

Programmation d'une Intelligence Artificielle : arbres ou apprentissage automatique Laplacien de Graphe.

Paul Mangold

L3 MIASHS

05 Mars 2021

Un Problème de Valeurs...

Un Problème de Valeurs...

Des matrices, encore des matrices

La dernière fois, on s'était intéressé-es à la matrice d'adjacence :

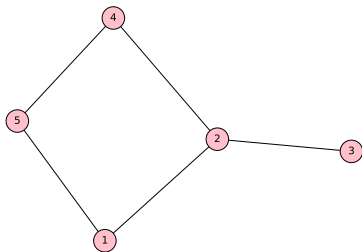


Figure: Graphe

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

Figure: Matrice d'Adjacence

Aujourd'hui on va regarder une façon de représenter notre graphe sous forme matricielle.

Un Problème de Valeurs...

Un Graphe Incomplet

Avant de définir cette matrice, intéressons nous à un petit problème.

À chaque sommet s du graphe, on associe une valeur v_s .

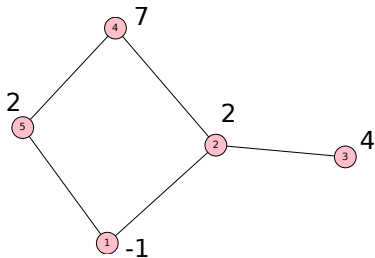


Figure: Graphe

$$v_1 = -1$$

$$v_2 = 2$$

$$v_3 = 4$$

$$v_4 = 7$$

$$v_5 = 2$$

Figure: Valeurs de v

Un Problème de Valeurs...

Un Graphe Incomplet

Imaginons qu'il nous manque certaines de ces valeurs...

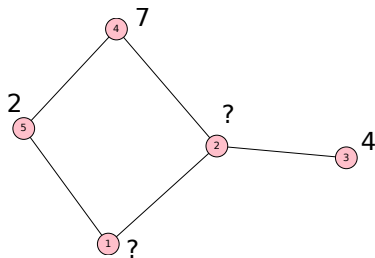


Figure: Graphe

$$v_1 = ?$$

$$v_2 = ?$$

$$v_3 = 4$$

$$v_4 = 7$$

$$v_5 = 2$$

Figure: Valeurs de v

Comment faire pour trouver des valeurs qui marchent bien ?

Un Problème de Valeurs...

Calcul de Moyennes

Première idée :

*on donne à chaque sommet la valeur moyenne
de celles de ses voisins.*

Problème : les voisins peuvent aussi avoir des valeurs
manquantes...

→ on peut mettre à jour itérativement ces valeurs jusqu'à ce que
les valeurs arrêtent de bouger.

Revenons au calcul itératif de moyenne.

Supposons que l'on a n réels $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, posons :

$$\bar{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} \left\{ f(x) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x - x_i)^2 \right\}.$$

Alors la dérivée de f est :

$$f'(x) = \sum_{i=1}^n x - x_i.$$

Un Problème de Valeurs...

Calcul de Moyennes

f est convexe donc son minimum est atteint pour $f'(x) = 0$.

On peut donc choisir $\bar{x}$ tel que $f'(\bar{x}) = 0$, c'est à dire

$$\sum_{i=1}^n \bar{x} - x_i = 0.$$

C'est à dire :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i,$$

c'est bien la moyenne des x_i !

On a donc exprimé la recherche de moyenne comme un problème de minimisation :

$$\bar{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} \left\{ f(x) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x - x_i)^2 \right\}.$$

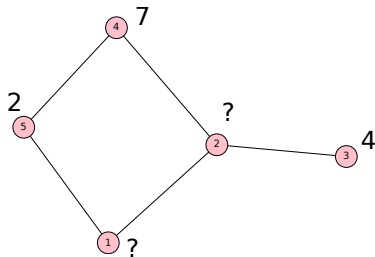
Question : que se passe-t-il si on cherche plusieurs moyennes en même temps ?

→ c'est ce qu'on voulait faire sur notre graphe !

Un Problème de Valeurs...

Revenons à notre Graphe

En effet, on a besoin de chercher conjointement deux moyennes :



$$v_1 = ?$$

$$v_2 = ?$$

$$v_3 = 4$$

$$v_4 = 7$$

$$v_5 = 2$$

Figure: Valeurs de v

Un Problème de Valeurs...

