ERPM — Avancement Wrapper Et Nouveaux Effets

Jérémie Chichignoud (CUB'iTECH)

13 novembre 2025

Table des matières

Objectifs (portée du document) **3**

Travail réalisé **3**

Travail restant et perspectives **4**

Tableau de correspondance des effets **5**

Explication effet par effet **7**

1 Comptage de groupes par taille : `groups(from, to)` . . . 7
2 Somme des puissances de tailles : `squared_sizes(from, to, pow)` . . . 7
3 k-cliques sur la projection 1-mode : `cliques(k, normalized)` . . . 8
4 Cliques géométriquement pondérées : `cliques_GW(λ)` . . . 8
5 Somme des logs de factorielles décalées : `log_factorial_sizes` . . . 10
6 Effet `cov_ingroup` . . . 12
7 Effet `cov_fullmatch` . . . 14
8 Homophilie discrète par cliques : `cov_match(k)` . . . 15
9 Homophilie géométriquement pondérée : `cov_match_GW(λ)` . . . 16

Annexe — ERGM, Metropolis–Hastings, vraisemblance et critères d'ajustement **18**
A.1 Rappel : qu'est-ce qu'un ERGM ? . . . 18
A.2 Log-vraisemblance, déviance, AIC et BIC . . . 19
A.3 Sorties usuelles de `summary(ergm)` . . . 20
A.4 Contraintes et mécanisme de proposition (MH) en biparti . . . 20
A.5 Exemple minimal (R) . . . 20
A.6 Schéma du processus d'estimation . . . 21
A.7 Points d'attention . . . 21

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`.	✓
`cliques(clique_size, normalized)`	**ErgmTerm**	—	—	`InitErgmTerm.cliques` `c_cliques`	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)`	**ErgmTerm**	—	—	`InitErgmTerm.cliques_GW` `c_cliques_GW`	À remplir	✓
`log_factorial_sizes`	**ErgmTerm**	—	—	`InitErgmTerm.log_factorial_sizes` `c_log_factorial_sizes`	À remplir	✓
`cov_ingroup(cov,size, category)`	**ErgmTerm**	—	—	`InitErgmTerm.cov_ingroup` `c_cov_ingroup`	À remplir	✓
`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).	✗

Effet ERPM	**Correspondance ERGM**	**Alias/Termes ERGM**	**Calcul partiel (si partielle)**	**Si aucune : `InitErgmTerm` + C**	**Commentaire**	**Status**
`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.	✗
`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(partition ~ groups)

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

# Intervalle explicite [2,5)
erpm(partition ~ 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(partition ~ squared_sizes)

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

# Vectorisation sur deux intervalles
erpm(partition ~ 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 #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(partition ~ cliques())

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

# Forme abrégée
erpm(partition ~ cliques(4))

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

4 Cliques géométriquement pondérées : `cliques_GW(λ)`

Définition combinatoire.

Pour une partition P et le graphe biparti $A-G$ associé, chaque groupe $g \in G$ de taille $n_g = d(g)$ génère, dans la projection 1-mode sur A, un ensemble de cliques d'acteurs :

$$c_k(P) \;=\; \sum_{g \in G} \binom{n_g}{k}, \qquad k \geq 1,$$

Ces $c_k(P)$ comptent le nombre total de k-cliques d'acteurs issus de la coappartenance à un même groupe (voir 3).

L'effet `cliques_GW(lambda)` combine ces contributions pour toutes les tailles $k \geq 1$

à l'aide d'une **série géométrique à décroissance contrôlée par** λ :

$$\texttt{cliques\_GW}(\lambda) = \sum_{k\geq 1}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1} c_k(P)$$

$$\text{avec } c_k(P) = \sum_{g\in G}\binom{n_g}{k} \quad \Rightarrow \quad \sum_{k\geq 1}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1}\sum_{g\in G}\binom{n_g}{k}$$

$$\text{(sommes finies : } \#G<\infty,\ n_g<\infty) \quad \Rightarrow \sum_{g\in G}\sum_{k\geq 1}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1}\binom{n_g}{k}$$

$$\text{(convention } \binom{n}{k}=0 \text{ pour } k>n) \quad \Rightarrow \sum_{g\in G}\sum_{k=1}^{n_g}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1}\binom{n_g}{k},$$

On introduit alors la contribution individuelle d'un groupe g :

$$S(n_g,\lambda) \;=\; \sum_{k=1}^{n_g}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1}\binom{n_g}{k},$$

La statistique globale s'écrit alors simplement :

$$\boxed{\texttt{cliques\_GW}(\lambda) \;=\; \sum_{g\in G} S(n_g,\lambda),}$$

Expression de $S(n_g,\lambda)$ sous forme fermée.

