Un modèle pour les nids d'oiseaux

CARVAILLO, CÔME, PRALON

Soutenance de projet de Master 1

3 juin 2022

Définition et hypothèses

Loi de mélange

Si l'on se donne J densités $f_1, \cdots, f_J$, alors toute variable aléatoire X dont la densité f s'exprime, pour tout $x \in \mathbb{R}$, sous la forme

$$f(x) := \sum_{j=1}^{J} \alpha_j f_j(x)$$

où

$$\alpha_j \in \mathbb{R}_+^* \text{ et } \sum_{j=1}^{J} \alpha_j = 1$$

suit une loi de mélange continue.

Définitions et hypothèses

Vecteurs des paramètres

$$\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{j \in [\![1, J]\!]}$$

Une histoire de variables

Nous introduisons les deux variables aléatoires (V.A.) suivantes :

- la V.A. à densité X, modélisant le volume des nids
- la V.A. discrète $Z \in [\![1, J]\!]$, représentant l'espèce d'oiseau

Définitions et hypothèses

Hypothèse 1

X conditionnellement à $(Z = j)$ est une loi normale $\mathcal{N}(\mu_j, v_j)$

Hypothèse 2 (Existence)

Soit

$$\Theta := \{\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{1 \leq j \leq J} \mid \alpha_j > 0 \ \forall j \in [\![1, J]\!] \text{ et } \sum_{j=1}^{J} \alpha_j = 1\}$$

Soit $X_1, \cdots, X_n$ un échantillon de même loi que X.
On supposera qu'il existe un $\theta \in \Theta$ tel que les données récoltées soient la réalisation du précédent échantillon.

Une histoire de densités

Diverses densités

- Densité de la loi de X conditionnellement à $(Z = j)$:

$$f(x|Z = j) = \gamma_{\mu_j, v_j}(x)$$

- Densité de la loi de X :

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

- Probabilité de la loi de Z conditionnellement à $(X = x)$:

$$\mathbb{P}_\theta(Z = j|X = x) = \frac{\gamma_{\mu_j, v_j} \times \alpha_j}{f_\theta(x)}$$

Une approche idéaliste

Le modèle

- Nous observons et le volume et l'espèce d'oiseau
- Log-vraisemblance du modèle :

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

où

$$A_j := \{i \in [\![1, n]\!] \text{ tels que } Z_i = j\}$$

Une approche idéaliste

Estimateurs du maximum de vraisemblance (EMV)

$$\widehat{\alpha_j} = \frac{\#A_j}{n}$$

$$\widehat{\mu_j} = \frac{\sum_{i \in A_j} X_i}{\#A_j}$$

$$\widehat{v_j} = \frac{\sum_{i \in A_j} (X_i - \widehat{\mu_j})^2}{\#A_j}$$

Une approche réaliste

Le modèle

- Nous observons seulement le volume des nids
- Log-vraisemblance du modèle :

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

Log-vraisemblance conditionnelle

Problème et solution

- L'existence d'une expression analytique des EMV n'est pas assurée
- Nécessité de construire une méthode permettant d'approcher les valeurs des estimateurs
- Nous définissons ainsi la log-vraisemblance conditionnelle comme :

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

Réécritures

Log-vraisemblance conditionnelle

- Première forme :

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

- Seconde forme :

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

Log-vraisemblance conditionnelle

Estimateurs du maximums de vraisemblance

$$\widehat{\alpha_j} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z=j|X=X_i)$$

$$\widehat{\mu_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z=j|X=X_i)}{\sum_{i=1}^{n}\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z=j|X=X_i)}$$

$$\widehat{v_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\widehat{\mu_j})^2 \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z=j|X=X_i)}{\sum_{i=1}^{n}\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z=j|X=X_i)}$$

La fonction *Simulation*

Son objectif

Générer aléatoirement un échantillon issu d'un mélange gaussien

Ses arguments

- ***Data_th*** **:** le dataframe contenant les paramètres α_i, μ_i et σ_i où $i \in \{1, \dots, J\}$ avec J le nombre de mélanges gaussiens
- ***n*** **:** Le nombre de valeurs que l'on souhaite générer aléatoirement

Ce qu'elle retourne

- Un vecteur de taille n généré aléatoirement
  - Il s'agit de l'échantillon du mélange gaussien

