

## CONTEXTE

### Génération des matrices de corrélations partielles

Difficultés :

- ▶ Obtenir des matrices définies positives
- ▶ Imposer des structures sous-jacentes de graphes
- ▶ Obtenir des valeurs comparables à celles observées en pratique

Méthode utilisée : Córdoba et al. [1].

## MODÈLES GRAPHIQUES

### Définition

- $\Sigma \in \mathbb{R}^{p \times p}$  matrice de corrélation
- $\Omega = \Sigma^{-1} = (\omega_{ij})$  matrice de corrélation partielle

Modèle graphique : graphe avec  $p$  nœuds et arêtes  $E$ ,  $E = \{(i, j), i \sim j\}$ ,  
 $i \sim j$ , si  $\omega_{ij} \neq 0$ .

**Objectif** : pour  $E \subset \mathbb{R}^2$  donné, construire  $\Omega^E$  telle que pour tout  $(i, j) \notin E$ ,  $\omega_{ij}^E = 0$ .

**Contrainte de positivité** : décomposition de Cholesky.

- ▶ Idée :  $\Omega = \mathbf{U}\mathbf{U}^\top$  avec  $\mathbf{U} \in \mathcal{U}_1^p$ , où  $\mathcal{U}_1^p$  est l'ensemble des matrices triangulaires supérieures de dimension  $p \times p$ , à diagonale positive et de lignes normalisées à 1.
- ▶ Modèle graphique :  $\mathcal{U}_1^p(G) \subset \mathcal{U}_1^p$  le sous-ensemble où  $u_{ij} = 0$  pour tout  $(i, j) \notin E$ .

On introduit

$$\mathcal{E}^p(G) = \{\mathbf{U}\mathbf{U}^\top \mid \mathbf{U} \in \mathcal{U}_1^p \text{ et } u_{ij} = 0 \text{ si } (i, j) \notin E\} \subset \mathcal{E}^p.$$

### Contrainte du graphe sous-jacent

Supposons que le graphe  $G$  est ordonné,  $1 \prec 2 \prec \dots \prec p$  avec  $\{i \prec j\} \subseteq \text{pa}(i) = \{j : \omega_{ij} \neq 0\}$  les parents du nœud  $i$ . Soient  $\{X_i, i = 1, \dots, p\} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ , alors

$$X_i = \sum_{j \in \text{pa}(i)} \beta_{ij} X_j + \varepsilon_i = \sum_{j \succ i} \beta_{ij} X_j + \varepsilon_i,$$

où  $j \succ i$  si  $j \in \text{pa}(i)$ . En ce cas, Pourhamadi [4] fait remarquer que  $\beta_{ij} = -\frac{u_{ij}}{u_{ii}}$ . Nous avons ainsi

$$\omega_{ij} = 0 \iff u_{ij} = 0.$$

**Conclusion** :  $\mathcal{E}^p(G)$  donne bien des matrices de corrélation partielles associées au graphe  $G$  si le graphe est ordonné.

## ALGORITHME DE SIMULATION

### Méthode de Córdoba et al. [1] :

1. Triangulation du graphe  $G \mapsto \tilde{G}$  rendu cordal.
2. Ordonnement de  $\tilde{G}$ .
3. Simulation de  $\Omega^{\tilde{E}}$  via la décomposition de Cholesky et le changement de variable :

$$\Phi : \begin{matrix} \mathcal{U}_1^p(\tilde{G}) & \longrightarrow & \mathcal{E}^p(\tilde{G}) \\ \mathbf{U} & \longmapsto & \mathbf{U}\mathbf{U}^\top \end{matrix}$$

4. Construction de la matrice  $\mathbf{U}$  finale associée à  $E$  en fixant  $u_{ij} = 0$  si  $(i, j) \in \tilde{E} \setminus E$ . Pour tout  $i = 1, \dots, p$ , orthogonalisation et renormalisation de l'ensemble  $\{(u_{ij})_j, (i, j) \notin E, i \succ j\}$ .

