

## Stage M2

### Inf rence de mod les spatio-temporels par r seaux de neurones sur graphes

#### Laboratoire d'accueil :

-  quipe G ostatistique, Centre de G osciences, Mines Paris, PSL
- MIA Paris Saclay, AgroParisTech/INRAE, Universit  Paris-Saclay

**Encadrants :** Lucia Clarotto (AgroParisTech), Mike Pereira et Thomas Romary (Mines Paris)

**Dur e :** 6 mois (  partir de f vrier 2023)

**Comp tences recherch es :** Statistiques, statistiques spatiales, deep learning, programmation informatique (Python et/ou Julia)

**Gratification :** au SMIC

**Lieu du stage :** Centre de G osciences, Mines Paris PSL (Fontainebleau) et/ou MIA Paris Saclay, Campus Agro Paris-Saclay (Palaiseau)

#### Contexte

En g ostatistique, les processus Gaussiens sont couramment utilis s pour mod liser les donn es spatiales et spatio-temporelles, car ils permettent de pr dire simplement la variable d'int r t en des sites non mesur s tout en quantifiant l'incertitude de pr diction. Dans ce cadre, les donn es sont consid r es comme  tant issues d'une r alisation particuli re d'un champ al atoire Gaussien dont la fonction de covariance doit  tre estim e   partir des donn es. Une approche classique pour l'inf rence consiste   choisir une famille param tr e de fonctions de covariance, puis   choisir les param tres qui maximisent la vraisemblance associ e aux donn es. Dans la pratique, cette approche repr sente souvent un goulot d' tranglement, car la seule  valuation de la fonction de vraisemblance peut rapidement devenir c teuse d'un point de vue informatique quand la quantit  de donn es devient importante, notamment en spatio-temporel. Il est donc souhaitable de disposer de m thodes permettant de d duire les param tres d'un mod le de covariance sans passer par la fonction de vraisemblance.

R cemment, plusieurs m thodes utilisant des r seaux de neurones (notamment CNN et GNN) ont  t  propos es pour r pondre   ce probl me, en utilisant l'inf rence dite "amortie" [7]. Deux principales approches peuvent  tre mentionn es. La premi re vise   former un r seau neuronal capable d'identifier les param tres d'une fonction de covariance,   partir d'une r alisation d'un champ al atoire Gaussien avec cette covariance [2, 3, 6, 4]. La seconde vise plut t   obtenir une approximation de la vraisemblance en fonction des param tres et des observations, ce qui permet d'obtenir un proxy facile   calculer [5]. La surface de vraisemblance neuronale peut alors  tre maximis e pour un ensemble fixe d'observations afin d'obtenir un estimateur des param tres du mod le associ    ces observations.

## Objectifs

Un stage de M1 en 2024 s'est intéressé à coder une architecture similaire à celle proposée dans [4] sous Pytorch, basée sur de complexes réseaux convolutifs sur graphes (GNN). Le stage de M2 vise à entraîner et valider l'architecture proposée lors du stage précédent (sur des jeux de données simulées) et à développer une architecture adaptée au contexte spatio-temporel. Un enjeu de cette généralisation est la définition d'une nouvelle structure de voisinage spatio-temporel dans le GNN et l'estimation d'un plus grand nombre de paramètres, qui n'a jamais été mise en œuvre pour l'instant. Une étape successive consistera à comparer la stratégie proposée avec les méthodes d'inférence spatio-temporelle de l'état de l'art sur des jeux de données simulées. Ensuite, on cherchera à adapter l'approche pour des modèles issus des équations aux dérivées partielles stochastiques [1]. Une application à un jeu de données réelles de mesures du rayonnement solaire conclura le stage.

Ce stage pourra se poursuivre dans le cadre d'une thèse, financé par la chaire Geolearning, offrant ainsi une continuité et une opportunité d'approfondir les recherches. Les sujets qui pourront être abordés dans la thèse sont la généralisation de la méthode d'inférence pour des modèles non-stationnaires ou l'extension de l'inférence au cadre Bayésien, par des méthodes d'approximation variationnelle.

## Comment postuler ?

Pour postuler ou pour toute question, veuillez contacter Lucia Clarotto (lucia.clarotto@agroparistech.fr), Mike Pereira (mike.pereira@minesparis.psl.eu) et Thomas Romary (thomas.romary@minesparis.psl.eu). Merci de nous envoyer un CV ainsi qu'une lettre de motivation.

## Références

- [1] Lucia Clarotto, Denis Allard, Thomas Romary, and Nicolas Desassis. The spde approach for spatio-temporal datasets with advection and diffusion. *arXiv preprint arXiv :2208.14015*, 2022.
- [2] Florian Gerber and Douglas Nychka. Fast covariance parameter estimation of spatial gaussian process models using neural networks. *Stat*, 10(1) :e382, 2021.
- [3] Amanda Lenzi, Julie Bessac, Johann Rudi, and Michael L Stein. Neural networks for parameter estimation in intractable models. *Computational Statistics & Data Analysis*, 185 :107762, 2023.
- [4] Matthew Sainsbury-Dale, Jordan Richards, Andrew Zammit-Mangion, and Raphaël Huser. Neural bayes estimators for irregular spatial data using graph neural networks. *arXiv preprint arXiv :2310.02600*, 2023.
- [5] Julia Walchessen, Amanda Lenzi, and Mikael Kuusela. Neural likelihood surfaces for spatial processes with computationally intensive or intractable likelihoods. *arXiv preprint arXiv :2305.04634*, 2023.
- [6] Christopher K Wikle and Andrew Zammit-Mangion. Statistical deep learning for spatial and spatio-temporal data. *arXiv preprint arXiv :2206.02218*, 2022.
- [7] Andrew Zammit-Mangion, Matthew Sainsbury-Dale, and Raphaël Huser. Neural methods for amortized inference. *arXiv preprint arXiv :2404.12484*, 2024.