On part de la définition combinatoire

$$S(n_g,\lambda)=\sum_{k=1}^{n_g}\Big(-\tfrac{1}{\lambda}\Big)^{k-1}\binom{n_g}{k},$$

et on cherche une expression explicite sous *forme fermée*. En posant $r=-1/\lambda$, on obtient :

$$S(n_g,\lambda)=\sum_{k=1}^{n_g} r^{k-1}\binom{n_g}{k},$$

On multiplie par r pour aligner les puissances :

$$r\,S(n_g,\lambda)=\sum_{k=1}^{n_g} r^{k}\binom{n_g}{k},$$

Puis on complète la somme par le terme $k=0$ que l'on retranche aussitôt :

$$r\,S(n_g,\lambda)=\sum_{k=0}^{n_g}\binom{n_g}{k}r^k-\binom{n_g}{0}r^0=\sum_{k=0}^{n_g}\binom{n_g}{k}r^k-1,$$

On applique ensuite la **formule du binôme de Newton**, $(x+y)^n = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}x^k y^{n-k}$, avec $x=r$ et $y=1$, d'où $(1+r)^{n_g}=\sum_{k=0}^{n_g}\binom{n_g}{k}r^k$. On en déduit :

$$r\,S(n_g,\lambda)=(1+r)^{n_g}-1 \quad \Rightarrow \quad S(n_g,\lambda)=\frac{(1+r)^{n_g}-1}{r},$$

Enfin, la substitution $r=-1/\lambda$ conduit à la forme fermée recherchée :

$$\boxed{S(n_g,\lambda)=\lambda\Big[1-\Big(\tfrac{\lambda-1}{\lambda}\Big)^{n_g}\Big]},$$

Par sommation sur tous les groupes $g\in G$, on obtient la statistique globale :

$$\texttt{cliques\_GW}(\lambda)=\sum_{g\in G}S(n_g,\lambda)=\sum_{g\in G}\lambda\Big[1-\Big(\tfrac{\lambda-1}{\lambda}\Big)^{n_g}\Big],$$

Interprétation.

Chaque groupe g de taille n_g contribue une valeur $S(n_g,\lambda)$ qui agrège l'ensemble de ses cliques potentielles, pondérées par la série géométrique $(-1/\lambda)^{k-1}$. Le terme est donc une *mesure continue de densité de coappartenance*, où λ agit comme un facteur de décroissance. L'effet `cliques_GW(λ)` quantifie, de manière lissée et graduelle, à quel point les acteurs appartiennent ensemble à des groupes communs.

Cas particuliers et limites.

- **Cas** $\lambda = 1$: Les poids deviennent $(-1)^{k-1}$. On obtient $S(n_g, 1) = \sum_{k=1}^{n_g} (-1)^{k-1} \binom{n_g}{k} = 1$. Chaque groupe non vide contribue exactement 1. L'effet `cliques_GW(1)` compte donc simplement le nombre total de groupes, indépendamment de leur taille.
- **Cas** $\lambda \to \infty$: $(1 - 1/\lambda)^{n_g} \approx 1 - n_g/\lambda$, d'où $S(n_g, \lambda) \approx n_g/\lambda$. Les grandes cliques deviennent négligeables : seule la composante linéaire ($k = 1$) subsiste. L'effet tend alors vers une mesure proportionnelle au nombre total d'acteurs.
- **Cas** λ **petit (proche de 1)** : Les poids $(-1/\lambda)^{k-1}$ décroissent lentement, les cliques de grande taille sont fortement prises en compte. Le terme devient sensible à la concentration d'acteurs dans des groupes volumineux.

Résumé interprétatif.

Régime de λ	Formule dominante	Interprétation intuitive
$\lambda = 1$	$S(n_g, 1) = 1$	Chaque groupe vaut 1 (compte des groupes)
$\lambda \to \infty$	$S(n_g, \lambda) \approx n_g/\lambda$	Poids linéaire des acteurs (1-cliques)
λ petit	Série complète sur k	Forte sensibilité aux cliques denses

Appel dans `erpm()`.

```
# Forme par défaut : lambda = 2
erpm(partition ~ cliques_GW)

# Lambda explicite
erpm(partition ~ cliques_GW(lambda = 3))

# Vectorisation (plusieurs décroissances)
erpm(partition ~ cliques_GW(lambda = c(1.5, 2, 4)))
```

1. Inexistant pour les partitions car les groupes y sont disjoints et indépendants.

Remarque.

L'effet `cliques_GW` est à la fois un *lissage analytique* du comptage discret des `cliques(k)` et une *pondération géométrique* contrôlant la profondeur des interactions denses. Il fournit un indicateur continu de la cohésion interne des groupes à travers leurs cliques d'acteurs.

5 Somme des logs de factorielles décalées : `log_factorial_sizes`

Définition combinatoire.

