



Projet Master 1 SSD

Un modèle pour les nids de mouettes

Rédigé par

CARVAILLO Thomas

CÔME Olivier

PRALON Nicolas

Encadrante : Elodie BRUNEL-PICCININI

IMAG
INSTITUT MONTPELLIERAIN
ALEXANDER GROTHENDIECK

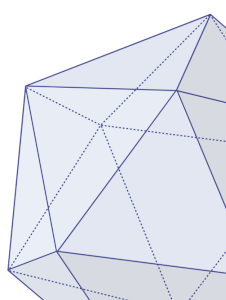


Table des matières

Introduction	2
1 Modélisation du problème et liminaire mathématique	3
1.1 Modélisation du problème	3
1.2 Une histoire de densités	4
1.3 Une approche élémentaire	5
1.4 Une situation concordante à la réalité	6
2 L'algorithme EM	11
2.1 Présentation laconique et pseudo-code	11
2.2 Une preuve de la croissance	12
2.3 A remplir - Le choix des valeurs initiales	14
2.4 A remplir - Implémentation en langage <i>R</i>	14
Bibliographie	15
Annexes	16
A Le package <i>mclust</i>	17
A.1 Un exemple sur un mélange à deux lois	18
A.2 Un exemple sur un mélange à trois lois	20

Introduction

Chapitre 1

Modélisation du problème et liminaire mathématique

1.1 Modélisation du problème

Nous allons pour commencer donner une première définition, qui est au coeur du présent projet.

Définition 1 (Loi de mélange). On appelle loi de mélange toute loi dont la densité s'écrit sous la forme d'une combinaison convexe de diverses densités. C'est-à-dire que si l'on se donne J variables aléatoires X_1, \dots, X_J de densité respective $f_1(x), \dots, f_J(x)$, alors est appelée loi de mélange toute variable aléatoire X dont la densité f s'exprime sous la forme

$$f(x) := \sum_{i=1}^J \alpha_i f_i(x), \alpha_i \in \mathbb{R}$$

Afin de modéliser commodément le problème, nous introduisons les variables aléatoires suivantes :

- ✂ La variable aléatoire X , modélisant la taille des nids
- ✂ Z , la variable aléatoire représentant l'espèce de mouette qui a construit le nid

Enfin, nous nous placerons sous les hypothèses suivantes :

Hypothèse 1. Nous supposons que, $\forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket$, la taille des nids d'une espèce j (*i.e.* X conditionnellement à $(Z = j)$) suit une loi normale $\mathcal{N}(\mu_j, v_j)$. Nous dénoterons par $f_\theta(x|Z = j) := \gamma_{\mu_j, v_j}(x)$ cette densité.

Hypothèse 2. Soit $\Theta := \{\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{1 \leq j \leq J} \text{ tels que } \alpha_j > 0 \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \text{ et } \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1\}$. Soient X_1, \dots, X_n un échantillon de même loi que X . On supposera qu'il existe un $\theta \in \Theta$ tel que les données récoltées, ici les tailles des nids, soient la réalisation du précédent échantillon.

Proposition 1. La variable Z est discrète et à valeur dans un sous-ensemble fini de \mathbb{N} , elle suit donc une loi

$$\sum_{j=1}^J \alpha_j \delta_j$$

où J représente le nombre d'espèce de mouettes considéré et les $\alpha(j)$ sont des réels, positifs stricts, représentant la proportion de nids de l'espèce j , tels que $\sum_{j=1}^J \alpha_j = 1$.

Il s'ensuit la proposition suivante, qui sera la racine du présent projet.

Proposition 2. La distribution de la taille des nids de mouettes, *i.e.* X , admet pour densité, au point x et par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R} , la fonction f_θ définie comme suit

$$f_\theta(x) = \sum_{j=1}^J \alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(x)$$

Démonstration. On vérifie que l'on obtient bien une densité de probabilité, la forme de cette dernière étant la conséquence directe de la définition de la variable aléatoire X :

$$\int_{\mathbb{R}} f_\theta(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \sum_{j=1}^J \alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(x) dx = \sum_{j=1}^J \alpha_j \int_{\mathbb{R}} \gamma_{\mu_j, v_j}(x) dx = \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1$$

☞

Le but de ce projet sera d'étudier des méthodes permettant l'estimation des divers paramètres de cette densité. Nous dénoterons par $\theta := (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{1 \leq j \leq J}$ les vecteurs des ces dits paramètres.

