Modèles statistiques à variables latentes pour l'écologie

Examen de 2 heures

29 mars 2022

Les notes de cours et une calculatrice sont autorisées, à l'exclusion de tout autre appareil électronique (téléphone compris).

1 Algorithme EM pour l'ACP probabiliste

Modèle et notations. On considère le modèle d'analyse en composantes principales (ACP) probabiliste suivant :

$$\begin{aligned}
&\{Z_i\}_{1\leq i\leq n} \text{ iid :} && Z_i \sim \mathcal{N}(0_q, I_q) \\
&\{Y_i\}_{1\leq i\leq n} \text{ indépendants} \mid \{Z_i\}_{1\leq i\leq n} : && (Y_i \mid Z_i) \sim \mathcal{N}(AZ_i, \sigma^2 I_p)
\end{aligned} \tag{1}$$

où $q < p$, A est de dimension $p \times q$, les variables Z_i sont latentes alors que les Y_i sont observées. On note

- $Z = [Z_{ik}]_{1\leq i\leq n, 1\leq k\leq q}$ la matrice $n \times q$ contenant les variables latentes,
- $Y = [Y_{ij}]_{1\leq i\leq n, 1\leq j\leq p}$ la matrice $n \times p$ contenant les variables observées,
- $\theta = (A, \sigma^2)$ l'ensemble des paramètres de ce modèle,
- Σ et Γ les matrices :

$$\Sigma = AA^\intercal + \sigma^2 I_p, \qquad \Gamma = A^\intercal A + \sigma^2 I_q.$$

On se propose d'établir un algorithme EM pour l'estimation de θ.

Questions préliminaires.

1. Montrer que $A^\intercal \Sigma^{-1} = \Gamma^{-1} A^\intercal$.

Solution. En notant $B = \sigma^{-1} A$, on a

$$\begin{aligned}
\sigma A^\intercal \Sigma^{-1} = B^\intercal \left(I_p + BB^\intercal\right)^{-1} \quad &= B^\intercal \left(\sum_{k\geq 0} \left(BB^\intercal\right)^k / k!\right) \\
= B^\intercal \left(I_p + B \left(\sum_{k\geq 1} \left(B^\intercal B\right)^{k-1} / k!\right) B^\intercal\right) \quad &= \left(I_p + B^\intercal B \left(\sum_{k\geq 1} \left(B^\intercal B\right)^{k-1} / k!\right)\right) B^\intercal \\
= \left(\sum_{k\geq 0} \left(B^\intercal B\right)^k / k!\right) B^\intercal \quad = \left(I_p + B^\intercal B\right)^{-1} B^\intercal \quad &= \sigma \Gamma^{-1} A^\intercal.
\end{aligned}$$

Alternativement, on peut remarquer que Σ et Γ sont inversibles et que, donc,

$$A^\intercal \Sigma^{-1} = \Gamma^{-1} A^\intercal \qquad \Leftrightarrow \qquad A^\intercal = \Gamma^{-1} A^\intercal \Sigma \qquad \Leftrightarrow \qquad \Gamma A^\intercal = A^\intercal \Sigma$$

qui se vérifie facilement.

2. Montrer que $I_q - A^\intercal \Sigma^{-1} A = \sigma^2 \Gamma^{-1}$.

Solution. On vérifie que

$$\begin{aligned}\Gamma\left(I_q - A^\intercal \Sigma^{-1} A\right) &= \left(A^\intercal A + \sigma^2 I_q\right)\left(I_q - A^\intercal \Sigma^{-1} A\right) \\ &= A^\intercal A + \sigma^2 I_q - A^\intercal A A^\intercal \Sigma^{-1} A - \sigma^2 A^\intercal \Sigma^{-1} A \\ &= A^\intercal A + \sigma^2 I_q - A^\intercal\left(A A^\intercal + \sigma^2 I_p\right)\Sigma^{-1} A \quad = \sigma^2 I_q\end{aligned}$$

et que $\left(I_q - A^\intercal \Sigma^{-1} A\right)\Gamma = \sigma^2 I_q$.