Pour une partition P de N acteurs en groupes $g \in G$, on note $n_g = |g|$ la taille (ou degré mode-2) de chaque groupe. L'effet `log_factorial_sizes` associe à chaque groupe le logarithme du *factoriel décalé* de sa taille :

$$S(P) = \sum_{g \in G} \log\big((n_g - 1)!\big) = \sum_{g \in G} \mathrm{lgamma}(n_g),$$

La fonction $\mathrm{lgamma}(n) = \log(\Gamma(n)) = \log((n-1)!)$ est la version continue du logarithme factoriel, numériquement stable et définie pour tout $n > 0$. Les groupes vides ($n_g = 0$) sont exclus ou traités par convention $f(0) = 0$.

Cette forme additive sur les groupes exprime une **mesure combinatoire interne** à chaque groupe, c'est-à-dire une quantité fondée sur le nombre de façons différentes d'organiser les membres *à l'intérieur* du groupe, sans tenir compte des relations entre groupes[1]. Autrement dit, on ne considère pas combien il existe de groupes ni comment ils interagissent, mais uniquement combien de configurations distinctes un seul groupe peut avoir selon sa taille n_g.

Ici, la mesure associée à un groupe est $(n_g - 1)!$, le nombre d'**arrangements circulaires** possibles de ses n_g membres :

$$(n_g - 1)! \text{ ordres distincts sur un cercle.}$$

Un *arrangement circulaire* (ou *permutation circulaire*) désigne la manière de placer n objets différents autour d'un cercle, où les rotations sont considérées comme équivalentes :

- Sur une ligne, on compte $n!$ permutations distinctes.
- Sur un cercle, les n rotations d'une même disposition sont indiscernables, donc le nombre d'arrangements distincts est $n!/n = (n-1)!$.

Ainsi, $(n_g - 1)!$ représente le nombre de façons uniques de disposer les membres du groupe sur un cercle, modulo les rotations. Le logarithme de cette quantité, $\log((n_g - 1)!)$, mesure la complexité combinatoire interne du groupe.

La statistique globale de la partition s'interprète alors comme le *log-produit* de ces complexités internes :

$$S(P) = \log\left(\prod_{g \in G} (n_g - 1)!\right),$$

Elle résume la richesse combinatoire totale des organisations internes de tous les groupes.

Expression bipartie (ERPM → ERGM).

Dans la traduction ERPM, on associe au partitionnement un graphe biparti (A, G, E) où :

- A désigne l'ensemble des **acteurs** (ou éléments de la partition) ;
- G l'ensemble des **groupes** de la partition ;
- $E \subseteq A \times G$ l'ensemble des **liens d'appartenance**, chaque arête $(i, g) \in E$ indiquant que l'acteur i appartient au groupe g.

Le degré $d(g)$ d'un nœud $g \in G$ (nombre d'arêtes incidentes sur g) correspond exactement à la taille du groupe : $d(g) = n_g$.

La statistique se réécrit donc :

$$\texttt{log\_factorial\_sizes} = \sum_{g \in G} \text{lgamma}(d(g)),$$

soit une *somme de fonctions du degré des nœuds du mode 2*. Chaque nœud-groupe contribue proportionnellement à la complexité combinatoire de ses liens d'appartenance.

Développement asymptotique.

En appliquant l'approximation de Stirling, $\log((n-1)!) \approx (n - \frac{1}{2}) \log n - n + \frac{1}{2} \log(2\pi)$, on obtient :

$$S(P) \;\approx\; \sum_{g \in G} \Big[(n_g - \tfrac{1}{2}) \log n_g - n_g\Big] + C,$$

Cette expression relie l'effet à la *distribution des tailles de groupes*. En posant $p_g = n_g/N$,

$$S(P) \;\approx\; N \sum_{g} p_g \log p_g + N \log N + C',$$

À somme N fixée, S augmente lorsque la distribution (p_g) devient plus inégale : il favorise les regroupements concentrés (faible entropie).

Interprétation.

- **Combinatoire interne :** chaque groupe contribue au log du nombre de permutations circulaires possibles de ses membres. La statistique globale quantifie la "complexité interne" moyenne des groupes de la partition.
- **Lien entropique :** en régime large (n_g grand), la dérivée locale $\partial S/\partial n_g \approx \log n_g$ augmente doucement avec la taille, d'où un effet de *préférence logarithmique* pour les grands groupes. Une estimation positive de son paramètre θ favorise donc des regroupements plus concentrés.
- **Comparaison avec d'autres effets :**

Effet	Formule	Croissance
`squared_sizes`	$\sum n_g^2$	quadratique ($\propto n^2$)
`log_factorial_sizes`	$\sum \text{lgamma}(n_g)$	$n \log n$ (intermédiaire)
`groups`	$\sum 1_{n_g>0}$	constante

Cas asymptotiques.