- ▶ Échantillonner uniformément  $\Omega^{\tilde{E}}$  sur  $\mathcal{E}^p(\tilde{G})$  en échantillonnant  $\mathbf{U} \in \mathcal{U}_1^p(\tilde{G})$  à partir d'une densité proportionnelle au jacobien de  $\Phi$  [3] :

$$\det(J\Phi(\mathbf{U})) = 2^p \prod_{i=1}^p u_{ii}^{\text{pa}(i)+1}.$$

- ▶ L'algorithme de Metropolis-Hastings permet, grâce à la factorisation ci-dessus, d'échantillonner de manière indépendante les lignes de  $\mathbf{U}$  à partir d'une densité  $f(\mathbf{u}_i) \propto u_{ii}^i$ .

## RÉPARTITION DES CORRÉLATIONS

### Données simulées

- ▶ 4 structures de graphe : Erdős-Rényi, Barabási-Albert, "Petit-monde" (*small-world*) et Blocs stochastiques à 2 communautés.
- ▶ Différents degré de sparsité :  $d = |E|/p \in \{0.1, 0.5\}$
- ▶ 2 sources d'aléatoire :
  - génération de 50 graphes dans chaque classe;
  - échantillonnage de 10 matrices de corrélation  $\Omega^{\tilde{E}}$  pour chaque graphe.

### Données de neurosciences

- ▶ Données d'IRMf sur 4 rats morts [2].
- ▶ 51 séries temporelles, correspondant chacune à une région cérébrale  $\Rightarrow$  Corrélation empirique entre les coefficients d'ondelettes à l'échelle 4 (fréquence [0.06 ; 0.12] Hz).