Estimation par EM.

3. Écrire la log-vraisemblance complète $\log p_\theta(Y, Z)$ du modèle (1).

Solution. En omettant les termes ne dépendant pas de θ, on a

$$\log p_\theta(Y, Z) = \log p_\theta(Z) + \log p_\theta(Y \mid Z) = -\frac{1}{2}\sum_i \|Z_i\|^2 - \frac{np}{2}\log\sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_i \|Y_i - AZ_i\|^2.$$

4. Déterminer la loi jointe d'un couple (Y_i, Z_i) pour $1 \leq i \leq n$ quelconque.

Solution. Les couples $\{(Y_i, Z_i)\}_{1 \leq i \leq n}$ sont iid de loi normale

$$\begin{bmatrix} Y_i \\ Z_i \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{bmatrix} 0_p \\ 0_q \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Sigma & A \\ A^\intercal & I_q \end{bmatrix}\right).$$

5. En déduire que

$$M_i := \mathbb{E}(Z_i \mid Y) = \Gamma^{-1} A^\intercal Y_i, \qquad Q_i := \mathbb{E}(Z_i Z_i^\intercal \mid Y) = \sigma^2 \Gamma^{-1} + M_i M_i^\intercal. \tag{2}$$

Solution.

a) L'indépendance des couples (Y_i, Z_i) nous assure que $M_i = \mathbb{E}(Z_i \mid Y_i)$ et $\mathbb{V}(Z_i \mid Y) = \mathbb{V}(Z_i \mid Y_i)$.

b) La loi jointe de (Y_i, Z_i) établie à la question précédente implique que $M_i = A^\intercal \Sigma^{-1} Y_i$ et $\mathbb{V}(Z_i \mid Y_i) = I_q - A^\intercal \Sigma^{-1} A$.

c) Les questions préliminaires impliquent que $M_i = \Gamma^{-1} A^\intercal Y_i$ et $\mathbb{V}(Z_i \mid Y) = \sigma^2 \Gamma^{-1}$.

d) On obtient finalement Q_i en utilisant l'identité $\mathbb{E}(Z_i Z_i^\intercal \mid Y) = \mathbb{V}(Z_i \mid Y) + M_i M_i^\intercal$.

(Noter que $Z_i Z_i^\intercal \neq \|Z_i\|^2$ et que $\mathbb{E}(\|Z_i\|^2 \mid Y) = \text{tr}(\mathbb{V}(Z_i \mid Y)) + M_i^\intercal M_i$)

6. Écrire l'espérance conditionnelle de la log-vraisemblance complète $\mathbb{E}_\theta(\log p_\theta(Y, Z) \mid Y)$ en fonction des M_i et Q_i.

Solution. On a

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_\theta(\log p_\theta(Y,Z)\mid Y) &= -\frac{np}{2}\log\sigma^2 - \frac{1}{2}\sum_i \mathrm{tr}(Q_i) \\
&\quad - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_i \|Y_i\|^2 + \frac{1}{\sigma^2}\sum_i M_i^\intercal A^\intercal Y_i - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_i \mathrm{tr}(A^\intercal A Q_i) \\
&= -\frac{np}{2}\log\sigma^2 - \frac{1}{2}\sum_i \mathrm{tr}(Q_i) \\
&\quad - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_i \left(\|Y_i - AM_i\|^2 + \mathrm{tr}(A^\intercal A \mathbb{V}(Z_i\mid Y))\right)
\end{aligned}$$

7. En déduire les formules de mise à jour à l'étape h de A^h et $(\sigma^2)^h$ en fonction des moments conditionnels M_i^{h-1} et Q_i^{h-1} calculés à l'étape précédente.

