ERPM — Avancement Wrapper Et Nouveaux Effets

Jérémie Chichignoud (CUB'iTECH)

3 novembre 2025

Table des matières

État d'avancement : wrapper `erpm` et statistiques/effets

Objectifs (portée du document)

L'objectif est de concevoir une fonction `erpm()` inspirée de la logique des modèles linéaires généralisés, capable d'estimer des effets statistiques définis sur des **partitions** plutôt que sur des graphes. La syntaxe cible est :

`erpm(partition ~ effets + options)`

La partie gauche représente la partition des acteurs en groupes, et la partie droite décrit les effets statistiques à calculer.

La fonction agit comme un **wrapper** autour du moteur `ergm()`. Elle transforme la partition en un **graphe biparti** (acteurs–groupes), sur lequel `ergm()` peut être appliqué directement. Cette traduction permet d'utiliser les outils et algorithmes d'ERGM tout en conservant une lecture centrée sur les groupes.

Un autre rôle clé de `erpm()` est d'assurer la **correspondance entre effets ERPM et ERGM**, selon trois situations :

1. **Effet direct** : déjà présent dans ERGM et utilisable tel quel ;
2. **Effet partiel** : partiellement couvert, nécessitant un traitement complémentaire (agrégation, normalisation, etc.) ;
3. **Effet spécifique** : absent d'ERGM, à créer avec `InitErgmTerm()` et une fonction C de changement (`change_stat`).

L'objectif final est que `erpm()` pilote l'ensemble du processus : de la définition de la partition à l'appel de `ergm()`, en passant par la préparation des effets, des contraintes et des propositions.

—

Travail réalisé

La structure principale de `erpm()` est **fonctionnelle et stable**. Elle gère correctement la conversion des entrées, le renommage des effets et l'appel au moteur `ergm()`.

- **Structure du wrapper** : prise en charge d'une partition et d'une formule d'effets ; construction de la matrice d'affiliation (acteurs × groupes) ; création du `network` biparti ; ajout automatique des contraintes et propositions nécessaires (`InitErgmConstraint.b1part`, `InitErgmProposal.B1Part`) ; puis exécution de `ergm()`.
- **Traduction des effets** : les effets connus sont traduits vers leurs équivalents ERGM (par ex. `groups` → `b2degrange`). Les effets dyadiques utilisent les opérateurs `Proj1` ou `B` selon le mode d'analyse.
- **Effets implémentés** : un effet spécifique, `squared_sizes`, est pleinement fonctionnel. Il dispose de sa fonction `InitErgmTerm()` et de son code C associé, basé sur les macros d'ERGM (`ergm_changestat_common.do_not_include_directly.h`, `ergm_changestat.h`, etc.).
- **Tests et validation** : les scripts `squared_sizes.R` et `test_groups.R` vérifient la cohérence du pipeline complet : création de partitions simples, conversion bipartie, appel à `erpm()`, et calcul des statistiques. Ces tests sont conçus comme des *selftests* autonomes.

Les résultats montrent que l'intégration avec `ergm()` fonctionne correctement et que la structure du wrapper est fiable.

—

Travail restant et perspectives

La prochaine étape est la **caractérisation complète des effets ERPM**. Chaque effet doit être identifié comme direct, partiel ou spécifique, et implémenté en conséquence, avec un test unitaire dédié.

- **Finalisation du wrapper** : améliorer la gestion des options `control.ergm`, définir des valeurs par défaut cohérentes, traiter les cas limites (groupes vides, partitions incomplètes), et renforcer la traduction automatique des effets directs `erpm` → `ergm`.
- **Validation des effets et tests d'intégration** : ajouter un *selftest* autonome pour chaque nouvel effet, et construire des cas minimaux pour vérifier la stabilité statistique (moyennes, variances, convergence).
- **Effets liés aux attributs dyadiques** : une partition ne comporte pas d'attributs dyadiques, mais il peut être utile de modéliser la probabilité d'appartenance à un groupe à partir d'informations dyadiques externes. Dans ce cas, une matrice d'attributs dyadiques peut être transmise en complément de la partition.
- **Documentation** : compléter les blocs `roxygen2` et rédiger une vignette "`erpm` en dix lignes" illustrant le flux complet : partition → graphe biparti → estimation → résumé.

En résumé, `erpm()` est stable, bien intégré à `ergm()`, et prêt à accueillir progressivement de nouveaux effets ERPM.

