ECAI'12*, 2012.

Comment combiner champ de Markov et échantillonnage pour estimer des cartes ?

$$P(x_1, \cdots, x_n) \propto \prod_{c \in C} \Psi_c(x_c)$$

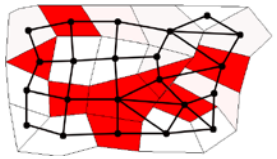
Modèle de champ de Markov



Stratégie **adaptative** d'échantillonnage

Observations sur l'échantillon

Méthode de reconstruction



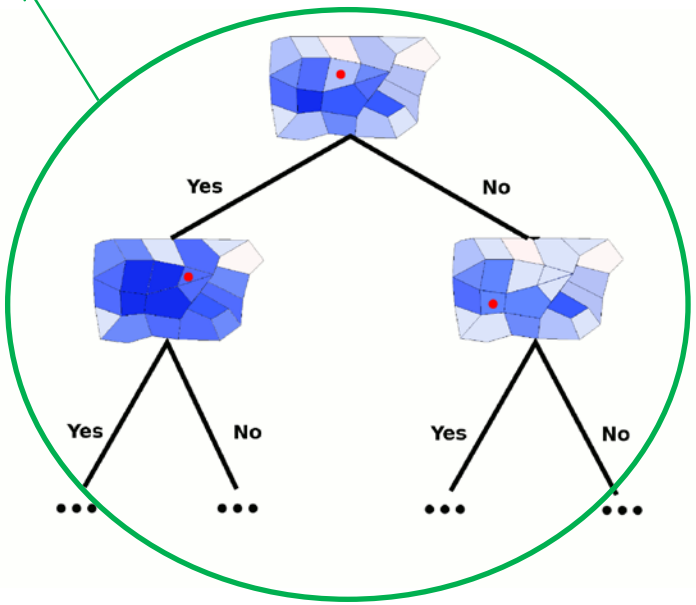
Carte estimée

Comment combiner champ de Markov et échantillonnage pour estimer des cartes ?

$$P(x_1, \cdots, x_n) \propto \prod_{c \in C} \Psi_c(x_c)$$

Modèle de champ de Markov

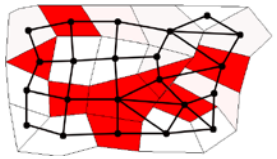
Comment en construire une de bonne qualité?



Stratégie **adaptative** d'échantillonnage

Observations sur l'échantillon

Méthode de reconstruction

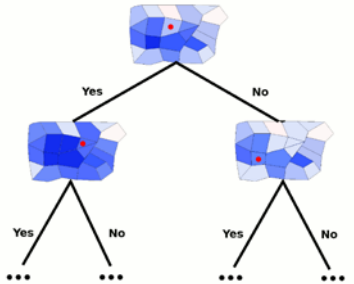


Carte estimée

Une approche basée sur la décision séquentielle dans l'incertain

Valeur d'un échantillon : Maximum Posterior Marginal (MPM)

Espérance, sur toutes les cartes possibles, du nombre de sites bien reconstruits



Valeur d'une stratégie adaptative d'échantillonnage :

Espérance du MPM, calculée sur tous les échantillons atteignables

Le problème :

calculer la stratégie adaptative de valeur optimale et qui respecte des contraintes de coût