1.2 Une histoire de densités

Introduisons une dernière densité et une dernière probabilité, qui nous seront fort utile quant à l'expression des Log-vraisemblances conditionnelles :

Proposition 3. *Nous avons les résultats suivant :*

1. *La densité du vecteur aléatoire (X, Z) nous est donnée par :*

$$\begin{aligned} h_\theta : \mathbb{R} \times \{1, \dots, J\} &\rightarrow \mathbb{R}_+ \\ (x, j) &\mapsto \alpha_j \times \gamma_{\mu_j, v_j}(x) \end{aligned}$$

2. *La probabilité de la loi de Z sachant $X = x$ nous est donnée par :*

$$\mathbb{P}_\theta(Z = j | X = x) = \frac{\gamma_{\mu(z), v(z)} \times \alpha_z}{\sum_{i=1}^J \alpha_i \times \gamma_{\mu(i), v(i)}(x)}$$

Démonstration. Par propriété des lois conditionnelles, nous avons que

$$h_\theta(x, j) = f_\theta(x | Z = j) \times \mathbb{P}_\theta(Z = j) = f_\theta(x) \times \mathbb{P}_\theta(Z = j | X = x)$$

De ceci, nous déduisons aisément la densité de la loi du vecteur aléatoire (X, Z) :

$$h_\theta(x, j) = \alpha_j \times \gamma_{\mu_j, v_j}(x)$$

Puis la densité de la loi conditionnelle de Z sachant $X = x$:

$$\mathbb{P}_\theta(Z = j | X = x) = \frac{\gamma_{\mu(z), v(z)} \times \alpha_z}{\sum_{i=1}^J \alpha_i \times \gamma_{\mu(i), v(i)}(x)}$$

☞

Remarque 1. Nous pouvons dès à présent noter que pour un échantillon X_1, \dots, X_n de même loi que X , nous avons

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, h_\theta(X_i, j) = f_\theta(X_i) \times \mathbb{P}_\theta(Z = j | X = X_i)$$

Ceci nous sera utile dans la suite.

Nous allons dès à présent nous intéresser à l'estimation de ces paramètres.

1.3 Une approche élémentaire

Regardons dans un premier temps un cas simplifié, un cas ne décrivant pas la réalité des observations mais qui a le mérite de constituer une agréable entrée en matière.

Nous supposons ici qu'ont été relevés simultanément et les mesures des tailles des nids et l'espèce de mouette qui l'a construit. Le modèle ici considéré est donc composé des couples (X_i, Z_i) , $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$. On considérera dès lors la fonction de densité $h_\theta(x, z)$.

L'estimation des divers paramètres est alors élémentaire, en témoigne les propositions suivantes :

Proposition 4 (Fonction de Log-vraisemblance). *La Log-vraisemblance du modèle s'écrit*

$$\mathcal{L}_\theta(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) = \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i))$$

où les A_j sont définis par $A_j := \{i \in \llbracket 1, n \rrbracket \text{ tels que } Z_i = j\}$ i.e. $\bigcup_{j=1}^J A_j = \llbracket 1, n \rrbracket$

Démonstration. La Log-vraisemblance du modèle s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\theta(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) &= \ln \left(\prod_{i=1}^n h_\theta(X_i, Z_i) \right) \\ &= \ln \left(\prod_{i=1}^n \alpha_{Z_i} \gamma_{\mu_{Z_i}, v_{Z_i}}(X_i) \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \ln(\alpha_{Z_i}) + \ln(\gamma_{\mu_{Z_i}, v_{Z_i}}(X_i)) \end{aligned}$$

Z_i est à valeur dans $\llbracket 1, J \rrbracket$, on partitionne donc $I := \llbracket 1, n \rrbracket$ comme $I = \bigcup_{j=1}^J A_j$ pour obtenir

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\theta(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) &= \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\alpha_{Z_i}) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \\ &= \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \\ &= \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \end{aligned}$$

2

Nous pouvons dès lors maximiser la log-vraisemblance afin d'obtenir les estimateurs souhaités :

Proposition 5 (Estimateurs). *Les estimateurs du maximum de vraisemblance $\hat{\alpha}_j$ (resp. $\hat{\mu}_j$, et \hat{v}_j) de α_j (resp. μ_j et v_j) sont donnés par*

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_j &= \frac{\#A_j}{n} \\ \hat{\mu}_j &= \frac{\sum_{i \in A_j} X_i}{\#A_j} \\ \hat{v}_j &= \frac{\sum_{i \in A_j} (X_i - \hat{\mu}_j)^2}{\#A_j} \end{aligned}$$

Démonstration. Soit $\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{j \in \llbracket 1, J \rrbracket}$. Il s'agit de déterminer

$$\operatorname{argmax}_{\theta \in \mathbb{R}^{3J}, \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1} \left(\sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(x_i)) \right)$$

Nous avons donc à résoudre un programme de minimisation d'une fonction convexe sur un convexe avec une contrainte égalité, il est ainsi naturel de faire appel au Lagrangien. Ce dernier s'écrit

$$\begin{aligned} L(\theta) &= \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(x_i)) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^J \alpha_j - 1 \right) \\ &= \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi v_j}} \exp \left(-\frac{(x_i - \mu_j)^2}{2v_j} \right) \right) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^J \alpha_j - 1 \right) \\ &= \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \left(\frac{-1}{2} \ln(2\pi v_j) - \frac{(x_i - \mu_j)^2}{2v_j} \right) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^J \alpha_j - 1 \right) \end{aligned}$$