Solution. On calcule les dérivées de $f^{h-1}(\theta) := \mathbb{E}_{\theta^{h-1}}[\log p_\theta(Y,Z)\mid Y]$ par rapport à σ^2 et A :

$$\begin{aligned}
\partial_{\sigma^2} f^{h-1} &= -\frac{np}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4}\sum_i \left(\|Y_i - AM_i\|^2 + \mathrm{tr}(A^\intercal A \mathbb{V}(Z_i\mid Y))\right), \\
\partial_A f^{h-1} &= \frac{1}{\sigma^2}\left(\sum_i Y_i M_i^\intercal - A\sum_i Q_i\right)
\end{aligned}$$

qui s'annulent respectivement pour

$$\begin{aligned}
(\sigma^2)^h &= \frac{1}{np}\sum_i \left(\|Y_i - AM_i\|^2 + \mathrm{tr}\left(A^\intercal A \mathbb{V}(Z_i\mid Y)\right)\right), \\
A^h &= \left(\sum_i Y_i M_i^\intercal\right)\left(\sum_i Q_i\right)^{-1}.
\end{aligned}$$

Estimation alternative.

8. En combinant les formules obtenues à la question précédente avec l'équation (2), montrer que les estimateurs du maximum de vraisemblance $\widehat{A}$ et $\widehat{\sigma}^2$ satisfont les équations de point fixe suivantes :

$$\widehat{A} = S\widehat{A}\left(\widehat{\sigma}^2 I_q + \widehat{\Gamma}^{-1}\widehat{A}^\intercal S\widehat{A}\right)^{-1}, \qquad \widehat{\sigma}^2 = \mathrm{tr}\left(S - S\widehat{A}\widehat{\Gamma}^{-1}\widehat{A}\right)/p.$$

où $\widehat{\Gamma} = \widehat{A}^\intercal\widehat{A} + \widehat{\sigma}^2 I_q$ et S est la matrice de covariance empirique : $S = \left(\sum_i Y_i Y_i^\intercal\right)/n$.

Solution. Á convergence, on doit avoir $\widehat{A} = A^h = A^{h-1}$ et $\widehat{\sigma}^2 = (\sigma^2)^h = (\sigma^2)^{h-1}$, soit

$$\begin{aligned}
\widehat{A} &= \left(\sum_i Y_i M_i^\intercal\right)\left(\sum_i Q_i\right)^{-1} = \left(\sum_i Y_i Y_i^\intercal\right)\widehat{A}\widehat{\Gamma}^{-1}\left(n\widehat{\Gamma}^{-1} + \widehat{\Gamma}^{-1}\widehat{A}\sum_i Y_i Y_i^\intercal \widehat{A}^\intercal\widehat{\Gamma}^{-1}\right)^{-1} \\
&= S\widehat{A}^\intercal\left(\widehat{\sigma}^2 I_q + \widehat{\Gamma}^{-1}\widehat{A}^\intercal S\widehat{A}\right)^{-1}
\end{aligned}$$

et idem pour $\widehat{\sigma}^2$.

9. En déduire un algorithme alternatif à EM pour l'estimation de $\theta = (A, \sigma^2)$ par maximum de vraisemblance.

> *Solution.* L'algorithme du point fixe consistant à itérer les équations précédentes jusqu'à convergence.

2 Distribution jointe d'absence et d'abondance d'espèces

Modèle et notations. On s'intéresse à la présence et à l'abondance de p espèces animales dans n sites. On observe pour cela

— Y_{ij} = le nombre (éventuellement nul) d'individus de l'espèce j observés dans le site i ($Y_{ij} \in \mathbb{N}$) et

— x_i = vecteur de covariables environnementales (incluant une constante) décrivant le site i ($x_i \in \mathbb{R}^d$).