- **Tous les groupes singletons** : $n_g = 1 \Rightarrow S = 0$.
- **Un seul grand groupe** : $S = \log((N-1)!)$ maximal.
- **Partition équilibrée** : pour un nombre total de groupes K fixé et un nombre d'acteurs N constant, la valeur de $S = \sum_g \text{lgamma}(n_g)$ est **minimale lorsque les tailles des groupes sont aussi égales que possible**, c'est-à-dire $n_g \simeq N/K \ \forall g$.

  En effet, la fonction $\text{lgamma}(n)$ est convexe en n, donc par l'inégalité de Jensen :

$$\frac{1}{K}\sum_g \text{lgamma}(n_g) \ \geq \ \text{lgamma}\left(\frac{1}{K}\sum_g n_g\right) = \text{lgamma}(N/K),$$

  L'égalité (et donc le minimum de S) est atteinte uniquement lorsque tous les groupes ont la même taille.

  Intuitivement, plus les tailles des groupes sont déséquilibrées, plus certaines valeurs n_g deviennent grandes, et comme $\text{lgamma}(n)$ croît non-linéairement ($\sim n \log n$), la somme totale S augmente. La partition la plus homogène minimise donc la "complexité combinatoire interne" globale.

Résumé analytique.

$$\texttt{log\_factorial\_sizes}(P) \ = \ \sum_{g \in G(P)} \text{lgamma}(|g|) \quad \text{où} \quad \text{lgamma}(n) = \log((n-1)!),$$

C'est une statistique additive sur les groupes, convexe en (n_g), croissant plus lentement que n_g^2, et reliée à la dispersion des tailles par approximation de Stirling. Elle n'a pas d'équivalent direct dans `ergm`, mais peut être implémentée comme un terme spécifique de type "somme de fonctions du degré (mode 2)".

Remarque finale.

L'effet `log_factorial_sizes` introduit un contrôle logarithmique du déséquilibre des tailles de groupes. Son comportement se situe entre la linéarité de `groups` et la convexité forte de `squared_sizes`.

Appel dans `erpm()`.

```
erpm(partition ~ log_factorial_sizes)
```

6 Effet `cov_ingroup`

Cadre.

On partitionne des acteurs $A = \{1, \ldots, N\}$ en groupes G. Le biparti associé est $B = (A, G, E)$. Chaque acteur i appartient à un unique groupe $g(i) \in G$. La taille d'un groupe g est $n_g = \deg_B(g) = |g|$.

Attribut et filtre de taille.

On fixe un attribut d'acteur $x = (x_i)_{i \in A}$: numérique (p. ex. âge, score) ou binaire issu d'une modalité catégorielle ciblée ($x_i = \mathbf{1}[c_i = \kappa]$). On choisit un ensemble de tailles admissibles $S \subset \mathbb{N}_{\geq 1}$ (p. ex. $S = \{k\}$, $S = \{a, \ldots, b\}$, ou $S = \mathbb{N}_{\geq 1}$).

Définition.

La statistique `cov_ingroup` pondère la somme d'attributs intra-groupe par la taille du groupe, en ne gardant que les tailles dans S :

$$\begin{aligned} T(B; x, S) &= \sum_{i \in A} x_i \, n_{g(i)} \, \mathbf{1}[\, n_{g(i)} \in S \,] \\ &= \sum_{g \in G} \Big(n_g \sum_{i \in g} x_i \Big) \, \mathbf{1}[\, n_g \in S \,], \end{aligned}$$

Forme matricielle.

Soit $M \in \{0,1\}^{N\times|G|}$ la matrice d'incidence ($M_{ig} = 1 \iff i \in g$), $\mathbf{1}_N = (1,\dots,1)^\top$, $n = M^\top \mathbf{1}_N \in \mathbb{N}^{|G|}$, $s = M^\top x \in \mathbb{R}^{|G|}$, et $w = (\mathbf{1}[\,n_g \in S\,])_{g\in G} \in \{0,1\}^{|G|}$. Alors

$$\boxed{T(B; x, S) = (w \odot n)^\top s = (w \odot n)^\top M^\top x = x^\top M \,\mathrm{Diag}(w \odot n)\,\mathbf{1}_{|G|},}$$

Change-stat pour un déplacement $i : a \to b$.