Tableau de correspondance des effets

Effet ERPM	Correspondance ERGM	Alias/Termes ERGM	Calcul partiel (si partielle)	Si aucune : `InitErgmTerm` + C	Commentaire	Status
`groups(from,to)`	**Directe**	`b2degrange(from,to)`	—	—	Taille des groupes = degré (mode 2).	✓
`squared_sizes(from,to, pow)`	**ErgmTerm**	—	—	`InitErgmTerm.squared_sizes` `c_squared_sizes`	Somme des tailles des groupes (mode 2) élevées à la puissance `pow`.	✓
`cov_match(cov)`	**Directe via projection**	`Proj1(~nodematch("cov"))`	—	—	Homophilie intra-groupe (projection mode 1).	✗
`cov_diff(cov)`	**Directe via projection**	`Proj1(~absdiff("cov"))`	—	—	Différences intra-groupe (paires).	✗
`dyadcov(X)`	**Directe via projection**	`Proj1(~edgecov(X))`	—	—	Effets dyadiques sur la projection. *Optionnel* : `B(form="nonzero")` si nécessaire.	✗
`cov_fullmatch(cov)`	**Partielle**	`Proj1` + comptage	Post-traitement : groupes 100% homogènes.	(*optionnel*) `InitErgmTerm.cov_fullmatch` `c_cov_fullmatch`	Post-hoc OK ; term C si nécessaire en MCMC.	✗
`cliques(clique_size, normalized)`	**Partielle**	`b2degrange(0,1)` ou `edges`	Normalisation optionnelle par la proportion de paires d'acteurs co-membres : $\frac{\sum_g \binom{n_g}{2}}{\binom{N_1}{2}}$	—	Compte, pour chaque groupe du mode 2, le nombre de k-cliques d'acteurs qu'il induit dans la projection 1-mode ; chaque groupe de taille n_g contribue $\binom{n_g}{k}$.	✓
`cliques_GW($\lambda$)`	**Pas encore évaluée**	—	—	`InitErgmTerm.cliques_GW` `c_cliques_GW`	Pondération géométrique (probable custom).	✗

Effet ERPM	**Correspondance ERGM**	**Alias/Termes ERGM**	**Calcul partiel (si partielle)**	**Si aucune : `InitErgmTerm` + C**	**Commentaire**	**Status**
`log_factorial_sizes`	**Directe (custom)**	`b2degm1lfactorial` ↦ `sum_lfactorial_idegreem1`	—	`InitErgmTerm.b2degm1lfactorial` `c_sum_lfactorial_idegreem1`	C OK (`lgammafn`).	✗
`inertia_longitudinal`	**Pas encore évaluée**	—	—	`InitErgmTerm.inertia` `c_inertia`	Effet temporel avec auxiliaires ($t-1$).	✗
`dyadcov_intragroup_sum`	**Partielle**	`Proj1(~edgecov)` + agrégations	Sommes/normalisations par groupe (R).	(*optionnel*) term dédié si requis	Pour métriques par groupe dans la vraisemblance.	✗
`range_attribute(attr)`	**Partielle**	`Proj1` + `absdiff`/résumés	Max–min par groupe (post-traitement).	(*optionnel*) term dédié	Contraintes d'hétérogénéité intra-groupe.	✗

Explication effet par effet

1 Comptage de groupes par taille : `groups(from, to)`

Définition.

Pour le biparti $A-G$ et $n_g = d(g)$ la taille du groupe g,

$$\texttt{groups(from,to)} \;=\; \sum_{g\in G} \mathbf{1}\{\, n_g \in [\mathit{from},\, \mathit{to})\,\},$$

Cela compte le nombre de groupes dont la taille appartient à l'intervalle $[from, to)$ (borne inférieure incluse, supérieure exclue).

Correspondance ERGM.

`groups(from,to)` $\longrightarrow$ `b2degrange(from=from, to=to)` sur le *mode 2*.

Appel dans `erpm()`.

```
# Tous les groupes de taille ≥1
erpm(nw ~ groups)

# Groupes de taille exactement 3  -> [3,4)
erpm(nw ~ groups(3))

# Intervalle explicite [2,5)
erpm(nw ~ groups(from = 2, to = 5))
```

2 Somme des puissances de tailles : `squared_sizes(from, to, pow)`

Définition.