Il reste maintenant à résoudre le système suivant, afin d'obtenir le vecteur $\hat{\theta} := (\hat{\alpha}_j, \hat{\mu}_j, \hat{v}_j)_{j \in \llbracket 1, J \rrbracket}$ solution du programme.

$$\begin{cases} \frac{\#A_j}{\hat{\alpha}_j} - \lambda &= 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} (x_i - \hat{\mu}_j) / \hat{v}_j &= 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} \frac{-0.5 \times 2 \times \pi}{2\pi \hat{v}_j} + \frac{(x_i - \hat{\mu}_j)^2}{2\hat{v}_j^2} &= 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{j=1}^J \hat{\alpha}_j &= 1 \end{cases}$$

Ceci équivaut à

$$\begin{cases} \frac{\#A_j}{\hat{\alpha}_j} &= \lambda \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} x_i &= \sum_{i \in A_j} \hat{\mu}_j \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} (x_i - \hat{\mu}_j)^2 &= \sum_{i \in A_j} \hat{v}_j \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{j=1}^J \hat{\alpha}_j &= 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\#A_j}{\hat{\alpha}_j} &= \lambda \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} \frac{x_i}{\#A_j} &= \hat{\mu}_j \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i \in A_j} \frac{(x_i - \hat{\mu}_j)^2}{\#A_j} &= \hat{v}_j \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{j=1}^J \hat{\alpha}_j &= 1 \end{cases}$$

En sommant les J premières lignes du système, on obtient $\sum_{j=1}^J \#A_j = \sum_{j=1}^J \hat{\alpha}_j \lambda$, i.e. $\lambda = n$. En injectant ceci dans le précédent système, on obtient finalement ce qui était annoncé :

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_j &= \frac{\#A_j}{n} \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \hat{\mu}_j &= \sum_{i \in A_j} \frac{x_i}{\#A_j} \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \hat{v}_j &= \sum_{i \in A_j} \frac{(x_i - \hat{\mu}_j)^2}{\#A_j} \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \end{cases}$$

1.4 Une situation concordante à la réalité

Nous nous placerons désormais dans un contexte tout autre que celui du paragraphe précédent, un contexte concordant davantage à la réalité. Dans ce qui suit, nous supposons que ne sont observées que les tailles des

nids, les diverses espèces de mouettes les ayant construit étant en quelques sortes des données "cachées". Nous avons donc un échantillon X_1, \dots, X_n de même loi que la variable X comme définie ci-dessus. On définit \mathcal{L}_{obs} la log-vraisemblance des observations, nous obtenons ainsi

Définition 2. La log-vraisemblance des observations s'écrit

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta, X_1, \dots, X_n) := \ln \left(\prod_{i=1}^n f_{\theta}(X_i) \right) = \sum_{i=1}^n \ln \left(\sum_{j=1}^J \alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(X_i) \right)$$

Nous voyons dès lors que l'existence d'une expression analytique du maximum de la log-vraisemblance n'est pas assurée. Il est donc nécessaire de trouver un moyen d'approcher les valeurs des différents estimateurs. Pour ce faire, on définit une log-vraisemblance des couples (X_i, Z_i) sachant le vecteurs des observations X_1, \dots, X_n .

Proposition 6 (log-vraisemblance conditionnelle). *On définit la log-vraisemblance $\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n)$ conditionnelle par*

$$\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) = \mathbb{E}_{\tilde{\theta}}[\mathcal{L}_{\theta}(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) | X_1, \dots, X_n]$$

Nous allons maintenant travailler sur l'expression de la log-vraisemblance conditionnelle et en donner une expression simplifiée, qui nous sera fort utile ultérieurement, et une expression plus substantielle, qui nous sera immédiatement utile.

Proposition 7. *Nous avons*

$$\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(h_{\theta}(X_i, j)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)$$

Démonstration. En effet

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) &= \mathbb{E}_{\tilde{\theta}}[\mathcal{L}_{\theta}(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) | X_1, \dots, X_n] \\ &= \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[\ln \left(\prod_{i=1}^n h_{\theta}(X_i, Z_i) \right) | X_1, \dots, X_n \right] \\ &= \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{\tilde{\theta}}[\ln(h_{\theta}(X_i, Z_i)) | X_1, \dots, X_n] \end{aligned}$$

Or, les couples (X_i, Z_i) sont indépendants, donc

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) &= \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{\tilde{\theta}}[\ln(h_{\theta}(X_i, Z_i)) | X_i] \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(h_{\theta}(X_i, j)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \end{aligned}$$

2

Nous nous appuyerons sur l'expression suivante pour l'expression des estimateurs du maximum de vraisemblance :