➢ c'est un problème d'optimisation de la décision

- modélisable comme un PDM factorisé **de grande taille**

Deux heuristiques pour la résolution approchée

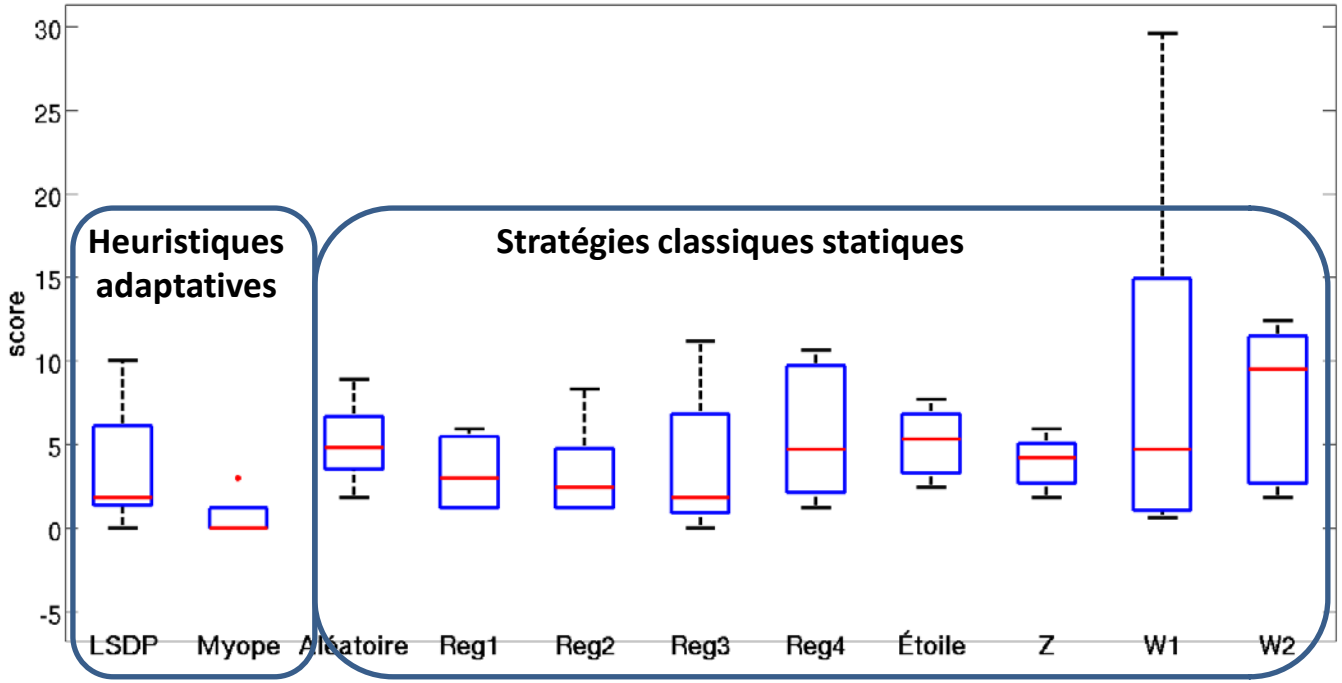
Nom	Principe	+	-
BP-max	- Approximation des dépendances dans le champ de Markov - Algorithme de propagation de messages	Facile à mettre en œuvre	Méthode myope
LSDP	Combine - approximation linéaire, - programmation dynamique - apprentissage par renforcement - algorithme de propagation de messages	Prend en compte les coûts futurs	Quelques boutons à régler

- améliorent les résultats des méthodes classiques d'apprentissage par renforcement
- peuvent traiter de plus gros problèmes

Application à la cartographie d'une espèce adventice

- benchmark de 6 cartes réelles de classes d'abondance
- champs de 13 x 13 quadrats
- taille échantillon = 13,5 % du total

- **NQBC** = nombre de quadrats bien classés
- **Score** = NQBC(best strat) – NQBC(strat)



Perspectives

- Échantillonnage spatio-temporel

  Ce que l'on veut cartographier évolue dans le temps

- Nos heuristiques sur des drones !!

  collaboration avec R. Sabbadin et F. Teichteil (ONERA)

Les méthodes variationnelles pour les modèles graphiques : BILAN

- Estimation/Inférence : les MV de plus en plus présentes
- Décision : les MV se démocratisent (planning as inference)
- Résultats théoriques : toujours anecdotiques
- Retour vers la simulation ? Intérêt de combiner les approches par simulation et variationnelles (LSDP, VBEM)