Notons $X_g = \sum_{j\in g} x_j$. Avant le déplacement : tailles n_a, n_b et sommes X_a, X_b. Après : $n'_a = n_a - 1$, $X'_a = X_a - x_i$, $n'_b = n_b + 1$, $X'_b = X_b + x_i$. La variation vaut

$$\boxed{\Delta T = \big[n'_b X'_b \mathbf{1}[\,n'_b \in S\,] - n_b X_b \mathbf{1}[\,n_b \in S\,]\big] + \big[n'_a X'_a \mathbf{1}[\,n'_a \in S\,] - n_a X_a \mathbf{1}[\,n_a \in S\,]\big],}$$

Sans restriction de taille ($S = \mathbb{N}_{\geq 1}$),

$$\boxed{\Delta T = (X_b - X_a) + (n_b - n_a + 2)\, x_i,}$$

Exemple court.

$n_a = 3,\ X_a = 5;\ n_b = 2,\ X_b = 4;\ x_i = 2.$

- Sans filtre : $\Delta_b = (2{+}1)(4{+}2) - 2\cdot 4 = 10$, $\Delta_a = (3{-}1)(5{-}2) - 3\cdot 5 = -9$, donc $\Delta T = 1$.
- Avec $S = \{3, 4, \dots\}$: avant $T = 3{\cdot}5 = 15$ (seul a compte), après $T = 3{\cdot}6 = 18$ (seul b compte), donc $\Delta T = 3$.

Lecture.

Si x est binaire, $\sum_{i\in g} x_i$ est un décompte intra-groupe de la modalité ciblée et $n_g \sum_{i\in g} x_i$ mesure «taille × effectif visé», restreint aux tailles S.

Cas limites et comportement.

- **Groupes vides.** Non définis dans un biparti valide ; la fonction les ignore.
- **Singletons.** Si $n_g = 1$, la contribution vaut $x_i \mathbf{1}[1 \in S]$ pour l'unique acteur $i \in g$.
- **Attributs manquants.** Les valeurs `NA` dans x sont propagées comme zéro pour éviter des contributions incohérentes ; elles doivent idéalement être nettoyées en amont.
- **Échelle de x.** Si x est numérique à forte variance, le terme peut dominer la log-vraisemblance ; il est souvent recommandé de centrer ou normaliser x.
- **Filtrage de tailles.** Si tous les $n_g \notin S$, la statistique vaut 0 ; c'est un cas limite normal mais à signaler (aucune contrainte informative).
- **Coût algorithmique.** La mise à jour locale se fait en $\mathcal{O}(1)$: seul le groupe affecté par un toggle est recalculé.
- **Dégénérescence.** Si x est quasi constant, la statistique est quasi linéaire et peut induire une estimation peu informative ; l'effet reste stable mais peu discriminant.

Exemple `erpm()` minimal.

```r
# Partition simple
partition <- c(1,1, 2,2,2, 3,3,3, 4,4)

# Attributs: numérique et catégoriel
nodes <- data.frame(label = paste0("A", 1:10),
                    age   = c(20,30, 40,50,60, 10,10,10, 5,5),
                    dept = c("A","B", "A","C","A", "A","A","B"
                        , "C","A"),
                    stringsAsFactors = FALSE)

# Cas 1 : covariée numérique
erpm(partition ~ cov_ingroup("age", size = 2:3),
     nodes = nodes)

# Cas 2 : covariée catégorielle avec filtrage
```

```r
erpm(partition ~ cov_ingroup("dept", category = "A", size = 3),
     nodes = nodes)

# Vérification par summary sur le biparti sous-jacent
dry <- erpm(partition ~ cov_ingroup("age", size = 2:3),
            eval_call = FALSE, nodes = nodes)
summary(dry[[2]], constraints = ~ b1part)
```

7 Effet `cov_fullmatch`

Cadre.

Acteurs $A = \{1, \dots, N\}$ partitionnés en groupes G. Biparti $B = (A, G, E)$. Taille du groupe g : $n_g = |g|$.

Attribut et filtre de tailles.

Attribut catégoriel $c = (c_i)_{i \in A}$ à valeurs dans un ensemble fini L (modalités). Filtre de tailles admissibles $S \subset \mathbb{N}_{\geq 1}$ ($S = \{k\}$, $S = \{a, \dots, b\}$, ou $S = \mathbb{N}_{\geq 1}$).

Définition.

Un groupe est *homogène* si tous ses membres partagent la même modalité. La statistique compte les groupes homogènes dont la taille est dans S :

$$\boxed{T(B; c, S) = \sum_{g \in G} \mathbf{1}[\, n_g \in S\,]\, \mathbf{1}\Big[\, \exists r \in L :\ n_{g,r} = n_g \,\Big]}$$

où $n_{g,r} = |\{\, i \in g : c_i = r \,\}|$. Variante ciblée (`category=`$\kappa$) :

$$\boxed{T_\kappa(B; c, S) = \sum_{g \in G} \mathbf{1}[\, n_g \in S\,]\, \mathbf{1}[\, n_{g,\kappa} = n_g\,],}$$

Cas des singletons : si $n_g = 1$ et c_i défini, le groupe compte.