Proposition 8. *La fonction $\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n)$ se réécrit sous la forme suivante :*

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) + \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \right) \log(\alpha_j) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \left(\log(v_j) + \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \right) \end{aligned}$$

Démonstration. Il suffit de partir de la forme précédente de la log-vraisemblance conditionnelle, on a ainsi :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(h_{\theta}(X_i, j)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J (\ln(\alpha_j) + \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i))) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\alpha_j) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)
\end{aligned}$$

Traitons pour commencer la double somme

$$\Delta := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)$$

Nous avons :

$$\begin{aligned}
\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi v_j}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j}} \\
\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) &= \frac{\alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}}{\sum_{i=1}^J \alpha_j \gamma_{\mu_i, v_i}}
\end{aligned}$$

La double somme devient alors

$$\begin{aligned}
\Delta &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi v_j}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j}} \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi v_j}} \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) - \frac{1}{2} \left(\frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J -\frac{1}{2} \ln(2\pi) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) - \frac{1}{2} \ln(v_j) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) - \frac{1}{2} \left(\frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \left(\ln(v_j) + \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\
&= -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \times \left(\ln(v_j) + \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \right)
\end{aligned}$$

On obtient de fait le résultat espéré :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n) &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) + \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \right) \times \ln(\alpha_j) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \times \left(\ln(v_j) + \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \right)
\end{aligned}$$

Nous allons dès à présent énoncer une proposition vitale, celle de l'expression des estimateurs du maximum de vraisemblance de la log-vraisemblance conditionnelle. L'expression de ces derniers seront le pivot de l'algorithme EM, que nous présenterons dans le chapitre suivant.

Proposition 9. La fonction $\theta \mapsto \mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n)$ admet un unique maximum θ_M donné par :

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_j &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \\ \hat{\mu}_j &= \frac{\sum_{i=1}^n X_i \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)}{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)} \\ \hat{v}_j &= \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_j)^2 \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)}{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)}\end{aligned}$$

Démonstration. Soit $\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)$. Il s'agit ici de maximiser la fonction $\theta \mapsto \mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n)$

Puisqu'il s'agit d'un problème d'optimisation, nous appliquons la même méthode que précédemment, en introduisant le Lagrangien du problème sous la contrainte $\sum_{i=1}^n \alpha(i) = 1$.

Nous reprenons ici l'écriture de $\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \dots, X_n)$ donné dans la précédente proposition, nous obtenons ainsi l'expression suivante du Lagrangien

$$\begin{aligned}L(\theta, \lambda) &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) + \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \right) \log(\alpha_j) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left(\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) \left(\log(v_j) + \frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j} \right) \right) - \lambda \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i - 1 \right)\end{aligned}$$

Le Lagrangien admet un maximum sous la contrainte et ce maximum θ^* vérifie le système suivant :


$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha_j}(\theta^*) = \frac{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)}{v_j} - \lambda & = 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu_j}(\theta^*) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) (-2X_i + 2\mu_j) & = 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_j}(\theta^*) = -\frac{1}{2v_j} \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) + \frac{1}{2v_j^2} \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) (X_i - \mu_j)^2 & = 0 \quad \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda}(\theta^*) = \sum_{i=1}^n \alpha_i - 1 & = 0 \end{cases}$$

Sous $\tilde{\theta}$ fixé, et ce qui est bien le cas, on a $\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)$ une constante. **???? POURQUOI????** Le système devient alors :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \alpha_j = \frac{\sum_{i=1}^n g_{\tilde{\theta}}(j|X = X_i)}{\lambda} & \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \mu_j = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)} & \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ v_j = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_j)^2 \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)} & \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum_{i=1}^J \alpha_i = 1 \end{array} \right.$$

Sous la contrainte $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$ et la première équation du système précédent on obtient l'égalité suivante :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^J \alpha_i &= \sum_{i=1}^J \left(\frac{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\lambda} \right) \\ &= \frac{\sum_{i=1}^J \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\lambda} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{i=1}^J \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\lambda} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n 1}{\lambda} = 1 \end{aligned}$$

On en déduit ainsi $\lambda = n$, ainsi que le résultat énoncé. 

Tous ces inesthétiques et fastidieux calculs n'ont pas été effectué en vain. Nous les avons réalisé suite à l'introduction d'une notion nouvelle, celle de la log-vraisemblance conditionnelle ; qui elle même à été introduite faute de ne pouvoir obtenir une expression analytique de la log-vraisemblance des observations. Nous allons maintenant tâcher de mettre en exergue le rapport entre ces deux log-vraisemblances.

Chapitre 2

L'algorithme EM

Dans le présent chapitre, nous nous intéresserons A REMPLIR

2.1 Présentation laconique et pseudo-code

présentation textuelle rapide de l'algo : etape E, etape M etc...

Pour l'implémentation de cet algorithme, nous nous sommes appuyés sur le pseudo-code suivant.