Sur les nœuds groupes $g \in G$ de taille n_g,

$$\texttt{squared\_sizes(from,to,pow)} \;=\; \sum_{g\in G} \mathbf{1}\{n_g \in [\mathit{from}, \mathit{to})\}\; n_g^{\mathit{pow}},$$

Par défaut $pow = 2$. Le terme est vectorisable sur plusieurs intervalles et puissances.

Implémentation ERGM dédiée.

Terme spécifique `squared_sizes` côté {ergm}, calcul en « un-toggle » sur le mode 2 uniquement, avec entrées $[from, to, pow]$ et gestion de $[from, to)$ ($to = \infty \Rightarrow$ remplacé par $n+1$).

Appel dans `erpm()`.

```
# Somme des carrés pour tous les groupes (from=1, to=Inf, pow
    =2)
erpm(nw ~ squared_sizes)

# Somme des cubes pour tailles [2,5)
erpm(nw ~ squared_sizes(from = 2, to = 5, pow = 3))

# Vectorisation sur deux intervalles
erpm(nw ~ squared_sizes(from = c(1,4), to = c(4, Inf), pow = c
    (2,2)))
```

3 k-cliques sur la projection 1-mode : `cliques(k, normalized)`

Cliques d'acteurs via la projection 1-mode.

Pour une partition P, on construit le graphe biparti $A-G$ où A est l'ensemble des acteurs et G l'ensemble des groupes. Pour tout $g \in G$, on note $n_g = d(g)$ le degré (i.e. la taille) du groupe g. On note $N = \{n_g : g \in G\}$ l'ensemble des tailles de groupes.

La projection 1-mode sur A relie deux acteurs s'ils sont co-membres d'au moins un groupe. Le nombre total de k-cliques d'acteurs dans cette projection vaut :

$$\#\text{k-cliques} = \sum_{g \in G} \binom{n_g}{k},$$

où l'on adopte la **convention combinatoire étendue par zéro** :

$$\binom{n}{k} = \begin{cases} \dfrac{n!}{k!\,(n-k)!}, & \text{si } n \geq k \geq 0, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ainsi, les groupes de taille $n_g < k$ ne contribuent pas au comptage. S'il n'existe aucun groupe de taille au moins k, alors $\#\text{k-cliques} = 0$.

Exemple. Pour la partition $P = \{1, 1, 1, 1, 2, 2, 3\}$, les tailles de groupes sont $N = \{4, 2, 1\}$. On obtient :

$$\#\text{2-cliques} = \binom{4}{2} + \binom{2}{2} + \binom{1}{2} = 6 + 1 + 0 = 7,$$

$$\#\text{4-cliques} = \binom{4}{4} + \binom{2}{4} + \binom{1}{4} = 1 + 0 + 0 = 1,$$

Ainsi, l'ensemble des tailles de cliques présentes est $K = \{2, 4\}$.

Appel dans `erpm()`.

```
# k par défaut = 2, non normalisé
erpm(nw ~ cliques())

# k explicite
erpm(nw ~ cliques(k = 3))

# Forme abrégée
erpm(nw ~ cliques(4))

# Normalisation par C(N1, k)
erpm(nw ~ cliques(k = 2, normalized = TRUE))
```

Annexe — ERGM et Metropolis–Hastings

A.1 Rappel : qu'est-ce qu'un ERGM ?

Un modèle de graphe aléatoire exponentiel (ERGM, *Exponential Random Graph Model*) définit une loi de probabilité sur l'ensemble des graphes possibles y :

$$\Pr_\theta(Y = y) \propto \exp\big(\theta^\top g(y)\big),$$

où :

- $g(y)$ est le **vecteur de statistiques du graphe** : il regroupe des caractéristiques mesurées sur le réseau, par exemple le *nombre d'arêtes* (statistique dénombrable ou « brute ») et le *degré moyen* (statistique agrégée ou « moyenne »).
- θ est le **vecteur de paramètres du modèle** : chaque composante pondère la propension du réseau à présenter la structure correspondante (par ex. triangles, réciprocité).
- $\Pr_\theta$ désigne la **distribution de probabilité induite par** θ : c'est la loi selon laquelle un graphe est susceptible d'être généré.

Motivation.