On définit $\widetilde{Y}_{ij}$ la variable indicatrice d'absence de l'espèce j dans le site i :

$$\widetilde{Y}_{ij} = \mathbb{I}\{Y_{ij} = 0\}$$

et on note

— $Y = [Y_{ij}]_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p}$ la matrice $n \times p$ des abondances,

— $X = [x_{ik}]_{1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq d}$ la matrice $n \times d$ des covariables

— $\widetilde{Y} = [\widetilde{Y}_{ij}]_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p}$ la matrice $n \times p$ des absences.

Questions.

1. Rappeler le modèle Poisson log-normal permettant de décrire les abondances en fonction des covariables environnementales et des interactions entre espèces.

> *Solution.*
>
> $$\begin{aligned} (Z_i)_i \text{ iid} : & \qquad Z_i \sim \mathcal{N}(0, \Sigma), \\ (Y_{ij})_{ij} \text{ indep.} \mid (Z_i) : & \qquad (Y_{ij} \mid Z_{ij}) \sim \mathcal{P}(\exp(x_i^\intercal \beta_j + Z_{ij})). \end{aligned}$$

2. Proposer un modèle analogue au modèle Poisson log-normal permettant de décrire les absences en fonction des covariables environnementales et des interactions entre espèces.

> *Solution.*
>
> $$\begin{aligned} (\widetilde{Z}_i)_i \text{ iid} : & \qquad \widetilde{Z}_i \sim \mathcal{N}(0, \widetilde{\Sigma}), \\ (\widetilde{Y}_{ij})_{ij} \text{ indep.} \mid (\widetilde{Z}_i) : & \qquad (\widetilde{Y}_{ij} \mid \widetilde{Z}_{ij}) \sim \mathcal{B}((1 + \exp(-x_i^\intercal \widetilde{\beta}_j - \widetilde{Z}_{ij})^{-1}). \end{aligned}$$

3. Proposer un modèle décrivant conjointement les absences et les abondances en fonction des covariables environnementales et des interactions entre espèces.
Tracer le modèle graphique orienté associé à ce modèle et interpréter chacun de ses paramètres.

> *Solution.* En supposant que les processus de colonisation (présence/absence) et d'abondance

sont gouvernés par des paramètres distincts :

$$
\begin{aligned}
(\widetilde{Z}_i)_i \text{ iid} : \quad & \widetilde{Z}_i \sim \mathcal{N}(0, \widetilde{\Sigma}), \\
(\widetilde{Y}_{ij})_{ij} \text{ indep.} \mid (\widetilde{Z}_i) : \quad & (\widetilde{Y}_{ij} \mid \widetilde{Z}_{ij}) \sim \mathcal{B}((1 + \exp(-x_i^\intercal \widetilde{\beta}_j - \widetilde{Z}_{ij})^{-1}), \\
(Z_i)_i \text{ iid} : \quad & Z_i \sim \mathcal{N}(0, \Sigma), \\
(Y_{ij})_{ij} \text{ indep.} \mid (Z_i), (\widetilde{Y}_{ij}) : \quad & (Y_{ij} \mid Z_{ij}, \widetilde{Y}_{ij}) \sim \widetilde{Y}_{ij}\delta_0 + (1 - \widetilde{Y}_{ij})\mathcal{P}(\exp(x_i^\intercal \beta_j + Z_{ij})).
\end{aligned}
$$

3 Classification non supervisée de génotypes

Modèle et notations. On considère un échantillon de $n = 74$ souris (*mus musculus*) dont on a relevé le génotype pour $p = 15$ marqueurs génétiques (nommés `Aat`, `Amy`, `Es1`, `Es2`, `Es10`, `Hbb`, `Gpd1`, `Idh1`, `Mod1`, `Mod2`, `Mpi`, `Np`, `Pgm1`, `Pgm2` et `Sod`, qui peuvent être vus comme des variables catégorielles). On cherche à identifier des individus issus de groupes génétiquement distincts. On se propose d'utiliser à cette fin un modèle de mélange de lois multinomiales.

On note

— Y_{ij} le génotype de l'individu i au marqueur j pour $1 \leq i \leq n$ et $1 \leq j \leq p$,

— m_j le nombre d'allèles du j-ème marqueurs ($1 \leq j \leq p$).