Revenons à notre Graphe

Pas de problème, on va chercher toutes les moyennes à la fois :

$$v = \arg \min_{v \in \mathbb{R}^n} \left\{ L(v; G) := \frac{1}{2} \sum_{s \in V} \sum_{(s, s') \in E} (v_s - v_{s'})^2 \right\},$$

tel que pour certains sommets s , la valeur v_s est fixée,

où $G = (V, E)$ est un graphe.

→ Oui mais comment trouver ces valeurs ?

Un Problème de Valeurs...

Revenons à notre Graphe

Calculons la dérivée de cette fonction par rapport à v_s :

$$\nabla_{v_s} L(v; G) = \begin{cases} 2 \sum_{s, s' \in E} v_s - v_{s'}, & \text{si } v_s \text{ n'est pas fixé,} \\ 0, & \text{si } v_s \text{ est fixé.} \end{cases}$$

Cela va nous permettre de trouver la solution de notre problème.

Un algorithme classique : **descente de gradient**.

- Choisir des valeurs initiales v_0 .
- Pour $t = 1$ à $T - 1$:

$$v_{t+1} = v_t - \eta \nabla L(v; G).$$

- Renvoyer v_T .

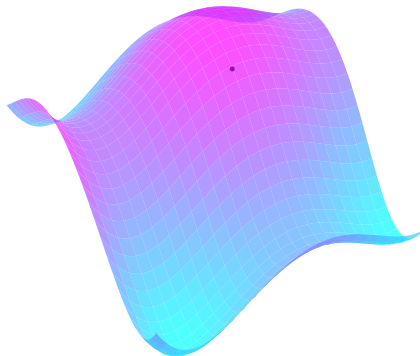
Où

- T est le nombre d'itérations ;
- $\eta > 0$ est le learning rate.

Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient

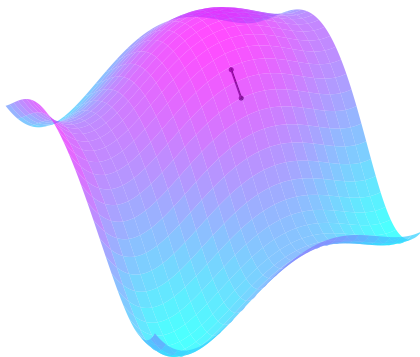
Choisir v_0 :



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient

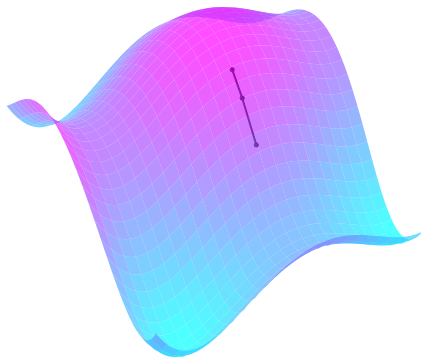
$$v_1 = v_0 - \eta \nabla L(v_0; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient

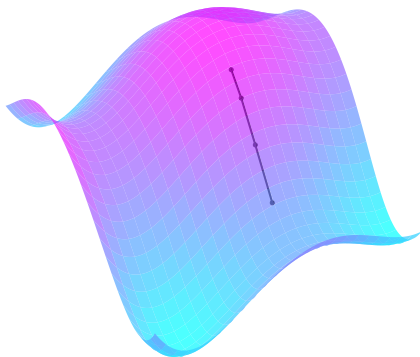
$$v_2 = v_1 - \eta \nabla L(v_1; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient

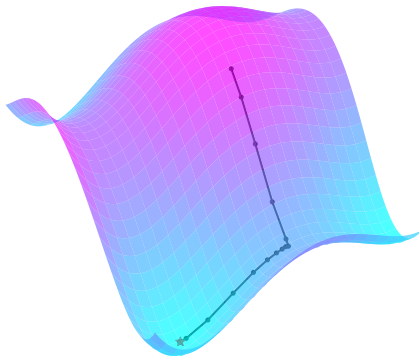
$$v_3 = v_2 - \eta \nabla L(v_2; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient

