

Projet de thèse: Estimation automatique de graphes de connectivité fonctionnelle en neurosciences

Directeurs:

Paulo Gonçalves paulo.goncalves@inria.fr
Mathurin Massias mathurin.massias@inria.fr
Titouan Vayer titouan.vayer@inria.fr

Mots-clefs: neurosciences, épilepsie, apprentissage automatique, optimisation, parcimonie, graphes

Contexte

L'électroencéphalographie (EEG) et la magnétoencéphalographie (MEG) sont des outils de choix pour le diagnostic préopératoire pour le traitement de nombreuses maladies neurologiques comme l'épilepsie. Un enjeu fondamental consiste à obtenir, à partir de signaux M/EEG, des indicateurs permettant de détecter une activité anormale dans une région localisée du cerveau, appelée foyer épileptique [2], de déterminer sa position et d'évaluer la faisabilité d'une opération. Afin de réaliser ces tâches, de nombreux travaux utilisent les enregistrements M/EEG pour inférer un graphe dynamique de connectivité fonctionnelle entre les différentes zones cérébrales. Ce graphe modélise la connectivité fonctionnelle du cerveau à partir des dépendances entre chaque paire d'électrodes, et permet d'analyser finement l'évolution de l'activité cérébrale au cours du temps [6].

Objectifs scientifiques

Le but de cette thèse est de développer des méthodes d'apprentissage automatique permettant d'estimer fidèlement, rapidement et sans calibration des graphes dynamiques à partir de signaux M/EEG. Il s'agit d'inférer des graphes de dépendances statistiques entre variables latentes à partir de *sketchs* des séries temporelles associés par exemple à matrices de covariance. L'objectif est en particulier développer des algorithmes efficaces et à la performance statistique contrôlée, inspirées par le graphical Lasso, et s'appuyant sur les avancées récentes en optimisation non-convexe et en transport optimal pour dépasser les limites imposées par les approches convexes.

Le Graphical Lasso est l'une des méthodes les plus populaires pour obtenir un graphe à partir de signaux [1, 5]. Le graphe est décrit par une matrice appelée matrice de précision Θ dont les poids encodent les relations de dépendance statistique des données observées. Dans de nombreuses applications Θ est *parcimonieuse* et correspond à un graphe faiblement connecté, ce qui fournit un modèle simple et robuste. Une telle structure est obtenue en pénalisant la norme ℓ_1 de Θ et en résolvant le problème d'optimisation suivant:

$$\min_{\Theta} -\log \det(\Theta) + \text{tr}(\Theta \widehat{\Sigma}) + \lambda \|\Theta\|_1 \quad (1)$$

où $\widehat{\Sigma}$ est la covariance empirique des signaux observés. Dans un contexte similaire, de nouvelles techniques d'estimation de graphe dynamique basées sur la décomposition parcimonieuse de tenseurs ont récemment été développées par [7].

Malgré leur succès, ces méthodes souffrent de deux limitations: elles utilisent des pénalités convexes qui conduisent à un biais d'estimation [11], et reposent sur des hyperparamètres de régularisation dont la

calibration est complexe.

Le premier axe de la thèse consiste à améliorer ces méthodes en utilisant des pénalités non-convexes [9, 12, 15], qui sont connues pour leurs meilleures propriétés. Il est encore mal compris théoriquement en quoi ces pénalités permettent d'estimer un meilleur graphe, et, surtout, elles posent de nombreux défis algorithmiques à cause de l'existence de minima locaux des fonctions de coût. Le doctorant étudiera l'impact des algorithmes utilisés sur la qualité de la solution locale, ainsi que les améliorations possibles par warm-start et non convexité graduelle [14]. Dans le cas convexe, la formulation de la calibration d'hyperparamètre (tel λ dans (1)) comme un problème bi-niveau permet des gains de temps de calcul conséquents [3]. Le candidat doctorant étudiera la généralisation de ces techniques au cas de pénalités non convexes, dans le but de fournir des procédures d'estimation automatiques qui requièrent une intervention minimale de la part du praticien.

Enfin, le doctorant étudiera l'adaptabilité de ces méthodes d'estimation. En effet, étant donné plusieurs patients il est crucial de pouvoir trouver des estimations de graphes qui soient consistantes parmi ces patients. Des solutions de type deep-learning ont récemment été proposées pour résoudre ce problème [10] mais elles requièrent cependant une certaine régularité dans les données entre les patients. Ce problème peut être abordé du point de vue de l'adaptation de domaine (AD) dont le but est de fournir des méthodes d'apprentissage qui sont robustes aux changements dans la distribution des données. La théorie du transport optimal [8], qui cherche à réaligner des distributions, a permis de proposer des solutions de AD avec de très bonnes performances [4]. Il est cependant encore mal compris comment ces types de méthodes peuvent être appliquées au cas des graphes. Un des objectifs de la thèse est donc de définir des méthodes d'adaptation de domaine sur graphes afin d'obtenir des estimations consistantes inter-patients en se basant par exemple sur de récentes avancées en transport sur graphes [13].