On suppose le modèle de mélange à K groupes suivant

$$
\begin{aligned}
(Z_i)_{1 \leq i \leq n} \text{ iid} : \quad & Z_i \sim \mathcal{M}(1, \pi), \\
(Y_i)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p} \text{ independants} \mid (Z_i) : \quad & (Y_{ij} \mid Z_i = k) \sim \mathcal{M}(1, \gamma_{kj})
\end{aligned}
\tag{3}
$$

où $\pi \in [0,1]^K$, $\sum_{k=1}^K \pi_k = 1$, et pour chaque $1 \leq j \leq p$, $\gamma_{kj} \in [0,1]^{m_j}$, $\sum_{a=1}^{m_j} \gamma_{kja} = 1$.

Questions.

1. Interpréter chacun des paramètres π_k et γ_{kja} de ce modèle.

Solution.
— π_k = proportions d'individu de la population issue du groupe k.
— γ_{kja} = probabilité qu'un individu issu de la population k porte l'allèle a au marqueur j.

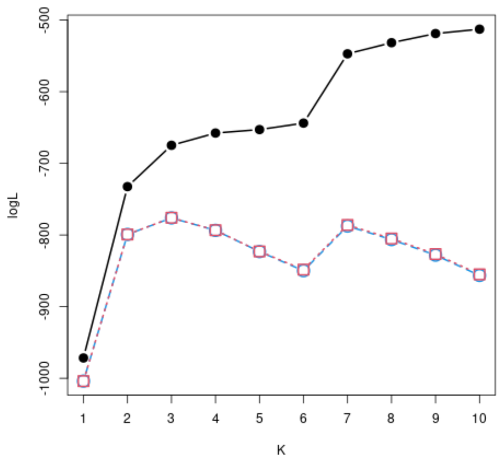
2. Discuter les hypothèses d'indépendances.

Solution.
— L'indépendance des Z_i suppose que les individus ne sont pas apparentés.
— L'indépendance conditionnelles des Y_{ij} suppose que les marqueurs sont indépendants.

Questions.

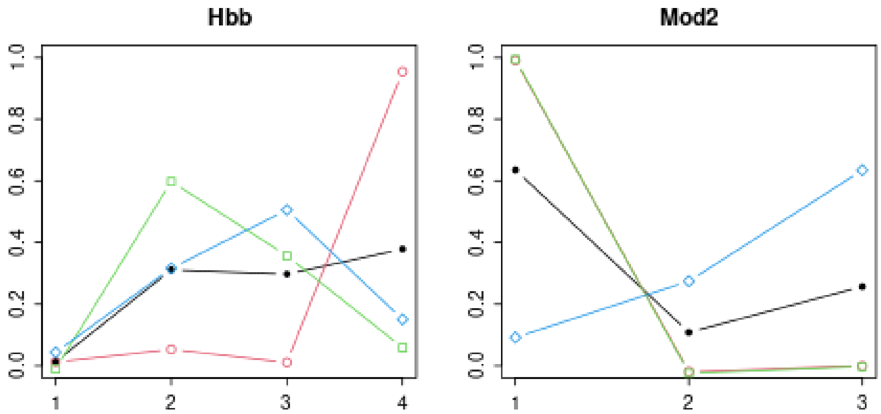
3. La figure suivante donne les valeurs de la log-vraisemblance (●), du critère BIC (□) et du critère

ICL (◯) du modèle (3) pour K allant de 1 à 10 groupes.



Justifier le choix de $\widehat{K} = 3$.

4. La figure suivante donne les estimations des fréquences alléliques γ_{ja} pour le modèle à $K = 3$ classes pour les marqueurs `Hbb` et `Mod2`. Abcsisse = allèle du marqueur, ordonnée = fréquence. Légende : • = fréquence de chaque allèle dans l'échantillon total, ∘ = fréquence estimée dans le groupe 1, □ = dans le groupe 2, ⋄ = dans le groupe 3.