Écriture par paires (projection mode 1).

Chaque groupe g induit une clique K_{n_g} entre ses membres. On a l'équivalence

$$\sum_{r \in L} \binom{n_{g,r}}{2} = \binom{n_g}{2} \iff \max_{r \in L} n_{g,r} = n_g,$$

c'est-à-dire « toutes les paires concordent sur c » $\Leftrightarrow$ « unanimité dans g ».

Forme matricielle.

Matrice d'incidence $M \in \{0,1\}^{N \times |G|}$, tailles $n = M^\top \mathbf{1}_N$. Pour chaque modalité r, vecteur indicateur $x^{(r)} \in \{0,1\}^N$ et sommes par groupe $s^{(r)} = M^\top x^{(r)}$. Masque de tailles $w_g = \mathbf{1}[n_g \in S]$. Alors

$$T(B; c, S) = \sum_{g=1}^{|G|} w_g\, \mathbf{1}\big[\, \max_r s_g^{(r)} = n_g \,\big], \qquad T_\kappa(B; c, S) = \sum_{g=1}^{|G|} w_g\, \mathbf{1}\big[\, s_g^{(\kappa)} = n_g \,\big],$$

Exemple minimal.

Soit trois groupes g_1, g_2, g_3 de tailles $(2, 3, 2)$ et une covariée catégorielle c :

$$g_1 = (A, A), \quad g_2 = (A, B, B), \quad g_3 = (B, B),$$

Alors

$$T(B; c, \{2, 3\}) = 2 \quad (\text{groupes } g_1 \text{ et } g_3), \qquad T_A(B; c, \{2, 3\}) = 1 \quad (\text{seul } g_1),$$

Change-stat locale.

Un toggle (i, g) n'affecte que g. Avant : $F_g = \mathbf{1}[\, n_g \in S]\mathbf{1}[\, \exists r :\ n_{g,r} = n_g\,]$. Après le toggle : F_g' avec mise à jour de n_g et du n_{g,c_i}. Variation locale :

$$\boxed{\Delta T = F_g' - F_g,}$$

Version ciblée : $\Delta T = F_g^{(\kappa)\prime} - F_g^{(\kappa)}$ avec $F_g^{(\kappa)} = \mathbf{1}[\, n_g \in S\,]\mathbf{1}[\, n_{g,\kappa} = n_g\,]$.

Effets de bord et complexité.

- **Groupes vides ou hors plage.** Les groupes de taille 0 n'existent pas dans le biparti normalisé. Si $n_g \notin S$, le groupe ne contribue pas, même homogène.
- **Valeurs manquantes.** Toute valeur `NA` dans c invalide le test d'unanimité ; le terme `cov_fullmatch` arrête l'exécution avec un message explicite (fail-fast).
- **Catégorie absente.** Si une `category=` ciblée n'est pas observée, l'initialiseur signale une erreur d'entrée avant la simulation.
- **Coût algorithmique.** À chaque toggle, seule la structure du groupe g concerné est mise à jour : tailles n_g, effectif dominant $n_{g,r^{\max}}$, et état binaire F_g. L'actualisation est donc en $\mathcal{O}(1)$, ce qui rend l'effet compatible avec les grands réseaux bipartis.
- **Dégénérescence potentielle.** Si presque tous les groupes sont unanimement homogènes (ou tous hétérogènes), la statistique est quasi constante, entraînant des coefficients extrêmes ($\pm\infty$) — comportement normal pour des cas saturés.

Appel dans `erpm()`.

```
# Cas général : tous les groupes homogènes
erpm(partition ~ cov_fullmatch("dept"))

# Filtrage par taille
erpm(partition ~ cov_fullmatch("dept", size = 2:3))

# Variante ciblée : unanimité sur la modalité "A"
erpm(partition ~ cov_fullmatch("dept", category = "A", size =
    2:3))
```

8 Homophilie discrète par cliques : `cov_match(`k`)`

Principe.

`cov_match(`k`)` mesure l'homogénéité d'un attribut catégoriel c *à ordre de clique fixé* $k \geq 1$ au sein des groupes d'une partition. Il compte, pour chaque groupe, les sous-ensembles de k acteurs partageant la même modalité.

Définition formelle.

Pour une partition stricte $B = (A, G, E)$ et $c = (c_i)$, on note $n_{g,r} = |\{\, i \in g : c_i = r \,\}|$. La statistique d'ordre k est

$$\boxed{S_k(B; c) = \sum_{g \in G} \sum_{r \in L} \binom{n_{g,r}}{k},}$$

Cas particuliers :

$$S_1(B; c) = N \quad \text{et} \quad S_2(B; c) = \sum_{i<j} \mathbf{1}[c_i = c_j]\, w_{ij},$$

où w_{ij} est le nombre de groupes communs à (i, j). Variante ciblée (`category=`κ) :

$$S_k^{(\kappa)}(B; c) = \sum_{g \in G} \binom{n_{g,\kappa}}{k},$$

Lien avec la projection 1-mode.