On dispose d'un **graphe observé** y_{obs} (données empiriques). Ce graphe est fixe : on calcule ses statistiques $g(y_{\text{obs}})$ une fois pour toutes. L'objectif est de trouver θ tel que les graphes simulés depuis $\Pr_\theta$ aient, *en moyenne*, les mêmes statistiques que y_{obs} :

$$\mathbb{E}_\theta[g(Y)] \approx g(y_{\text{obs}}),$$

afin de reproduire les régularités structurelles du réseau (densité, distribution des degrés, triangles, homophilie, etc.).

Principe général.

L'estimation de θ se fait par deux boucles :

- **Boucle interne (MCMC–MH)** : pour un θ fixé, on échantillonne des graphes selon $\Pr_\theta$ à l'aide de **Metropolis–Hastings (MH)**. Concrètement :

  1. partir d'un graphe initial $y^{(0)}$;
  2. proposer une modification locale donnant un candidat y' (ajout/suppression d'une arête) ;
  3. calculer la variation de log-probabilité [1] :

  $$\Delta = \theta^\top\big[g(y') - g(y)\big],$$

  4. accepter y' avec probabilité $\alpha = \min\big(1, \exp(\Delta) \times \frac{q(y' \to y)}{q(y \to y')}\big)$, où q est la loi de proposition.

  En répétant ces étapes, on obtient une chaîne de Markov dont la loi stationnaire est précisément $\Pr_\theta$. L'échantillon $\{y^{(s)}\}$, constitué de plusieurs graphes simulés indépendamment (après burn-in et thinning), sert à approximer les moyennes des statistiques $g(y)$ sous la distribution $\Pr_\theta$.

- **Boucle externe (mise à jour de θ)** : après simulation, on compare la moyenne simulée $\mathbb{E}_{\theta^{(t)}}[g(Y)]$ à $g(y_{\text{obs}})$ et on ajuste

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} + \alpha \left(g(y_{\text{obs}}) - \frac{1}{S} \sum_{s=1}^{S} g(y^{(s)}) \right),$$

où α est un **pas d'apprentissage**. Un pas trop grand peut faire diverger l'algorithme ; trop petit, la convergence devient lente.

1. Pour deux graphes y et y' sous un même θ :

$$\frac{\Pr_\theta(Y = y')}{\Pr_\theta(Y = y)} = \exp\Big\{ \theta^\top [g(y') - g(y)] \Big\} = \exp(\Delta), \quad \Delta = \theta^\top [g(y') - g(y)],$$

Si $\Delta > 0$, y' est plus probable que y (toutes choses égales par ailleurs).

Lien avec les algorithmes de gradient.

La mise à jour de θ est analogue à une **montée de gradient** sur la log-vraisemblance

$$\log L(\theta) = \theta^\top g(y_{\text{obs}}) - \log Z(\theta),$$

car $g(y_{\text{obs}}) - \mathbb{E}_\theta[g(Y)]$ joue le rôle d'un **gradient stochastique**. Le pas α influence vitesse et stabilité de convergence. La fonction de vraisemblance peut être **non convexe** dans l'espace des graphes : la convergence dépend du point de départ et de la structure du réseau.

A.2 Log-vraisemblance, déviance, AIC et BIC

Constante de normalisation $Z(\theta)$.

Dans un ERGM, l'écriture exacte de la probabilité de tirage est :

$$\Pr_\theta(Y = y) = \frac{\exp\{\theta^\top g(y)\}}{Z(\theta)}, \qquad Z(\theta) = \sum_{y' \in \mathcal{Y}} \exp\{\theta^\top g(y')\},$$

où $\mathcal{Y}$ est l'ensemble de *tous* les graphes possibles sur le même jeu de nœuds. $Z(\theta)$ **assure la normalisation** (les probabilités somment à 1). Comme $\mathcal{Y}$ est gigantesque, $Z(\theta)$ n'est pas calculable exactement ; on l'approxime par MCMC.

Log-vraisemblance.

Idée générale.

La **vraisemblance** $L(\theta)$ mesure, pour un θ donné, à quel point le modèle juge plausible le graphe observé y_{obs} :

$$L(\theta) = \Pr_\theta(Y = y_{\text{obs}}) = \frac{\exp\{\theta^\top g(y_{\text{obs}})\}}{Z(\theta)},$$

Maximiser $L(\theta)$ (ou son logarithme) revient à choisir les paramètres qui rendent y_{obs} le plus probable dans la famille des modèles.

Pourquoi travailler au log.