Son principe de fonctionnement

Exemple dans le cas d'un mélange à 3 gaussiennes

Étapes répétées à chaques itérations

- Génération d'une variable aléatoire $Z \sim \mathbb{U}(0, 1)$
  - Si $Z < \alpha_1$ alors $X \sim \mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1)$
  - Sinon si $\alpha_1 \leq Z \leq \alpha_1 + \alpha_2$, alors $X \sim \mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2)$
  - Sinon si $\alpha_1 + \alpha_2 \leq Z \leq \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, alors $X \sim \mathcal{N}(\mu_3, \sigma_3)$

L'algorithme EM

But de l'implémentation de la fonction *algo_EM*

- Estimer les paramètres α_J, μ_J et σ_J du mélange gaussien
  - J est le nombre de gaussiennes présentent dans le mélange

Ses arguments

- ***data_init*** **:** dataframe contenant les paramètres $(\alpha_{init}, \mu_{init}, \sigma_{init})$ initiaux choisis
- ***X*** **:** Vecteur jouant le rôle de l'échantillon du mélange gaussien
- ***K*** **:** le nombre d'itérations de l'algorithme EM

Ce qu'elle retourne

- Retourne un dataframe contenant les valeurs des paramètres $\widehat{\alpha_J}$, $\widehat{\mu_J}$ et $\widehat{\sigma_J}$ estimés par l'algorithme

Les étapes de l'algorithme EM

L'étape E (Expectation)

Consiste à déterminer $\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i)$ à l'aide de la formule suivante :

$$\mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_i) = \frac{\alpha_j \times \gamma_{\mu_j, v_j}}{\sum_{k=1}^{J} \alpha_k \times \gamma_{\mu_k, v_k}}$$

Les étapes de l'algorithme EM

L'étape M (Maximization)

Consiste à estimer le maximum de la log-vraisemblance conditionnelle en les paramètres $(\alpha_j, \mu_j, \sigma_j)$ via les formules suivantes :

$$\widehat{\alpha_j} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)$$

$$\widehat{\mu_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}$$

$$\widehat{v_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \widehat{\mu_j})^2 \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_i)}$$

Un théorème de croissance

Théorème

Soit $(\theta_k)_{k \in [\![1,K]\!]}$ la suite de paramètres construite à l'aide de l'algorithme EM.
La log-vraisemblance $\mathcal{L}_{obs}$ des observations vérifie

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

Esquisse de preuve

Démonstration : d'après [2] et [4]

- Nous cherchons à montrer que

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta_{k+1}, X_1, \cdots, X_n) - \mathcal{L}_{obs}(\theta_k, X_1, \cdots, X_n) \geq 0 \ (1)$$

- Réécriture :

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

- Avec

$$\kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j | X = X_i)) \times \mathbb{P}_{\theta_k}(Z = j | X = X_i)$$

Esquisse de preuve

Démonstration : d'après [2] et [4]

Ainsi,

$$\mathcal{L}_{obs}(\theta_{k+1}, X_1, \cdots, X_n) - \mathcal{L}_{obs}(\theta_k, X_1, \cdots, X_n) \geq 0$$

<u>ssi</u>

$$\underbrace{\mathcal{L}_c(\theta_{k+1}, \theta_k, X_1, \cdots, X_n) - \mathcal{L}_c(\theta_k, \theta_k, X_1, \cdots, X_n)}_{L} + \underbrace{\kappa_{\theta_k, \theta_k} - \kappa_{\theta_{k+1}, \theta_k}}_{K} \geq 0$$

Il s'agit de montrer

$$L + K \geq 0 \ (2)$$

Esquisse de preuve

Démonstration : d'après [2] et [4]

- A l'étape M de l'algorithme, la quantité

$$\mathcal{L}_c(\theta, \theta_k, X_1, \cdots, X_n)$$

est maximisée en θ, de maximum θ_{k+1}

- Donc,

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

Esquisse de preuve

Démonstration : d'après [2] et [4]

- Il reste donc à prouver que

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

- Nous montrons que, après quelques fastidieux calculs,

$$\begin{aligned}
&\kappa_{\theta_k,\theta_k}, - \kappa_{\theta_{k+1},\theta_k} \\
&\geq -n \times ln\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{J}\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z = j|X = X_i) \times \frac{1}{n}\right) \quad (3)\\
&= -n \times ln(1)\\
&= 0
\end{aligned}$$

Limites du théorème

- Aucune preuve quant à la convergence de la suite $(\theta_k)_{k\in[\![1,K]\!]}$ vers les EMV
  - Stagnation dans des extremas locaux
- Choix des paramètres initiaux crucial