Chaque groupe g induit une clique K_{n_g} entre ses membres. S_k compte, dans cette projection, les *k-cliques monochromatiques* de c. Contrairement à `nodematch`, le comptage est *pondéré par co-appartenance multiple* via w_{ij} et s'étend à $k > 2$.

Change-stat locale.

Un toggle (i, g) modifie uniquement le compteur de la modalité $r^* = c_i$ dans g. Si $m = n_{g,r^*}$ avant l'opération :

$$\Delta S_k = \begin{cases} \binom{m}{k-1}, & \text{ajout } (i \notin g \to i \in g), \\ -\binom{m-1}{k-1}, & \text{retrait } (i \in g \to i \notin g), \end{cases}$$

avec la convention $\binom{n}{t} = 0$ si $n < t$. Calcul en $O(1)$.

Normalisations.

Trois variantes optionnelles :

$$S_k^{\text{none}} = \sum_{g,r} \binom{n_{g,r}}{k}, \qquad S_k^{\text{by\_group}} = \sum_g \frac{\sum_r \binom{n_{g,r}}{k}}{\binom{n_g}{k}}, \qquad S_k^{\text{global}} = \frac{1}{\binom{N}{k}} \sum_{g,r} \binom{n_{g,r}}{k},$$

`by_group` est bornée dans $[0, \#\{g : n_g \geq k\}]$ et vaut le nombre de groupes non vides pour $k = 1$.

Interprétation.

- k petit $\Rightarrow$ sensibilité à l'homogénéité locale (paires, triades).
- k grand $\Rightarrow$ focalisation sur des groupes fortement homogènes.
- Additivité sur groupes et catégories, mise à jour locale stable.

Appel dans `erpm()`.

```
# Comptage des paires monochromatiques
erpm(partition ~ cov_match("dept", clique_size = 2))

# Cliques d'ordre 3, normalisation par groupe
erpm(partition ~ cov_match("dept", clique_size = 3, normalized
    = "by_group"))

# Modalité ciblée
erpm(partition ~ cov_match("dept", clique_size = 2, category =
    "A"))
```

Résumé.

`cov_match(`k`)` est une mesure discrète de l'homophilie intra-groupe à ordre fixe. Elle compte les k-cliques monochromatiques dans la projection des acteurs, admet des normalisations `by_group`/`global`, et se met à jour en $O(1)$ par toggle. Elle constitue la brique élémentaire de la version lissée `cov_match_GW(`λ`)`.

9 Homophilie géométriquement pondérée : `cov_match_GW(`λ`)`

Principe.

Extension continue de `cov_match`, l'effet `cov_match_GW(`λ`)` agrège les coïncidences de modalités au sein des groupes selon une **série géométrique à décroissance contrôlée par** $\lambda > 1$. Il mesure l'homophilie intra-groupe à tous les ordres de cliques simultanément.

Définition formelle.

Pour une partition stricte $B = (A, G, E)$ et un attribut catégoriel $c = (c_i)$, on note $n_{g,r} = |\{\, i \in g : c_i = r \,\}|$. La statistique s'écrit :

$$S_{\text{GW}}(B; c, \lambda) = \sum_{n \geq 1} \left(-\tfrac{1}{\lambda}\right)^{n-1} \sum_{g \in G} \sum_{r \in L} \binom{n_{g,r}}{n},$$

Chaque terme $\binom{n_{g,r}}{n}$ compte les cliques monochromatiques d'ordre n dans la projection 1-mode des acteurs.

Forme fermée.

En sommant sur n par application du binôme de Newton, on obtient :

$$\boxed{S_{\text{GW}}(B; c, \lambda) = \sum_{g \in G} \sum_{r \in L} \lambda \Big[1 - \left(\tfrac{\lambda - 1}{\lambda}\right)^{n_{g,r}}\Big],}$$

Le terme $S(n_{g,r}, \lambda) = \lambda[1 - r_\lambda^{n_{g,r}}]$, avec $r_\lambda = (\lambda - 1)/\lambda \in [0, 1)$, représente la contribution d'une modalité r dans un groupe g.

Lien avec `cov_match`.

`cov_match(`k`)` correspond au cas discret d'ordre fixe k, avec

$$S_k(B; c) = \sum_{g,r} \binom{n_{g,r}}{k},$$

L'effet `cov_match_GW` en est la somme pondérée $\sum_{k\geq 1}(-1/\lambda)^{k-1} S_k$, ce qui lui confère une *continuité sur tous les ordres*. Il ne peut pas être reproduit dans `ergm` par une simple combinaison de `cov_match(k)` : il exigerait des poids géométriques fixes (offsets), dépendants de la taille maximale des groupes et instables numériquement.