On utilise la **log-vraisemblance**

$$\ell(\theta) = \log L(\theta) = \theta^\top g(y_{\text{obs}}) - \log Z(\theta),$$

car (i) les produits de probabilités deviennent des *sommes* (plus stables numériquement), et (ii) le calcul des dérivées/gradients est direct.

Déviance et critères d'information.

La **déviance** d'un modèle est définie par

$$D = -2\,\ell(\hat\theta),$$

où $\hat\theta$ est l'estimateur (par exemple le maximum de vraisemblance). Sous conditions régulières, les **rapports de vraisemblance** ont une loi asymptotique de type χ^2, d'où le facteur -2 qui permet d'interpréter les *différences* de déviance dans des tests de comparaison de modèles.

Déviance et AIC/BIC (version unifiée).

Dans un ERGM, $D = -2\,\ell(\hat\theta)$ sert d'indicateur global d'ajustement : plus $\ell(\hat\theta)$ est grand, plus D est petit. La déviance mesure toutefois l'ajustement *pur* : un modèle plus complexe a presque toujours une déviance plus faible. Pour **équilibrer ajustement et complexité**, on utilise les critères d'information AIC/BIC :

$$\text{AIC} = 2k - 2\,\ell(\hat\theta), \qquad \text{BIC} = k \log n - 2\,\ell(\hat\theta),$$

où k est le nombre de paramètres et n une taille effective (en réseau, souvent proche du nombre de dyades potentielles). On compare des modèles ajustés sur les mêmes données et on retient en pratique celui dont l'AIC/BIC est **minimal** (meilleur compromis « fidélité/parcimonie »). AIC/BIC permettent en outre de comparer des modèles *non nécessairement emboîtés*, ce que ne permet pas un test basé uniquement sur la différence de déviance.

A.3 Sorties usuelles de `summary(ergm)`

- **Call** : l'appel exact (traçabilité, reproductibilité).
- **Coefficients** : estimés $\hat{\theta}_i$ (un par statistique), **erreur-type** (SE), **statistique** z ($z = \hat{\theta}_i/\mathrm{SE}(\hat{\theta}_i)$) et **p-valeur bilatérale** pour $H_0 : \theta_i = 0$. Un grand $|z|$ suggère un effet éloigné de 0 au regard de l'incertitude.
- **MCMC %** : fraction (en %) de l'erreur-type due au *bruit Monte-Carlo. Interprétation et actions* : un MCMC% élevé indique que l'échantillon simulé est peu informatif (forte autocorrélation). **Burn-in** = nombre d'itérations initiales *jetées* avant d'enregistrer des échantillons (laisser la chaîne se stabiliser) ; **Thinning** = ne garder qu'une itération sur m pour **décorréler les échantillons** entre eux (réduire l'autocorrélation sérielle) ; **Taille d'échantillon** = nombre total d'états conservés pour estimer les moyennes. Si la chaîne *mélange mal*, il peut être nécessaire d'ajuster les contraintes ou le mécanisme de proposition.
- **Log-vraisemblance, déviance** D**, AIC, BIC** : indicateurs globaux (définitions ci-dessus). AIC/BIC plus petits $\Rightarrow$ meilleur compromis.

A.4 Contraintes et mécanisme de proposition (MH) en biparti

Contraintes (restriction de l'espace d'état).

Les **contraintes** (par exemple `b1part`) restreignent l'espace des graphes explorés par MH aux configurations *valides* : en biparti, interdire les arêtes intra-mode, imposer certaines bornes de degrés, etc. Elles ne constituent pas un « assouplissement » : elles **excluent** simplement les états invalides et garantissent que chaque graphe visité respecte la structure voulue.

Mécanisme de proposition.

Le **mécanisme de proposition** (souvent appelé « proposal ») génère un candidat y' à partir de y (par exemple tirer une dyade admissible et toggler l'arête), en *respectant* les contraintes. Il définit la distribution $q(y \to y')$ qui intervient dans le **ratio de Hastings**. Si q est asymétrique (par exemple plus de façons de détruire que de créer une structure), le terme $\frac{q(y' \to y)}{q(y \to y')}$ **corrige** cette asymétrie dans la probabilité d'acceptation.

Pourquoi ces corrections sont indispensables.

Le couple « Δ du modèle » + « ratio de Hastings » assure la **réversibilité** (détail de balance) de la chaîne et garantit que la **loi stationnaire** visée est bien $\Pr_\theta$. Sans cette correction, la chaîne convergerait vers une distribution biaisée (dépendante du mécanisme de proposition) au lieu de la loi ERGM recherchée.