Supervision P. Gonçalves mène ses travaux de recherche dans le domaine de l'apprentissage et du traitement du signal sur graphes. Il a encadré plusieurs thèses sur ces sujets dont notamment celle de G. Frusque en collaboration avec le CRNL. R. Gribonval est un expert en apprentissage automatique, en traitement du signal, en graphes et en apprentissage frugal. M. Massias travaille sur l'optimisation parcimonieuse de problèmes à grandes échelle, et a effectué sa thèse sur le problème de localisation de sources cérébrales à partir de données EEG/MEG. Les recherches de T. Vayer s'intéressent aux problèmes d'apprentissage par compression et au transport optimal. Ses travaux de thèse avaient pour but de définir des méthodes de transport optimal pour l'apprentissage automatique avec des graphes et des données hétérogènes.

Environnement de travail La thèse s'effectuera au sein de l'équipe Inria Dante, intégrée au Laboratoire d'Informatique du Parallélisme (LIP) de l'ENS Lyon. Le doctorant sera encadré par Mathurin Massias (CR Inria), Titouan Vayer (CR Inria) et Paulo Gonçalves (DR Inria) qui sera aussi son directeur de thèse. Le doctorant évoluera dans un environnement scientifique dynamique en adéquation avec les thèmes de recherche de l'équipe Dante. Dans la continuité de la thèse effectuée par Gaetan Frusque sous la direction de Paulo Gonçalves et Julien Jung (Inserm, Centre de Recherche en Neurosciences de Lyon), des collaborations avec le CNRL permettront de garantir l'expertise médicale des travaux de thèse.

References

- [1] O. Banerjee, L. El Ghaoui, and A. d'Aspremont. "Model Selection Through Sparse Maximum Likelihood Estimation for Multivariate Gaussian or Binary Data". In: *Journal of Machine Learning Research* 9.15 (2008), pp. 485–516.
- [2] H. Becker. "Denoising, separation and localization of EEG sources in the context of epilepsy". Theses. Université Nice Sophia Antipolis, Oct. 2014.
- [3] Q. Bertrand, Q. Kloppenstein, M. Massias, M. Blondel, S. Vaiter, A. Gramfort, and J. Salmon. "Implicit differentiation for fast hyperparameter selection in non-smooth convex learning". In: *arXiv preprint arXiv:2105.01637* (2021).

- [4] N. Courty, R. Flamary, D. Tuia, and A. Rakotomamonjy. “Optimal Transport for Domain Adaptation”. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 39.9 (2017), pp. 1853–1865.
- [5] J. Friedman, T. Hastie, and R. Tibshirani. “Sparse inverse covariance estimation with the graphical lasso”. In: *Biostatistics* 9.3 (2008), pp. 432–441.
- [6] G. Frusque. “Inférence et décomposition modale de réseaux dynamiques en neurosciences”. PhD thesis. Université de Lyon, Dec. 2020.
- [7] G. Frusque, J. Jung, P. Borgnat, and P. Gonçalves. “Multiplex network inference with sparse tensor decomposition for functional connectivity”. In: *IEEE transactions on Signal and Information Processing over Networks* 6 (2020), pp. 316–328.
- [8] G. Peyré and M. Cuturi. “Computational Optimal Transport”. In: *Foundations and Trends in Machine Learning* 11.5-6 (2018), pp. 355–206. DOI: 10.1561/22000000073.
- [9] K. Sagar, S. Banerjee, J. Datta, and A. Bhadra. *Precision Matrix Estimation under the Horseshoe-like Prior-Penalty Dual*. 2021.
- [10] H. Shrivastava, X. Chen, B. Chen, G. Lan, S. Aluru, H. Liu, and L. Song. “GLAD: Learning sparse graph recovery”. In: *arXiv preprint arXiv:1906.00271* (2019).
- [11] E. Soubies, L. Blanc-Féraud, and G. Aubert. “A continuous exact ℓ_0 penalty (CEL0) for least squares regularized problem”. In: *SIAM Journal on Imaging Sciences* 8.3 (2015), pp. 1607–1639.
- [12] Q. Sun, Kean M. Tan, H. Liu, and T. Zhang. “Graphical Nonconvex Optimization via an Adaptive Convex Relaxation”. In: *International Conference on Machine Learning*. Vol. 80. 2018, pp. 4810–4817.
- [13] T. Vayer, N. Courty, R. Tavenard, C. Laetitia, and R. Flamary. “Optimal Transport for structured data with application on graphs”. In: *International Conference on Machine Learning*. Vol. 97. 2019, pp. 6275–6284.
- [14] Heng Yang, Pasquale Antonante, Vasileios Tzoumas, and Luca Carlone. “Graduated non-convexity for robust spatial perception: From non-minimal solvers to global outlier rejection”. In: *IEEE Robotics and Automation Letters* 5.2 (2020), pp. 1127–1134.
- [15] J Ying, J. de Miranda Cardoso, and D. Palomar. “Nonconvex Sparse Graph Learning under Laplacian Constrained Graphical Model”. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Vol. 33. 2020, pp. 7101–7113.