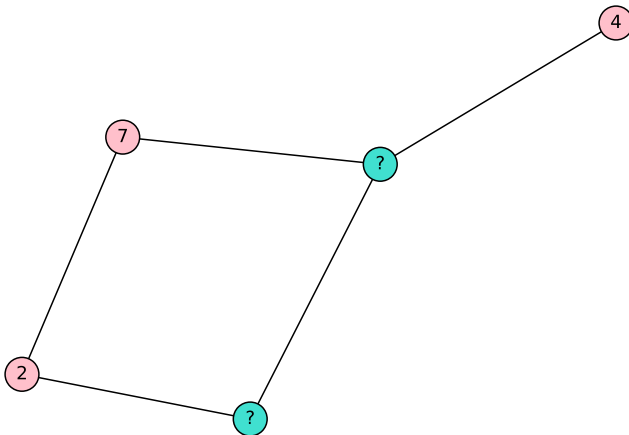
Jusqu'à convergence :



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

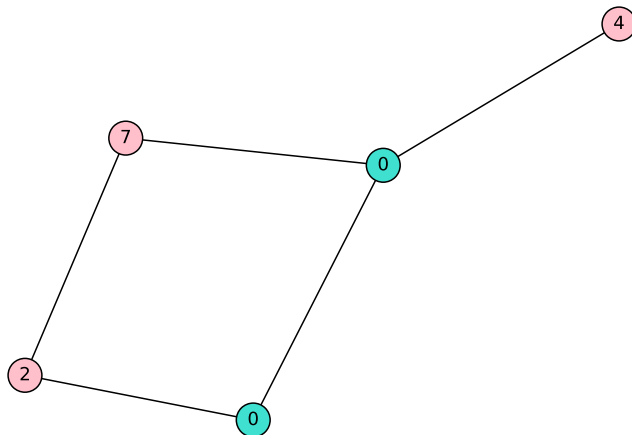
Revenons à notre graphe :



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

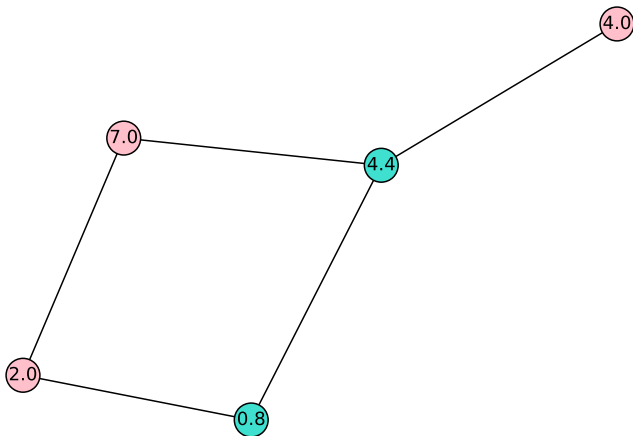
On initialise les valeurs manquantes à 0 :



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

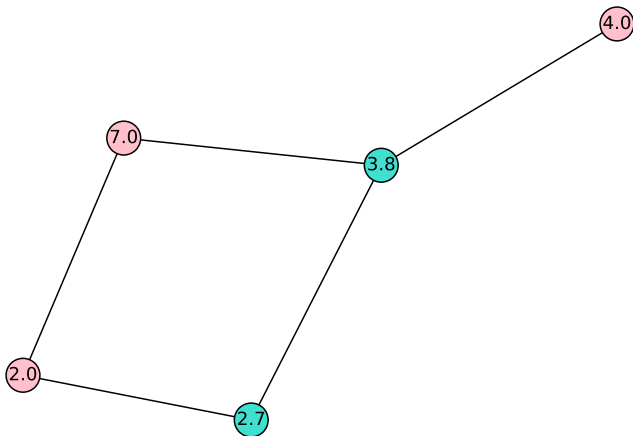
$$v_1 = v_0 - \eta \nabla L(v_0; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

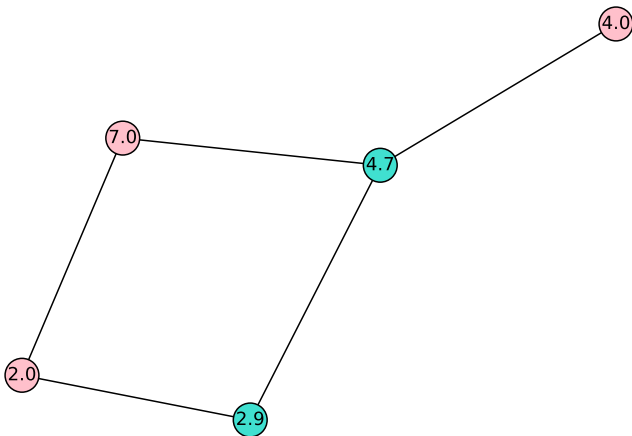
$$v_2 = v_1 - \eta \nabla L(v_1; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