Algorithm 1 L'algorithme EM (Dempster et al., 1977).

Entrée(s) : $N \in \mathbb{N}$, $\hat{\theta}_0 \in \Theta$, un jeu de données $x_1 \dots x_n$;

Initialisation ;

1: $k := 1$;

2: **Tant que** $K < N + 1$ **faire**

3: **ETAPE E** : Calculer la fonction $Q(\theta; \hat{\theta}_{k-1}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{\hat{\theta}_{k-1}} [\log f(X_i, Z_i, \theta) | X_i = x_i]$;

4: **ETAPE M** : $\hat{\theta}_k = \operatorname{argmax} Q(\theta; \hat{\theta}_{k-1})$;

5: $k \leftarrow k + 1$;

6: **fin du Tant que** ;

7: **retourner** $\hat{\theta}_N$;

Il n'existe pas de preuve de convergence de l'algorithme EM ; ce dernier peut en effet stagner dans des extremas locaux. Le choix de bons paramètres initiaux est de fait primordial. Nous verrons cela dans une prochaine section. Toutefois, nous sommes assurés que l'algorithme croît, en temoigne la section suivante.

2.2 Une preuve de la croissance

Dans cette concise partie, nous donnons une preuve de la croissance de la log-vraisemblance conditionnelle au fur et à mesure des itérations de l'algorithme EM.

Théorème 1. *Soit $(\theta_k)_{k \in \mathbb{N}}$ la suite de paramètres construite à l'aide de l'algorithme EM. La log-vraisemblance \mathcal{L}_{obs} des observations vérifie*

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta_{k+1}, X_1, \dots, X_n) \geq \mathcal{L}_{obs}(\theta_k, X_1, \dots, X_n)$$

Démonstration. Nous allons commencer cette preuve en donnant une autre forme de la log-vraisemblance, dépendant de $\mathcal{L}_{obs}(\theta, X_1, \dots, X_n)$ et d'un terme $\kappa_{\theta, \theta_k}$. Nous avons :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c(\theta, \theta_k, X_1, \dots, X_n) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(h_\theta(X_i, j)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln[f_\theta(X_i) \times \mathbb{P}_\theta(Z = j | X = X_i)] \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(f_\theta(X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_\theta(Z = j | X = X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \ln(f_\theta(X_i)) \times \underbrace{\sum_{j=1}^J \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i)}_{=1} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_\theta(Z = j | X = X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \ln(f_\theta(X_i)) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_\theta(Z = j | X = X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i) \\ &= \mathcal{L}_{obs}(\theta, X_1, \dots, X_n) + \kappa_{\theta, \theta_k} \end{aligned}$$

Dès lors, on obtient

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta_{k+1}, X_1, \dots, X_n) - \mathcal{L}_{obs}(\theta_k, X_1, \dots, X_n) = \mathcal{L}_c(\theta_{k+1}, \theta_k, X_1, \dots, X_n) - \kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k} - \mathcal{L}_c(\theta_k, \theta_k, X_1, \dots, X_n) + \kappa_{\theta_k, \theta_k}$$

Or, la quantité \mathcal{L}_c est maximisée en θ_{k+1} lors de l'étape M de l'algorithme, donc

$$\mathcal{L}_c(\theta_{k+1}, \theta_k, X_1, \dots, X_n) - \mathcal{L}_c(\theta_k, \theta_k, X_1, \dots, X_n) \geq 0$$

Il reste donc à prouver que

$$\kappa_{\theta_k, \theta_k} - \kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k} \geq 0$$

En effet, nous avons

$$\begin{aligned}
\kappa_{\theta_k, \theta_k} - \kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i) \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln\left(\frac{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i)}\right) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i) \\
&= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln\left(\frac{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i)}\right) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i) \\
&\geq - \sum_{i=1}^n \ln\left(\sum_{j=1}^J \frac{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i)} \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X = X_i)\right)
\end{aligned}$$

[Cette dernière inégalité est due à la convexité du \log et au fait que $\sum_{j=1}^J \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j|X) = 1$]

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{i=1}^n \ln\left(\sum_{j=1}^J \mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i)\right) \\
&= - \sum_{i=1}^n \ln(1) \\
&= 0
\end{aligned}$$

On obtient ainsi

$$\kappa_{\theta_k, \theta_k} - \kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k} \geq 0$$

Et finalement

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta_{k+1}, X_1, \dots, X_n) \geq \mathcal{L}_{obs}(\theta_k, X_1, \dots, X_n)$$

2

2.3 A remplir - Le choix des valeurs initiales

2.4 A remplir - Implémentation en langage *R*

Bibliographie

Liens utiles

<https://www.lpsm.paris/pageperso/rebafka/BookGraphes/algorithmem.html>
<https://members.loria.fr/moberger/Enseignement/AVR/Exposes/algo-em.pdf>
http://faculty.washington.edu/fxia/courses/LING572/EM_collins97.pdf
<https://core.ac.uk/download/pdf/155777956.pdf>
<http://www.cmap.polytechnique.fr/~bansaye/CoursTD6.pdf>

Annexes

Annexe A

Le package *mclust*

Nous avons, dans un élan d'audace, commencé par programmer à la main l'algorithme EM, en nous appuyant sur le pseudo-code explicité en première partie du chapitre II.