Initialisation des paramètres

Fonctions d'initialisation

Puisqu'il n'est pas assuré d'une convergence des estimateurs, on développe les fonctions suivantes :

Fonction param_quantile1

- (X,J) correspond à l'échantillon au nombre d'espèces observées
- $$\alpha_j = \frac{1}{J}$$
- On trie l'échantillon X et on définit les moyennes :
$$\mu_j = X[floor(j * N/J + 1)]$$
- $$v_j = \sqrt{\mathbb{V}(X[1 : \mu_1])}$$

Initialisation des paramètres

Fonction param_quantile2

- (X,J) correspond à l'échantillon et au nombre d'espèces observées
- $$\alpha_j = \frac{1}{J}$$
- On trie l'échantillon X et on définit les moyennes :

  $$\mu_j = \mathbb{E}(X[Q1 : Q2])$$

  avec Qj = floor(j*N/J +1)
- $$v_j = \sqrt{\mathbb{V}(X[Q1 : Q2])}$$

Fonction param_kmeans

- (X,J) correspondant à l'échantillon au nombre d'espèces observées
- kmeans sur l'échantillon
- Condition : s'il y a autant de maximum que d'espèces observés
- on choisi α_j comme la proportion d'espèce du cluster j
- on choisi μ_j comme la moyenne du cluster j
- on choisi v_j comme la variance du cluster j

- Condition : s'il y a moins de maximum que d'espèces observés
- nouveau kmeans sur le plus grand max, on actualise les centres et on ré-itère jusqu'à arriver dans la situation précédente
- on choisi α_j comme la proportion d'espèce du cluster j
- on choisi μ_j comme la moyenne du cluster j
- on choisi v_j comme la variance du cluster j

Log-vraisemblance de X et choix de la fonction d'initialisation

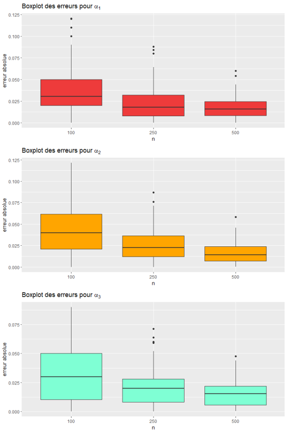
Fonction log_Vrais_X

- Arguments : (data_param,X) correspondant au tableau des paramètres initaux et à l'échantillon X
- Calcul la log-vraisemblance de X pour les paramètres issus de data_param

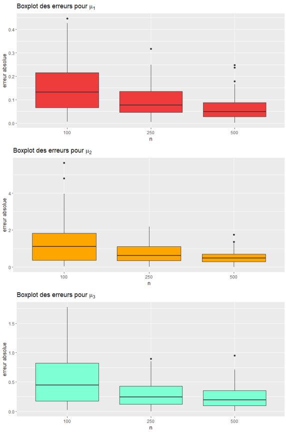
Fonction param_init

- Arguments : (data,X) correspondant aux tableaux des paramètres initaux choisis et X l'échantillon
- Calcul la log vraisemblance de X pour chaque choix des paramètres initiaux
- Retiens les paramètres dont la log-vraisemblance de X est la plus grande.
- On est tout de même pas assuré du maximum de vraisemblance

Cas des variables à "fortes séparations"

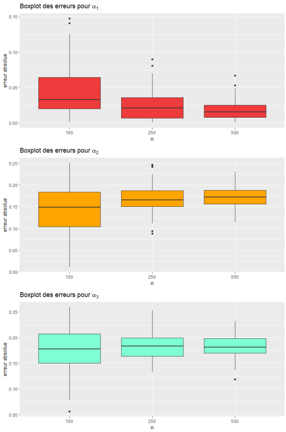


(a) Boxplot des erreurs pour α_1, α_2 et α_3

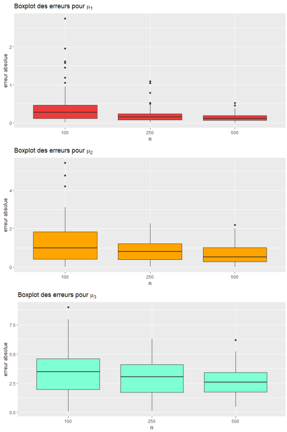


(b) Boxplot des erreurs pour μ_1, μ_2 et μ_3

Cas des variables à "faibles séparations"