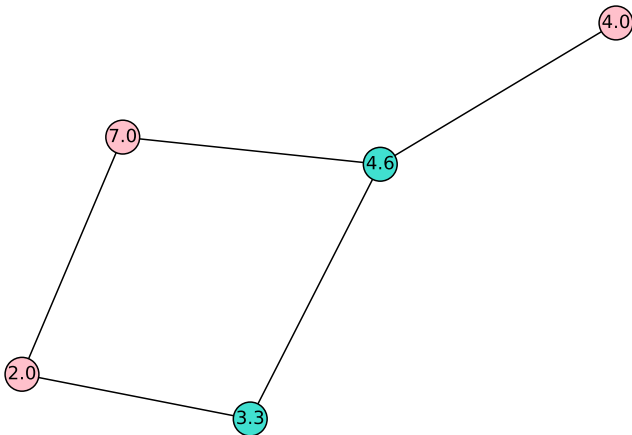
$$v_3 = v_2 - \eta \nabla L(v_2; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

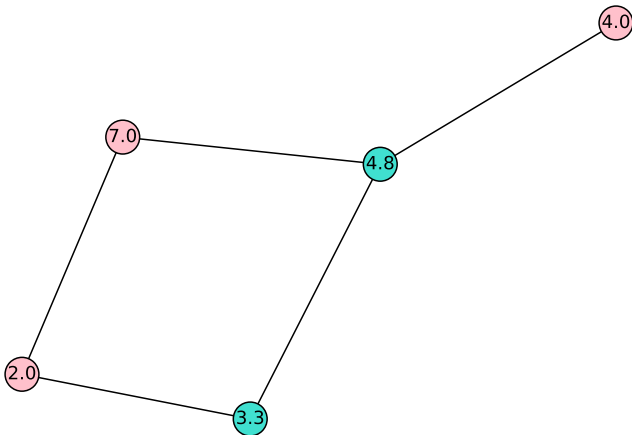
$$v_4 = v_3 - \eta \nabla L(v_3; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

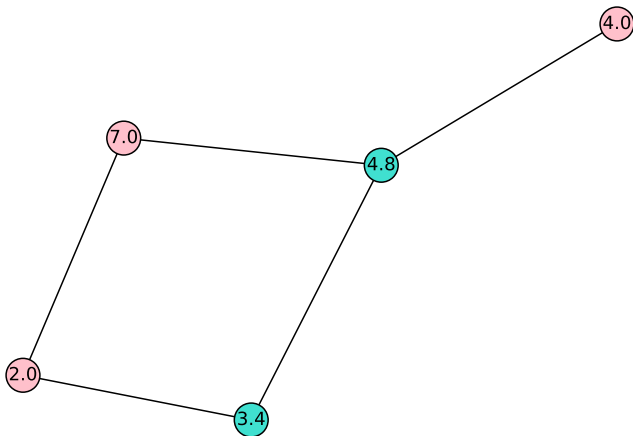
$$v_5 = v_4 - \eta \nabla L(v_4; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

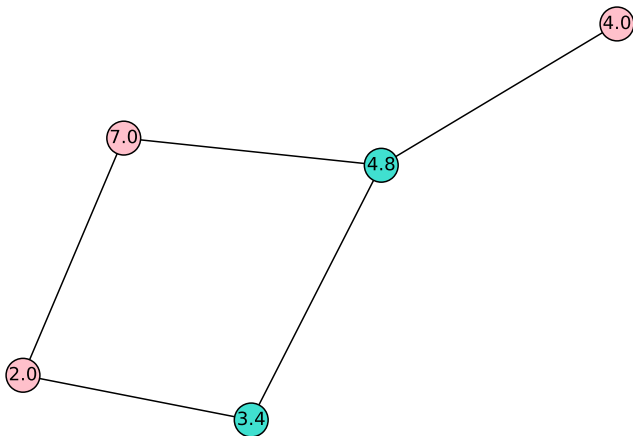
$$v_6 = v_5 - \eta \nabla L(v_5; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