Cependant, il existe une librairie *R* - la librairie *mclust* - contenant une implémentation de l'algorithme EM. Notre algorithme étant fonctionnel, nous ne détaillerons pas ici le fonctionnement de ce Package. Il est néanmoins pertinent de l'expérimenter, voire de comparer ces résultats avec ceux notre algorithme.

Pour commencer, installons et chargeons le Package *mclust*.

```
install.packages("mclust")
library("mclust")
```

Nous reprenons les données des nids d'oiseaux :

```
bird_names = c("European Goldfinch", "Common Linnet", "Common Chaffinch",
               "European Greenfinch", "Eurasian Bullfinch", "Hawfinch",
               "Stonechat", "European Robin", "Whinchat", "Song Thrush",
               "Common Blackbird", "Ring Ouzel", "Mistle Thrush")

mean_volume = c(38.0, 60.9, 58.3, 74.5, 45.0, 71.6, 91.0, 68.4, 51.9, 288.9,
               293.6, 298.6, 266.1)

sd_volume = c(9.1, 20.8, 15.0, 12.2, 3.8, 12.9, 46.5, 29.8, 27.4, 55.9,
              78.5, 125.1, 56.6)
```

Puis, il suffit de construire des dataframe. Ici, nous considérerons deux mélanges ; un mélange à deux lois et un autre à trois lois.

```
df_2= data.frame(bird_names = c("European Goldfinch", "Ring Ouzel")
                 ,proportion_alpha = c(0.3, 0.7), mean = c(38, 298.6),
                 sd = c(9.1, 125.1))

df_3= data.frame(bird_names = c("Common Linnet", "Common Chaffinch", "Hawfinch" )
                 ,proportion_alpha = c(0.6, 0.3, 0.1), mean = c(60.9, 58.3,
                 71.6),
                 sd = c(20.8, 15.0, 12.9))
```

Nous reprenons ici notre propre fonction de simulation

```
simulation = function(data_th, n=100)
```

Les prérequis étant posés, nous simulons un échantillon X_2 de deux espèces d'oiseaux et un autre X_3 de trois espèces d'oiseaux :

```
set.seed(1907)
X2 <- simulation(df_2)
X3 <- simulation(df_3)
```

Le Package *mclust* est des plus complet ; les possibilités étant très vastes et hors du cadre de ce projet (notamment les fonctionnalités de clustering), nous regarderons uniquement la fonction qui nous intéresse, à savoir la fonction *densityMclust*.

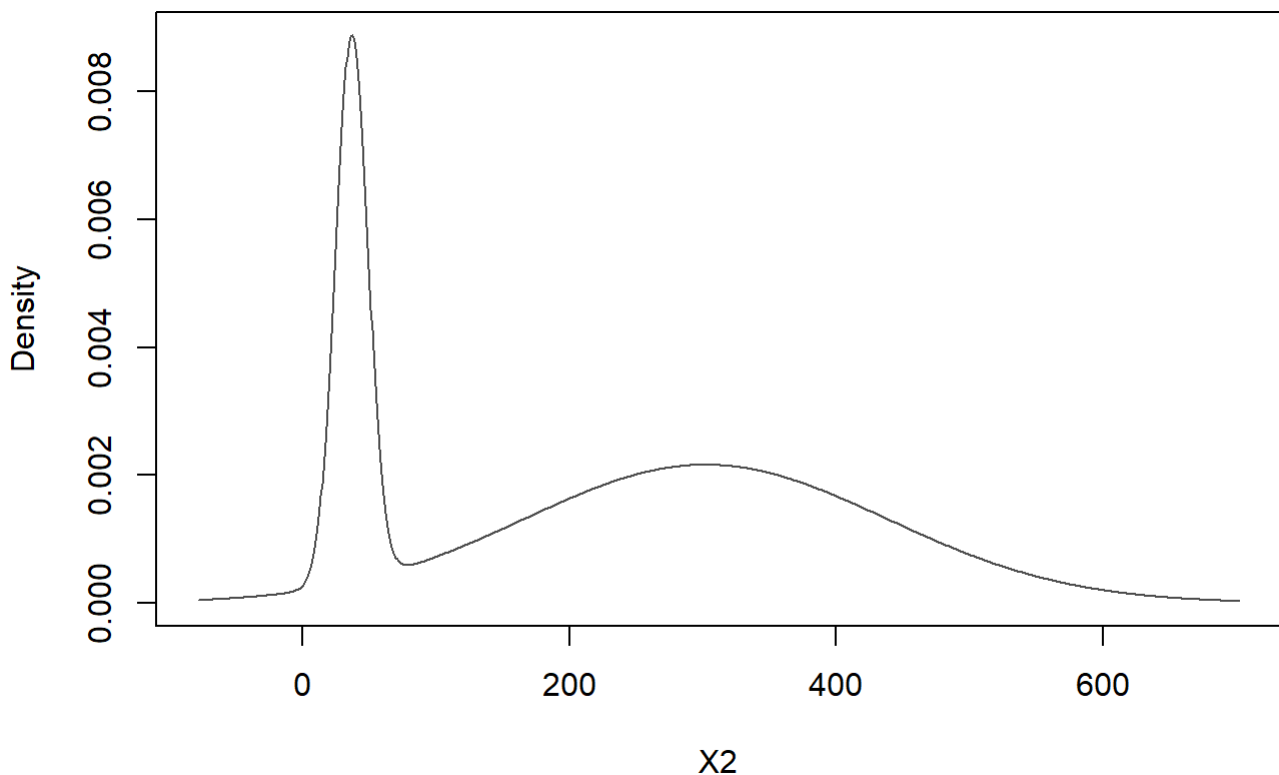
Cette dernière prend en argument des fonctionnalités pertinentes, comme le nombre de mélanges, mais non des valeurs initiales pour les paramètres à estimer.