(c) Boxplot des erreurs pour α_1, α_2 et α_3



(d) Boxplot des erreurs pour μ_1, μ_2 et μ_3

Préambule

Recueil des données

	Female Body Mass (g)	Total mass of nest (g)	Cup diameter parallel to long axis (mm)	Cup diameter perpendicular to long axis (mm)	Nest diameter parallel to long axis (mm)	Nest diameter perpendicular to long axis (mm)	Upper wall thickness (mm)	Base Thickness (mm)	Cup depth (mm)	Nest Height (mm)	Volume (cm^3)
Fringillidae											
European Goldfinch (*Carduelis Carduelis*) [10]	16.4	8.3 ± 2.4	62.8 ± 12.1	54.8 ± 7.4	91.4 ± 9.3	77.8 ± 7.9	12.8 ± 3.3	15.7 ± 4.3	26.0 ± 5.5	41.6 ± 7.4	38.0 ± 9.1
Common Linnet (*Linaria cannabina*) [11]	18.0	18.9 ± 5.4	74.7 ± 6.3	59.9 ± 8.6	107.9 ± 8.8	95.1 ± 10.2	16.9 ± 4.9	24.5 ± 8.9	30.6 ± 9.8	55.1 ± 9.2	60.9 ± 20.8
Common Chaffinch (*Fringilla coelebs*) [11]	21.5	14.5 ± 2.9	63.3 ± 8.1	50.8 ± 8.0	98.7 ± 10.9	90.3 ± 9.8	18.5 ± 3.6	23.6 ± 7.6	34.3 ± 7.8	58.0 ± 7.3	58.3 ± 15.0
European Greenfinch (*Chloris chloris*) [5]	25.9	22.4 ± 6.2	75.6 ± 7.8	53.9 ± 11.8	128.6 ± 13.7	99.7 ± 16.2	24.9 ± 7.9	29.4 ± 6.0	35.4 ± 5.7	64.9 ± 9.4	74.5 ± 12.2
Eurasian Bullfinch (*Pyrrhula pyrrhula*) [17]	27.3	12.1 ± 4.6	80.8 ± 12.1	66.4 ± 8.1	129.7 ± 23.4	117.5 ± 19.6	24.8 ± 10.9	24.2 ± 10.7	22.6 ± 4.5	46.8 ± 11.3	45.0 ± 3.8
Hawfinch (*Coccothraustes coccothraustes*) [4]	52.9	27.4 ± 7.3	102.2 ± 17.9	78.8 ± 25.2	153.4 ± 19.1	131.3 ± 27.1	25.4 ± 5.9	23.3 ± 4.9	31.4 ± 10.9	54.7 ± 11.5	71.6 ± 12.9

Figure – Caractéristiques des nids ; d'après [5]

Hypothèses, outils et démarche

Hypothèses

- la distribution du volume des nids d'une espèce donnée est gaussienne
- le nombre d'espèces J est connu

Outils

- fonction *simulation*
- fonction *algo_EM*

Démarche

- Génération de l'échantillon
- Représentation graphique de la densité de l'échantillon
- Détermination des paramètres initiaux
- Execution de l'algorithme EM

Première exploration des données

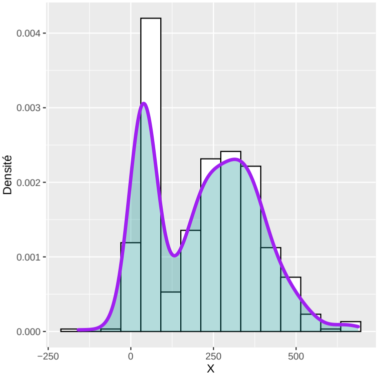


Figure – Densité du mélange

1. Dempster A.P., Laird N. M., Rubin D. B. (1977). Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B, Vol. 39, 1, 1-38*
2. Chafai D., Malrieu F. (2018). Recueil de modèles aléatoires, 105-11, *Prépublication*
   `https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01897577v3`
3. Frédéric Santos (2015). L'algorithme EM : une courte présentation, *Document de cours*
   `https://members.loria.fr/moberger/Enseignement/AVR/Exposes/algo-em.pdf`
4. Michael Collins (1997). The EM algorithm, *Document de cours*
   `http://faculty.washington.edu/fxia/courses/LING572/EM_collins97.pdf`
5. Biddle L.E., Broughton R.E., Goodman A.M., Deeming D.C (2018). Composition of Bird Nests is a Species-Specific Characteristic, *Avian Biology Research, Vol. 11, 2, 132-153*
   `https://core.ac.uk/download/pdf/155777956.pdf`