

Rebonjour à tous. Merci d'être ici aujourd'hui pour la réunion CSI.

Je suis en thèse sous la direction de Nicolas, Karim et Rémi. Mon sujet de thèse est Transport optimal pour l'apprentissage par transfert entre les espaces

Dans cette réunion, je vais vous présenter ce que j'ai fait depuis l'année dernière.

Je vais commencer avec une intro rapide de la distance de GW. Plus précisément, on s'intéresse au graphe pondéré qui est muni d'une matrice d'adjacence et d'un histogramme associé aux noeuds du graphe. Etant donné 2 graphes pondérés, on définit la distance de GW entre eux comme le minimum d'un problème d'optimisation. Où on cherche un plan de transport qui minimise cette fonction d'objective. Intuitivement, on veut que les clusters dans le graphe de source soient alignés aux autres dans le graphe de cible, qui se ressemblent le plus (entre guillemets).

On peut aussi associer un feature vecteur à chaque noeud du graphe et on obtient un graphe pondéré labelisé. Maintenant, la FUGW entre 2 graphes pondérés labelisés est défini par le minimum de ce problème. On a 4 termes dans sa fonction objective. Le 1er, c'est le terme de GW qui préserve la géométrie globale de la structure sous accente. Le terme de Wasserstein en bleu prend en compte des alignements de source et de target features. Le terme d'unbalanced permet de ne pas transporter la masse à certaines positions entre les source et cible. Le terme d'entropie n'a que pour l'intérêt d'accélérer l'optimisation.

On a collaboré avec l'équipe MIND à l'INRIA et appliqué FUGW sur les données neuro-imaging. Dans cet expérience, on cherche à aligner les cerveaux de 2 humains et à apprendre une template du cerveau, qui est juste un barycentre. Ici, le cerveau est représenté comme un mesh et la matrice d'adjacence est la distance géodésique sur le mesh. le feature est un vecteur dans  $\mathbb{R}^{300}$  dont les coordonnées sont les functional activation maps.

On a obtenu des résultats très favorables dans ces expé et notre papier a été accepté au Neurips 2022. En ce moment, on est en train de tester FUGW en grande échelle et on a obtenu des résultats préliminaires assez encourageants.

Maintenant je vais parler du 2<sup>e</sup> papier accepté l'année dernière. D'abord, on définit la notion de sample-feature space. Ici, on a 2 espace mesuré compact, l'espace de sample  $X_s$  muni d'une mesure  $\mu_s$  et l'espace de feature  $X_f$  muni d'une mesure  $\mu_f$ . On introduit aussi l'interaction  $\chi$ , qui est juste une fonction intégrable à valeur réelle définit sur l'espace produit et on appelle ce triple un sample-feature space. Par exemple, dans le cas discret, on peut voir l'interaction  $\chi$  comme la coordonnée de la matrice en entrée. Et  $X_s, X_f$  sont simplement les indices des lignes et des colonnes.

Maintenant, étant donné 2 sample-feature space, on peut définir le UCOOT entre eux comme le minimum de ce problème d'optim, où on cherche simultanément 2 plans de transport qui minimisent cette fonction objective

Son terme d'intégrale représente le coût de transport qui est la différence élément-wise entre 2 interactions. La 2<sup>e</sup> somme se ressemble bien à celle dans FUGW, qui dit en gros, on doit pas forcément transporter toutes les masses du source vers le cible.

On peut montrer que ce problème admet toujours une solution. La propriété la plus importante de UCOOT, c'est qu'il est très robuste aux bruits et aux anomalies.

Pour résumer, ma contribution, j'ai formalisé le framework et montré tous les résultats théoriques. J'ai aussi réalisé l'expérience sur l'adaptation de domaine hétérogène. On a aussi collaboré avec l'équipe biologistes à l'université de Brown et réussi à appliquer UCOOT sur les données multi-omics. A la fin, notre papier a été accepté au AAAI.

Donc, ce sont 2 projets réalisés l'année dernière. Maintenant je vous parle des projets les plus récents. Le 1er, c'est sur une variation de la distance de GW. On a 2 motivations principales. On sait que la distance de GW est invariante par transformation isométrique, car la matrice de distance n'est toujours pas impactée dans ce cas. Mais ça veut aussi dire qu'il y a beaucoup des isométries et qu'elles n'ont pas forcément les même sens, par exemple le chiffre 6 et 9 sont géométriquement équivalents mais apparemment ils représentent des chiffres différents. En plus, dans GW, tous les features sont agrégés dans la distance, donc elles ne sont pas bien exploitées. Et là où on a besoin de COOT.

Donc, on propose de combiner COOT et GW et qu'on appelle cette combinaison Augmented GW. Comme COOT, on cherche 2 plans transport qui minimisent une combinaison convexe de GW et COOT, un peu près. Intuitivement, si  $\alpha$  tend vers 0, alors on approche COOT et quand  $\alpha$  tend vers 1, on approche GW. On peut aussi montrer que AGW s'intéresse à vachement moins des isométries que GW et souvent dans nos expériences, ce sont des bonnes.

Pour résumer ma contribution, j'ai formalisé la framework et réalisé toute l'analyse théorique de cette divergence. En collaboration toujours avec l'équipe à l'université de Brown, on a obtenu des résultats très favorables avec AGW et on a soumis ce papier à NeurIPS la semaine dernière.

Il nous reste à bien comprendre les isométries concernées par AGW. Je dirais qu'en ce moment, on comprend 70% comment elle marche. Il nous faut aussi comparer avec les autres méthodes récemment proposées.

Le 2<sup>e</sup> projet que j'ai commencé la semaine dernière, c'est sur la joint distribution COOT. Notre motivation est la suivante. Supposons qu'on a des données de source labellisées et de cible non-labellisées, et que les données de source et de cible se trouvent dans le même espace. Une tâche classique en machine learning, c'est d'entraîner un classifieur qui marche bien sur les données de cible, en utilisant les données de source labellisées. Il y a un travail qui résout ce problème à l'aide du transport optimal. Cette approche est appelée Joint distribution OT, où on cherche à apprendre un classifieur qui minimise la distance de Wasserstein entre les données jointes de source et de cible estimées.

Notre intérêt principal dans ce projet, c'est le cas où la source et cible ne sont plus comparables, par exemple les points dans  $\mathbb{R}^3$  versus les points dans  $\mathbb{R}^5$ . Grâce au succès de COOT, on propose de remplacer Wasserstein par COOT et on introduit le Joint distribution COOT. On peut aussi tenter qqc de plus puissant. On l'appelle Deep-JDCOOT, où on veut en plus projeter les données dans les espaces latents en espérant que le classifieur marche encore mieux sur ces espaces. Typiquement, les fonctions  $g$  ici sont les réseaux neuronaux. C'est pour ça qu'on l'appelle Deep-JDCOOT.

Le projet a déjà commencé il y a quelques temps, donc le papier est déjà pas mal dirigé. Le code et les expériences sont implémentés par un ancien doctorant mais les résultats des expé ne sont pas encore communiqués dans le papier. Donc, ce qu'il me reste à faire, c'est de finaliser la rédaction du papier, relancer les expériences et vérifier le résultat théorique.

Donc pour résumer, depuis le début de thèse, j'ai 3 papiers acceptés et 1 papier récemment soumis. Voici la liste des formations suivies. Pas bcp de nouveau en comparant avec l'année dernière. Merci pour votre attention