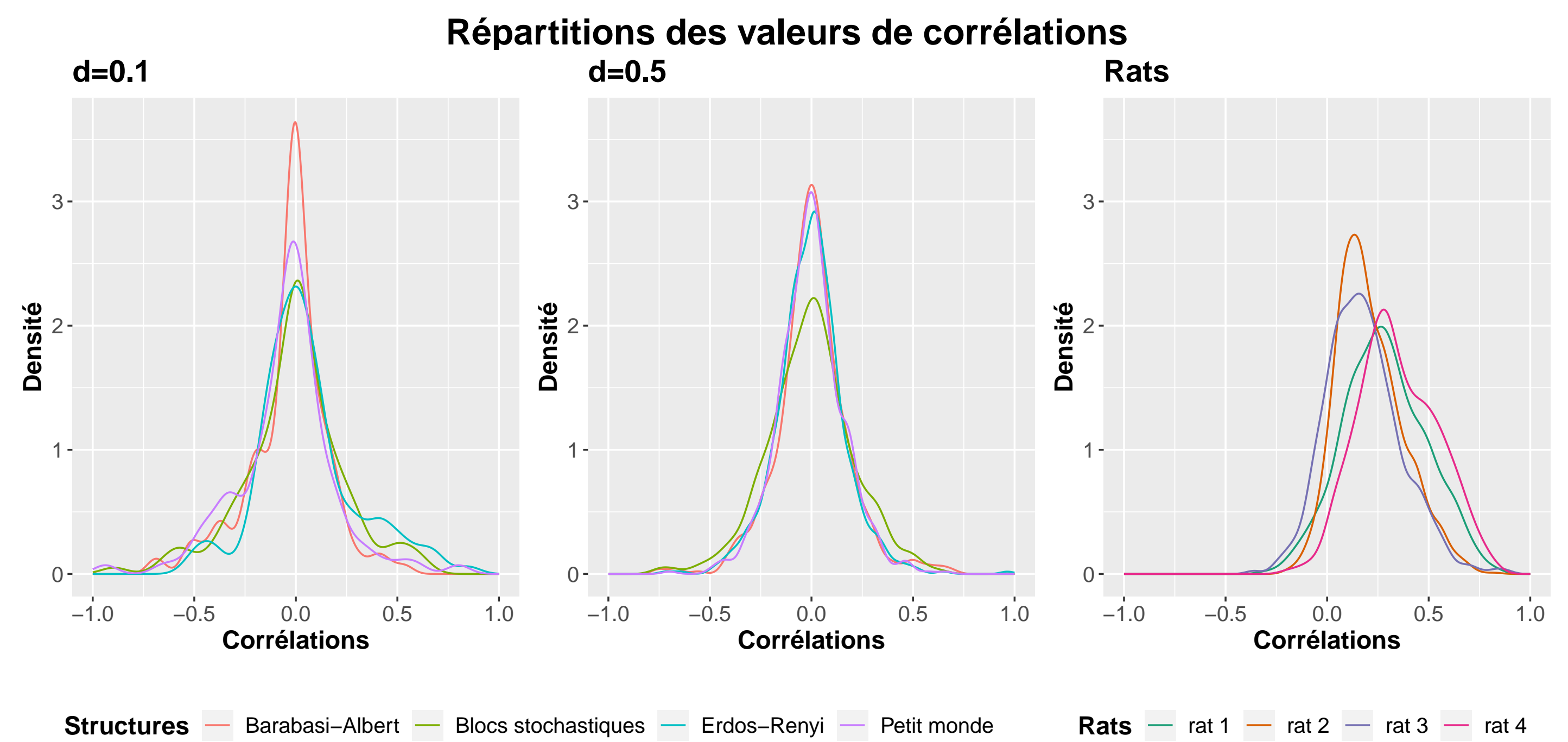


FIGURE 1 – Distributions des corrélations théoriques obtenues par simulations et empiriques sur données réelles. Les graphes ont  $p = 51$  nœuds.)

- ▶ Plus il y a d'arêtes, plus les valeurs de corrélation sont faibles (évolution non régulière).
- ▶ Avec  $(p, d)$  égaux, les graphes de Erdős-Rényi et de blocs stochastiques ont les valeurs les plus élevées, et les graphes de Barabási-Albert plus faibles.
- ▶ Données simulées symétriques / Données empiriques fortement asymétriques.
- ▶ Modification nécessaire de l'algorithme pour reproduire des matrices réalistes.