A.1 Un exemple sur un mélange à deux lois

Commençons par un exécuter la fonction *densityMclust* sur notre exemple de mélange à deux lois, contenu dans le dataframe X_2 :

```
est_2 <- densityMclust(X2)
```

Il est en premier lieu retourné le graphe de la densité du mélange de lois.



Nous pouvons nettement distinguer les deux "pics", correspondant aux deux gaussiennes mélangées. Intéressons-nous maintenant à l'objet créé *est_2*.

```
est_2
```

'densityMclust' model object: (V,2)

Available components:

[1]	"call"	"data"	"modelName"	"n"	"d"
[6]	"G"	"BIC"	"loglik"	"df"	"bic"
[11]	"icl"	"hypvol"	"parameters"	"z"	"classification"
[16]	"uncertainty"	"density"			

Ici nous voulons les paramètres estimés, nous nous concentrerons donc que sur la treizième coordonnée de ce vecteur.

Rappelons que les divers paramètres de ce mélange sont : 0.3 et 0.7 en proportions; 38 et 298.6 pour les moyennes; et 9.1 et 125.1 en écart-types.

```
print("Proportions estimées:")
est_2[13]$parameters$pro
print("Moyennes estimées:")
est_2[13]$parameters$mean
print("Ecart-types estimés:")
(est_2[13]$parameters$variance$sigmasq)^(1/2)
```

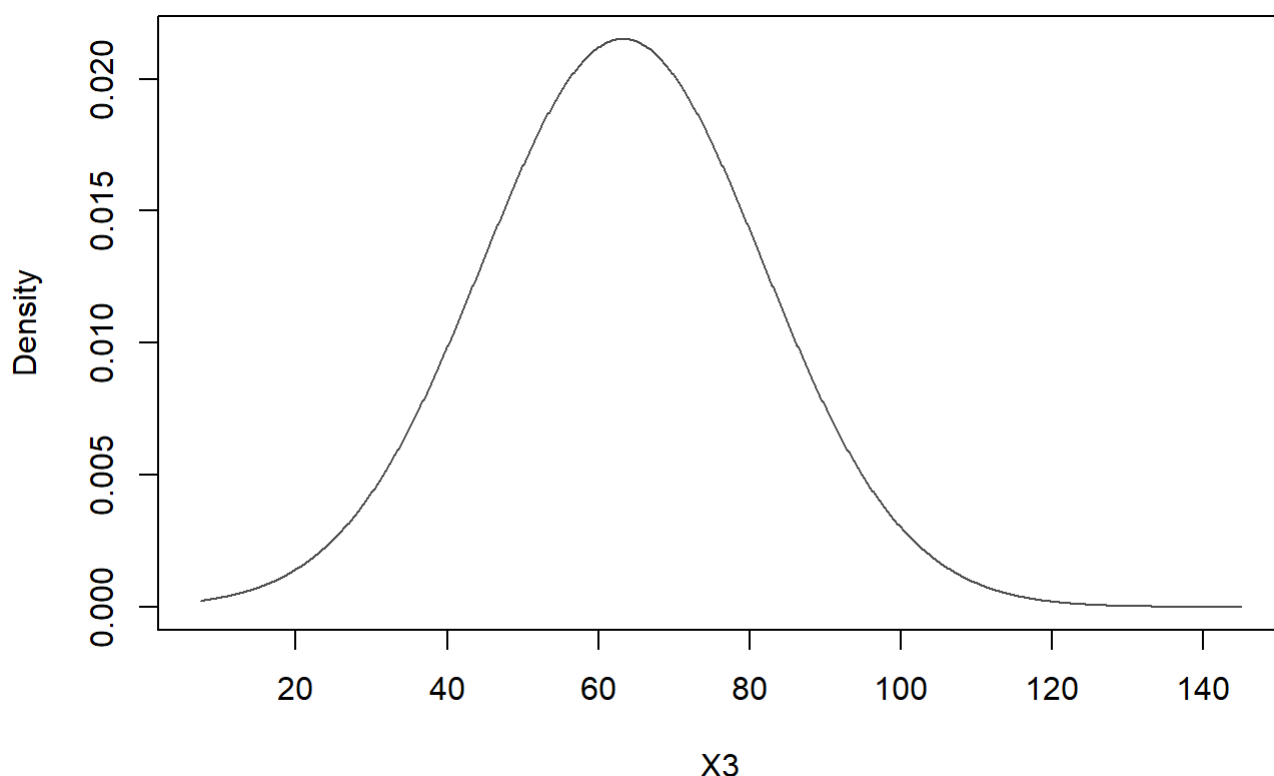
```
[1] "Proportions estimées:"
[1] 0.2612243 0.7387757
[1] "Moyennes estimées:"
      1      2
36.80898 301.97108
[1] "Ecart-types estimés:"
[1] 12.16256 136.32256
```