La suite … Décision dans les modèles graphiques

Décider pour acquérir de la connaissance

- Echantillonnage adaptatif d'un processus spatio-temporel

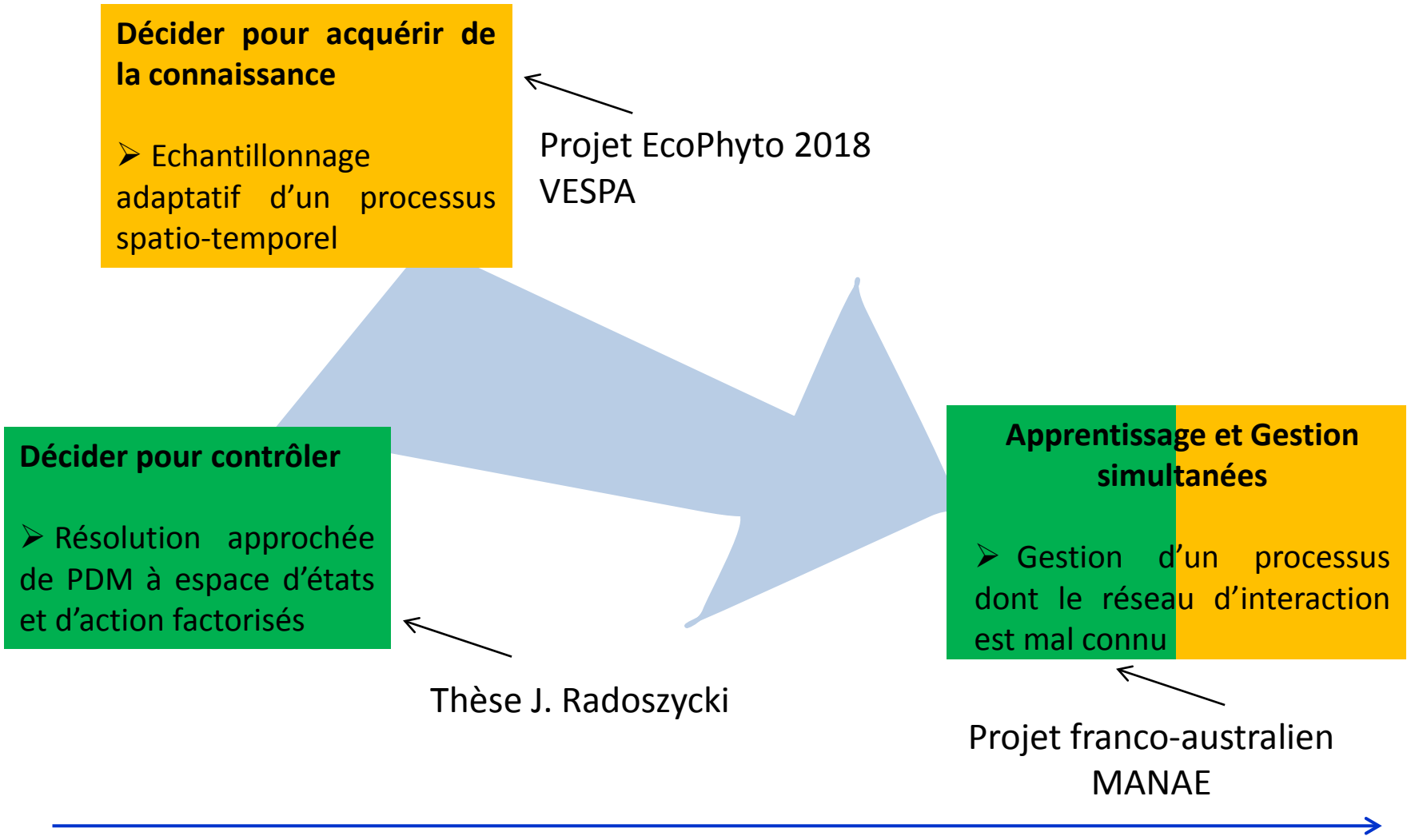
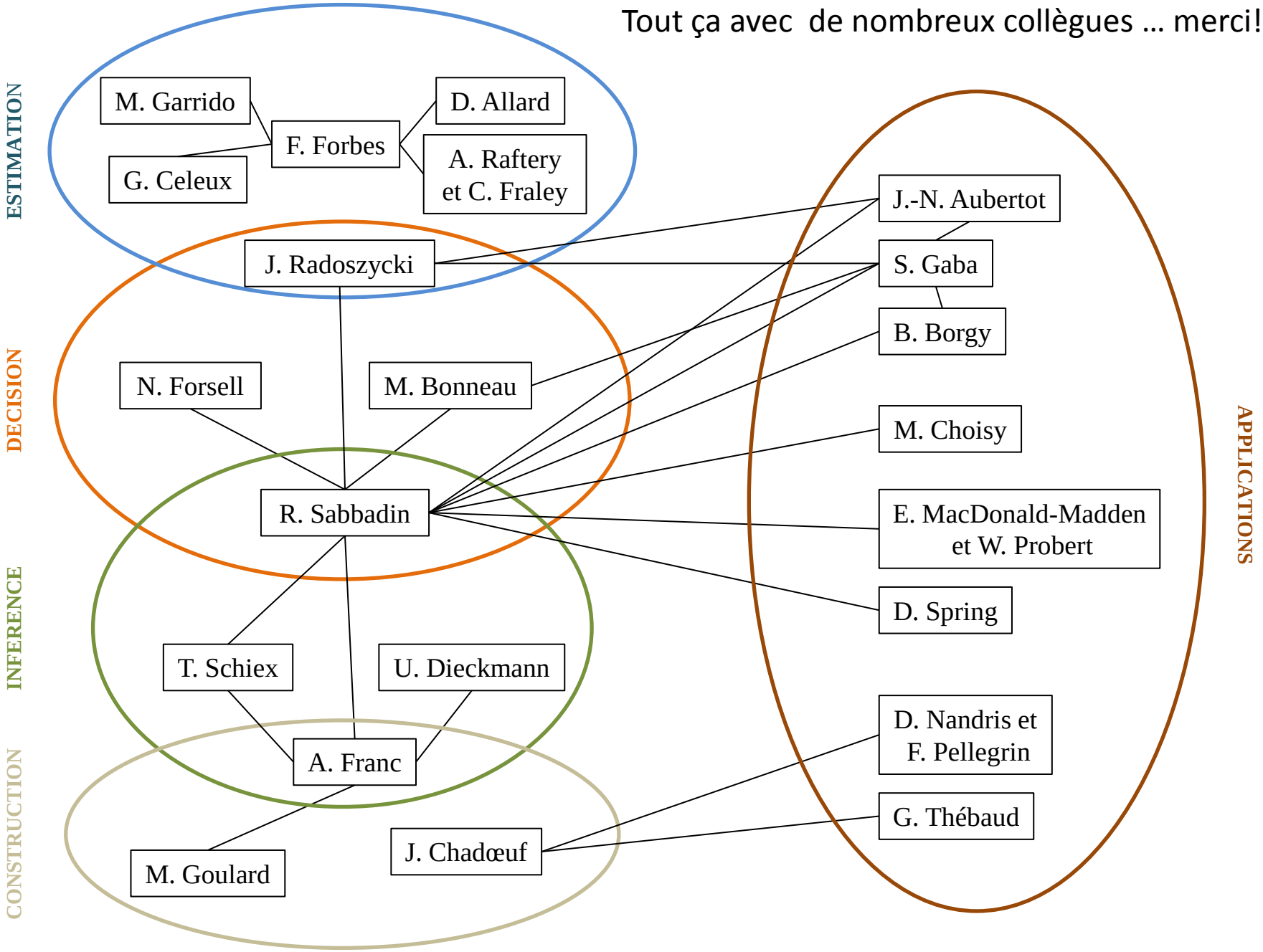
Décider pour contrôler

- Résolution approchée de PDM à espace d'états et d'action factorisés

Apprentissage et Gestion simultanées

- Gestion d'un processus dont le réseau d'interaction est mal connu

La suite … des points de départ



Tout ça avec de nombreux collègues … merci!