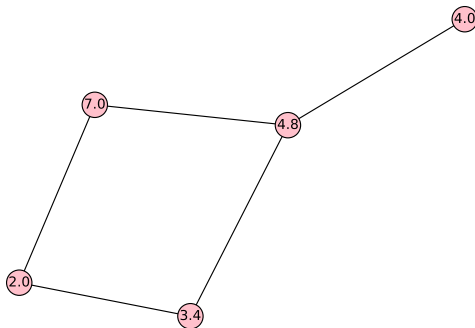
$$v_7 = v_6 - \eta \nabla L(v_6; G)$$



Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

À la fin, on a trouvé nos valeurs :



→ les points dont les valeurs manquaient ont bien comme valeur la valeur moyenne de leurs voisins.

Un Problème de Valeurs...

Descent de Gradient : Application À Notre Graphe

On va voir en TP comment on peut se servir de ce principe pour dessiner des graphes !

Quel Rapport avec les Matrices ?

Quel Rapport avec les Matrices ?

On A Résolu un Petit Problème d'Optimisation

Mais on avait promis de définir une autre matrice !

En fait on vient de résoudre ce problème :

$$v = \arg \min_{v \in \mathbb{R}^n} \left\{ L(v; G) := \frac{1}{2} \sum_{s \in V} \sum_{(s, s') \in E} (v_s - v_{s'})^2 \right\},$$

tel que pour certains sommets s , la valeur v_s est fixée,

Quel Rapport avec les Matrices ?

Sous Forme Matricielle

$$v = \arg \min_{v \in \mathbb{R}^n} \left\{ L(v; G) := \frac{1}{2} \sum_{s \in V} \sum_{(s, s') \in E} (v_s - v_{s'})^2 \right\},$$

tel que pour certains sommets s , la valeur v_s est fixée,

On peut écrire ce problème sous forme matricielle :

$$L(v; G) = v^T L_G v$$

Mais quelle est cette matrice ?

Quel Rapport avec les Matrices ?

Matrice Laplacienne

Pour notre graphe G , on avait les matrices :

- A : la matrice d'adjacence de G ;
- D : la matrice diagonale dont les coefficients diagonaux sont les degrés des sommets.

Par exemple :

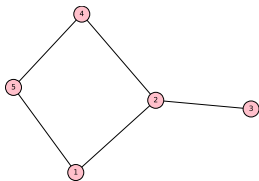


Figure: Graphe

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

Figure: A

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Figure: D

Quel Rapport avec les Matrices ?

Matrice Laplacienne

À partir de ces matrices, on définit la **matrice laplacienne** de G :

$$L_G = D - A$$

Dans notre exemple :

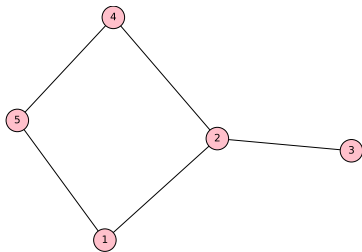


Figure: Graphe

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

Figure: A

Quel Rapport avec les Matrices ?

Matrice Laplacienne

Vérifions que l'on retrouve bien notre problème :

$$\begin{aligned} v^T L_G v &= \sum_{i=1}^n (v^T L_G)_i v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n v_j (L_G)_{j,i} \right) v_i \end{aligned}$$

Quel Rapport avec les Matrices ?

Matrice Laplacienne

On avait $L_G = D - A$ donc :

$$\begin{aligned} v^T L_G v &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n v_j (L_G)_{j,i} \right) v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \left(D_{i,i} v_i + \sum_{j \neq i} v_j A_{j,i} \right) v_i \\ &= \sum_{i=1}^n \left(D_{i,i} v_i^2 - \sum_{(i,j) \in E} v_j v_i \right) \end{aligned}$$

Quel Rapport avec les Matrices ?

Matrice Laplacienne

En réorganisant les termes :

$$\begin{aligned} v^T L_G v &= \sum_{i=1}^n \left(D_{i,i} v_i^2 - \sum_{\substack{(i,j) \in E \\ i < j}} 2 v_j v_i \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{(i,j) \in E} v_i^2 - 2 v_i v_j + v_j^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \in V} \sum_{(i,j) \in E} (v_i - v_j)^2 \end{aligned}$$

C'est bien le problème que l'on avait !

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Dessiner notre Graphe

On cherche à attribuer une position (x_s, y_s) à chaque sommet s du graphe.