Ici, le nombre de mélange est exact. Les proportions sont très bien estimées, l'erreur la plus importante est de l'ordre de 12%. Il en va de même pour les moyennes, les erreurs sont d'ordres inférieures à 10%. Les variances sont elles aussi très bien estimées, les erreurs sont négligeables.

A.2 Un exemple sur un mélange à trois lois

Regardons maintenant le cas d'un mélange de trois lois. Afin de mettre à rude épreuve l'algorithme, nous allons choisir les espèces telles que les moyennes et variances soient proches. Les proportions seront quant à elles bien distinctes, nous allons voir pourquoi.

```
est_3 <- densityMclust(X3)
```



Nous obtenons ici quelque chose d'intéressant ; la fonction de densité de ce mélange de trois lois paraît toute à fait gaussienne. Sans une exploration plus approfondie des données, nous commettrions une chagrinante erreur et des conclusions totalement faussées...

Il est ici pertinent d'observer la structure des données ; plus précisément, nous allons effectuer un test de *Shapiro*.

```
shapiro.test(X3)
```

Shapiro-Wilk normality test

data: X3

W = 0.97982, p-value = 0.1287

La p-value est de 0.1287, ce qui est certes peu élevée, mais pas assez pour rejeter l'hypothèse (H_0) de normalité. Nous sommes ici dans une situation ambiguë.

Observons maintenant comment *densityMclust* se défend face à cette situation.

Rappelons que les divers paramètres de ce mélange sont : 0.6, 0.3 et 0.1 en proportions ; 60.9, 58.3 et 71.6 en moyenne ; et 20.8, 15 et 12.9 en écart-types.

```
print("Proportions estimées:")
est_3[13]$parameters$pro
print("Moyennes estimées:")
```

```
est_3[13]$parameters$mean
print("Ecart-types estimés:")
(est_3[13]$parameters$variance$sigma^2)^(1/2)
```

```
[1] "Proportions estimées:"
[1] 1
[1] "Moyennes estimées:"
[1] 63.20547
[1] "Ecart-types estimés:"
[1] 18.54033
```

Le premier élément notable est que l'algorithme échoue à établir le nombre correct de lois. L'unique moyenne et écart-type estimés ne sont quant à eux pas absurde.

Nous allons relancer la fonction sur le même jeu de données, en précisant cette fois-ci le nombre de lois.

```
est_3b <- densityMclust(X3, G = 3)
print("Proportions estimées:")
est_3b[13]$parameters$pro
print("Moyennes estimées:")
est_3b[13]$parameters$mean
print("Ecart-types estimés:")
(est_3b[13]$parameters$variance$sigma^2)^(1/2)
```

```
0.6, 0.3, 0.1 60.9, 58.3, 71.6 20.8, 15, 12.9
```

```
[1] "Proportions estimées:"
[1] 0.2552686 0.5642272 0.1805042
[1] "Moyennes estimées:"
      1      2      3
56.63179 62.36268 75.13635
[1] "Ecart-types estimés:"
[1] 17.51051
```

Les proportions sont plutôt bien estimées, quoique légèrement surestimées pour deux d'entre elles, mais les erreurs restent faibles. Il en est étonnant de même pour les moyennes, qui sont très bien estimées. Ceci est surprenant au vu de l'allure de la densité. Cependant, il n'est estimé qu'un unique écart-type, ce qui n'est guère étonnant. Notons que celle-ci est à peu près égale à la moyenne des écart-types des différentes lois.

Ce cas ambigu met en exergue les limites de l'algorithme implémenté dans ce package.