Quels groupes du mélange chacun de ces marqueurs permet-il le mieux de distinguer ?

5. Les proportions estimées pour le modèle à 3 groupes valent

$$\widehat{\pi} = [0.324, 0.270, 0.406].$$

Pour les marqueurs `Gpd1` et `Mpi`, on obtient les estimations suivantes pour les fréquences alléliques γ_{kja} dans chaque groupe :

Marqueur Gpd1	$a = 1$	$a = 2$	$a = 3$	$a = 4$	$a = 5$	$a = 6$
$k = 1$	0	0	0	1	0	0
$k = 2$	0.05	0.95	0	0	0	0
$k = 3$	0.033	0.167	0.2	0.301	0.167	0.133
Population	0.027	0.324	0.081	0.446	0.068	0.054

Marqueur Mpi	$a = 1$	$a = 2$	$a = 3$	$a = 4$
$k = 1$	0	1	0	0
$k = 2$	0.05	0	0.4	0.55
$k = 3$	0	1	0	0
Population	0.014	0.73	0.108	0.149

A partir de ces valeurs, donner une estimation, selon de modèle (3), de la probabilité conditionnelle qu'un individu du groupe k porte simultanément les deuxièmes allèles des marqueurs `Gpd1`

et `Mpi` : $\Pr\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2 \mid Z_i = k\}$ pour chaque $k = 1, 2, 3$.
En déduire une estimation de la probabilité marginale $\Pr\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2\}$.

Solution. Du fait de l'hypothèse d'independance conditionnelle des marqueurs, on a

$$\Pr\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2 \mid Z_i = k\} = \Pr\{Y_{i,Gpd1} = 2 \mid Z_i = k\} \times \Pr\{Y_{i,Mpi} = 2 \mid Z_i = k\}$$

qui donne $\widehat{\Pr}\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2 \mid Z_i = k\} = 0$ $(k = 1)$, 0 $(k = 2)$, 0.167 $(k = 3)$.
En intègrant sur le groupe caché

$$\Pr\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2\} = \sum_k \pi_k \Pr\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2 \mid Z_i = k\},$$

on obtient $\widehat{\Pr}\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2\} = 0.068$.

Solution.
— L'indépendance des Z_i suppose que les individus ne sont pas apparentés.
— L'indépendance conditionnelles des Y_{ij} suppose que les marqueurs sont indépendants.

6. Comparer ce résultat avec les fréquences alléliques moyennes dans la population et commenter.

Solution. L'hypothèse d'indépendance marginale des marqueurs dans la population amènerait à l'estimation

$$\widetilde{\Pr}\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2\} = 0.324 \times 0.73 = 0.237$$

qui diffère notablement de $\widehat{\Pr}\{Y_{i,Gpd1} = Y_{i,Mpi} = 2\} = 0.068$.
Le modèle de mélange ne suppose qu'une indépendance conditionnelle des marqueurs, mais la structure en groupes induit une dépendance marginale.

Comparaison avec des sous-espèces connues. On sait par ailleurs que les 74 individus de l'échantillon appartiennent en fait à trois sous-espèces connues (*castaneus*, *domesticus* et *musculus*) et à une population vivant près du lac Casitas (Californie). Le tableau suivant croise l'appartenance à ces populations avec les groupes obtenus par le modèle de mélange :

	Casitas	*castaneus*	*domesticus*	*musculus*	Total
$k = 1$	1	0	23	0	24
$k = 2$	0	11	0	9	20
$k = 3$	29	0	1	0	30
Total	30	11	24	9	74

Questions.

7. Les marqueurs permettent-ils de distinguer les sous-espèces connues entre elles ?
Quelles sont les sous-espèces génétiquement les plus proches ?
8. La population vivant près du lac Casitas peut-elle être rattachée à une sous-espèce connue.