Inspirons nous de la physique :

imaginons que chaque arête est un ressort.

La physique nous dit que l'énergie d'un ressort de longueur ℓ est

$$E = \frac{1}{2}\ell^2.$$

Et que les ressorts vont agir de sorte à minimiser l'énergie totale.

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Dessiner notre Graphe

Si deux arêtes ont des positions $v_s = (x_s, y_s)$ et $v_{s'} = (x_{s'}, y_{s'})$, la longueur de l'arête est :

$$\ell_{s,s'} = \sqrt{(x_s - x_{s'})^2 + (y_s - y_{s'})^2} = \|v_s - v_{s'}\|_2.$$

Si l'on reprend notre problème précédent :

$$L(v; G) = \frac{1}{2} \sum_{s \in V} \sum_{(s,s') \in E} \|v_s - v_{s'}\|_2^2 \quad (1)$$

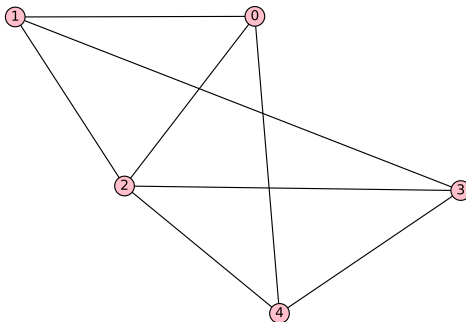
$$= \frac{1}{2} \sum_{s \in V} \sum_{(s,s') \in E} \ell_{s,s'}^2. \quad (2)$$

Donc en minimisant cette fonction, on trouve la position des sommets si les arêtes étaient des ressorts.

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Dessiner notre Graphe

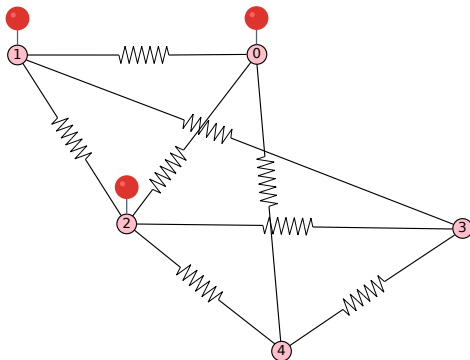
Prenons un graphe d'exemple :



Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Dessiner notre Graphe

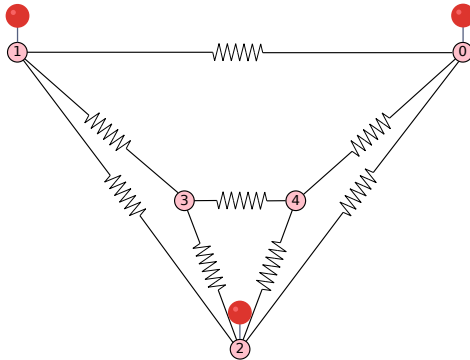
On fixe trois points d'un cycle :



Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Dessiner notre Graphe

Puis on tend les ressorts :



Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Parlons de Spectre

On n'a pas fini de faire parler la matrice L_G .

On peut étudier une matrice en étudiant ses valeurs propres :

Definition

Soit $\lambda \in \mathbb{R}$, $v \in \mathbb{R}^n$ un vecteur **non nul** et $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ une matrice. λ est une **valeur propre** de M et v un **vecteur propre** de M associé à λ si

$$Mv = \lambda v.$$

Ce sont des vecteurs dont M change la longueur mais pas la direction.

L'ensemble des valeurs propres de M est appelé le **spectre** de M .

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Parlons de Spectre

La théorie spectrale des matrices nous dit que :

si M est symétrique, alors elle a n valeurs propres réelles.

La matrice L_G a donc n valeurs propres !

Appelons les $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$.

Que Faire avec la Matrice Laplacienne ?

Parlons de Spectre

Quelques remarques sur ces valeurs propres :

- la plus petite valeur propre de L_G est nulle ;
- en fait, le nombre de valeurs propres nulles de L_G est le nombre de composantes connexes de G ;
- les vecteurs propres associés aux plus petites valeurs propres non nulles donnent une représentation raisonnable du graphe.

TP !

Dans le TP d'aujourd'hui on va :

- calculer des moyennes par descente de gradient ;
- utiliser des ressorts pour dessiner des graphes ;
- compter des composantes connexes ;
- utiliser des vecteurs propres pour dessiner des graphes.