A.5 Exemple minimal (R)

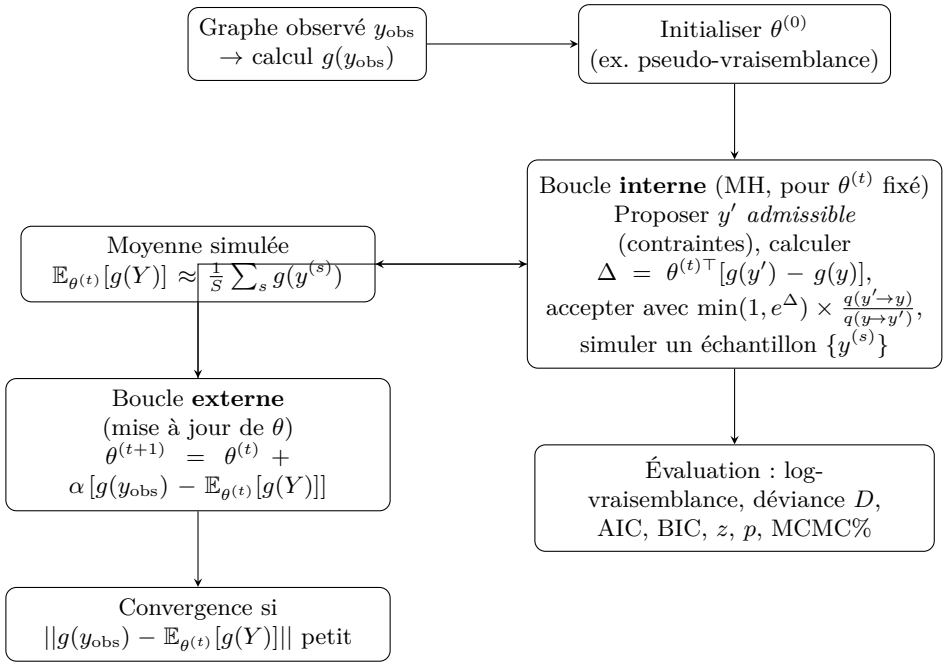
```r
library(ergm)
# Réseau biparti jouet : 4 acteurs -> 2 groupes
m <- matrix(c(1,0,
              1,0,
              0,1,
              0,1), nrow=4, byrow=TRUE)
nw <- network::network(m, bipartite=2, directed=FALSE)

# Modèle 1 : densité (edges)
fit1 <- ergm(nw ~ edges)

# Modèle 2 : densité + distribution de degrés côté groupes (mode 2)
fit2 <- ergm(nw ~ edges + b2degrange(from=2, to=3))

summary(fit1)
summary(fit2)  # comparer log-vraisemblance, AIC, BIC, z, p-values, MCMC%
```

A.6 Schéma du processus d'estimation



Deux boucles imbriquées : **interne** (MH : échantillonnage pour θ fixé) et **externe** (mise à jour de θ jusqu'à convergence).

A.7 Points d'attention

Choix de $g(y)$.

Les statistiques doivent refléter des mécanismes plausibles (densité, degrés, triangles, homophilie, effets d'attributs, etc.) sans surcharger le modèle : empiler trop de termes peut entraîner instabilités, colinéarités ou non-identifiabilité. Une approche progressive (noyau simple, diagnostics, puis complexification) est souvent utile.

Diagnostics MCMC.

Surveiller l'autocorrélation et la stabilité des moyennes simulées. Un **MCMC%** élevé signale une forte dépendance entre échantillons. Augmenter le **burn-in** (laisser la chaîne se stabiliser avant de collecter), appliquer du **thinning** (garder une itération sur m pour **décorréler les échantillons entre eux**), et/ou accroître la **taille d'échantillon**. Si le mélange reste faible, ajuster contraintes et mécanisme de proposition peut aider.

Comparaison de modèles.

AIC/BIC comparent des modèles ajustés sur les mêmes données en pénalisant la complexité. L'information est dans les **écarts** d'AIC/BIC (pas dans leur niveau absolu). Les conclusions gagnent à être croisées avec une **évaluation de type goodness-of-fit** : comparer, entre réseaux simulés et observé, des distributions de degrés, distances géodésiques, motifs triadiques, etc.