## ETUDE DE L'ÉTAPE 1

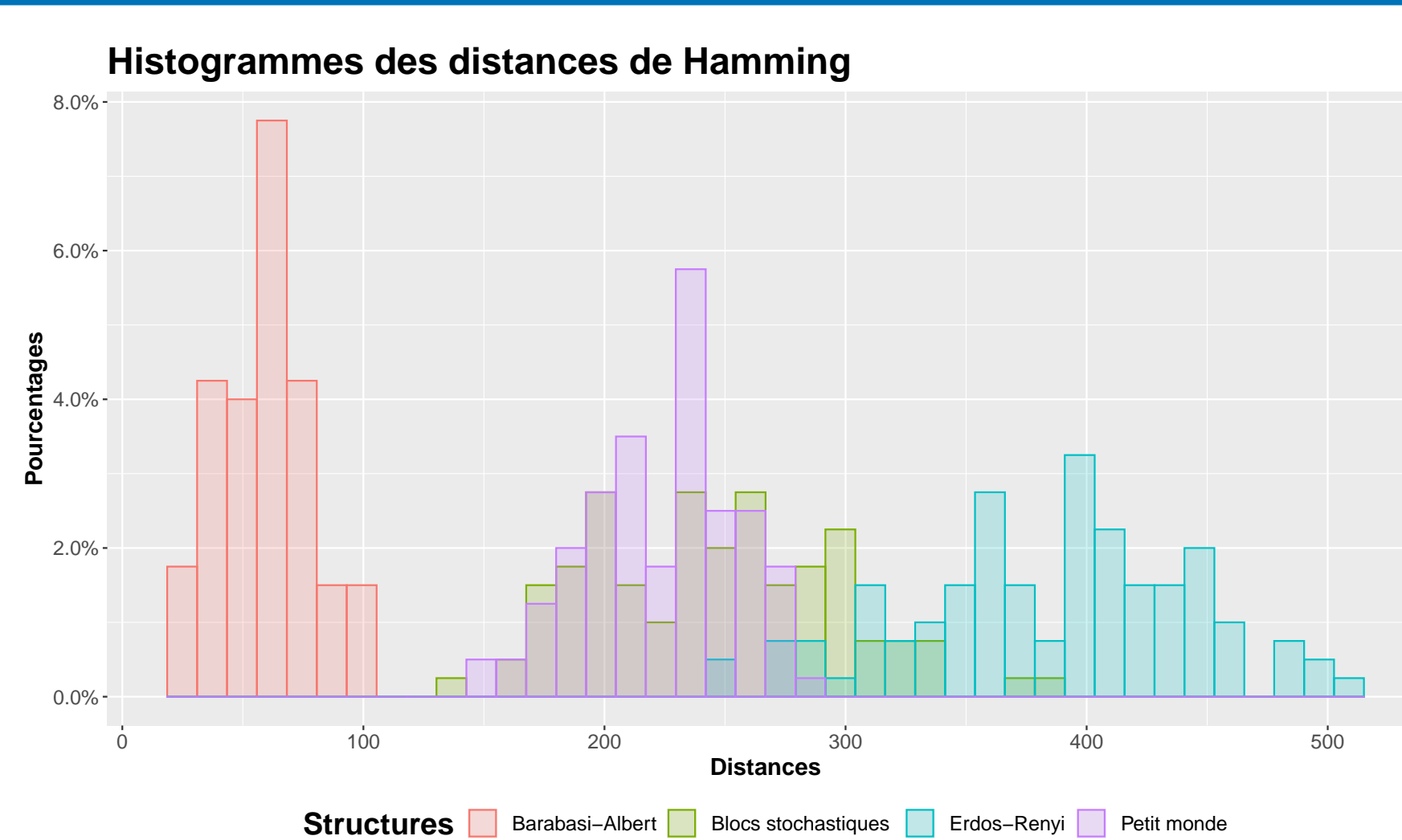


FIGURE 2 – Histogrammes des distances de Hamming entre les graphes  $G$  et les graphes  $\tilde{G}$  avec  $(p, d) = (51, 0.1)$ .

**Biais possible** lors de l'étape 1 de l'algorithme transformant  $G$  en  $\tilde{G}$ .

- ▶ Écarts entre les graphes  $G$  et  $\tilde{G}$  variables pour les différentes structures de graphes.
- ▶ Petit-monde et Blocs stochastiques ont des comportements similaires à l'étape 1 mais pas dans les distributions : les écarts observés sont *a priori* bien liés à la structure.

## CONCLUSION

- ▶ Étude de l'algorithme proposé dans Córdoba et al. [1] et permettant la simulation de matrices de corrélations associées à des graphes.
- ▶ Mise en évidence de l'influence des structures de graphes sur les valeurs de corrélations générées, à nombres d'arêtes et de nœuds fixés.
- ▶ Limitations à des valeurs de corrélations générées faibles et symétriques, que l'on retrouverait également dans la méthode des oignons (n'autorisant pas de contrainte de graphe).
- ▶ Perspective d'étendre la contrainte de graphe sous-jacent à d'autres algorithmes de génération de matrices de corrélations.

## REFERENCES

- [1] Córdoba, I., Varando, G., Bielza, C. et Larrañaga, P. (2020). On generating random Gaussian graphical models. *International Journal of Approximate Reasoning*, 125, 240–250.
- [2] Becq, G., J-PC, Habet, T., Collomb, N., Faucher, M., Delon-Martin, C., Coizet, V., Achard, S. et Barbier, E.L. (2020). Functional connectivity is preserved but reorganized across several anesthetic regimes. *NeuroImage*, 219, 116945.
- [3] Joe, H. (2006). Generating random correlation matrices based on partial correlations. *Journal of Multivariate Analysis*, 97(10), 2177–2189.
- [4] Pourahmadi, M. (1999). Joint mean-covariance models with applications to longitudinal data Unconstrained parameterisation. *Biometrika*, 86(3), 677–690.