Change-stat locale.

Un toggle (i, g) de modalité $r^* = c_i$ modifie uniquement le compteur n_{g,r^*}. Si $m = n_{g,r^*}$ avant l'opération :

$$\Delta S = \begin{cases} r_\lambda^m, & \text{ajout } (i \notin g \to i \in g), \\ -\, r_\lambda^{m-1}, & \text{retrait } (i \in g \to i \notin g), \end{cases}$$

Le calcul est en $O(1)$, indépendant de la taille du groupe.

Normalisations.

Trois variantes optionnelles :

$$S_{\mathrm{GW}}^{\mathrm{none}} = \sum_{g,r} \lambda(1 - r_\lambda^{n_{g,r}}),$$

$$S_{\mathrm{GW}}^{\mathrm{by\_group}} = \sum_{g} \frac{\sum_r \lambda(1 - r_\lambda^{n_{g,r}})}{\lambda(1 - r_\lambda^{n_g})},$$

$$S_{\mathrm{GW}}^{\mathrm{global}} = \frac{\sum_{g,r} \lambda(1 - r_\lambda^{n_{g,r}})}{\lambda(1 - r_\lambda^{N})},$$

Elles permettent de comparer l'homogénéité *intra-groupe* ou *globale* entre partitions de tailles différentes.

Interprétation.

- λ grand $\Rightarrow$ pondération forte des petites cliques ($k = 1, 2$).
- λ proche de 1 $\Rightarrow$ prise en compte accrue des grandes cliques.
- Additivité sur groupes et modalités, stabilité MCMC par décroissance géométrique.

Appel dans `erpm()`.

```
# Forme de base
erpm(partition ~ cov_match_GW("dept", lambda = 2))

# Normalisation et modalité ciblée
erpm(partition ~ cov_match_GW("dept", lambda = 3,
                              category = "A",
                              normalized = "by_group"))
```

Résumé.

`cov_match_GW(`λ`)` généralise `cov_match` en intégrant tous les ordres de cliques homogènes dans une mesure unique et lissée d'homophilie intra-groupe. La forme fermée $\lambda[1 - r_\lambda^{n_{g,r}}]$ garantit un calcul local, additif et stable.

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 [2] :

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

  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.

2. 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)

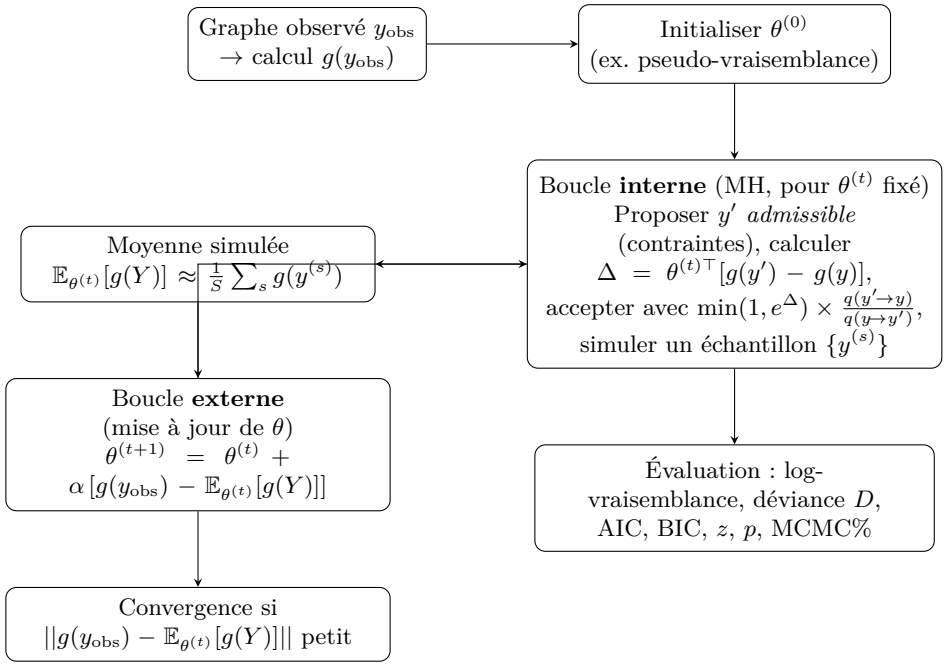
```r
library(ergm)
# Réseau biparti jouet : 4 acteurs -> 2 groupes
m <- matrix(c(1,0,
              1,0,
              0,1,
              0,1), nrow=4, byrow=TRUE)
nw <- network::network(m, bipartite=2, directed=FALSE)

# 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.