



# Projet Master 1 SSD

### Un modèle pour les nids d'oiseaux

Rédigé par

CARVAILLO Thomas

CÔME Olivier

PRALON Nicolas

Encadrante: Elodie Brunel-Piccinini



# Table des matières

1r	ntroduction	2									
Modélisation du problème et liminaire mathématique  1.1 Modélisation du problème											
2	L'algorithme EM  2.1 Présentation laconique et pseudo-code 2.1.1 L'étape E (Expectation) 2.1.2 L'étape M (Maximization) 2.1.3 Pseudo-code de l'algorithme EM  2.2 Une preuve de la croissance	12 12 12 12 12 14									
3	Etude de simulations         3.1       La fonction simulation          3.2       Étude de simulations          3.2.1       Étude d'un mélange gaussien à forte séparations          3.2.2       Étude d'un mélange gaussien à faible séparations	16 16 17 17 20									
<b>4</b>	4.1 Préambule	24 24 26 26 28									
В	Bibliographie	29									
A	nnexes	30									
A	Le package <i>mclust</i> A.1 Un exemple sur un mélange à deux lois										

### Introduction

L'observation est une composante essentielle en sciences appliquées, et tout particulièrement pour nous, futur statisticiens. Ces dernières nous permettent d'élaborer des modèles, et dans le cadre de l'estimation paramétrique, de construire des estimateurs.

Dans la situation où les données sont correctement observées, cadre idéal , la statistique inférentielle nous permet d'obtenir d'agréables expressions analytiques des estimateurs, notamment par la méthode du maximum de vraisemblance, qui est d'une redoutable efficacité. Toujours est-il que ces situations sont peu courantes ; nous sommes souvent confrontés à des situation présentant des données « cachées » ou manquantes. Dans ce dernier cas, nous verrons que les méthodes analytiques exactes ne suffisent plus, et qu'il est nécessaire d'introduire de nouvelles méthodes, basées sur le principe du maximum de vraisemblancen, pour tenter d'estimer les paramètres.

Nous étudierons dans le présent projet l'une de ces méthodes, conçue par Dempster et al. (1977), l'algorithme Expectation-Maximization.

Nous nous appuierons ici un exemple extrait de l'ornithologie; les données observées seront celles de la taille des nids d'oiseaux, et les données manquantes seront l'espèce qui l'a construit.

Dans une première partie, nous modéliserons mathématiquement le problème et poserons les bases théoriques nécessaires à l'étude; nous verrons brièvement le cas des données complètes, puis étudierons le cas des observations manquantes. Une seconde partie sera consacrée à une implémentation en langage R de l'algorithme EM et aux performances des résultats ce dernier. Nous détaillerons notre implémentation, et étudierons son risque d'erreur. Dans une troisième et dernière partie, nous nous proposons de nous mettre en conditions réelles et de réaliser une étude de cas à l'aide des outils que nous aurons implémenté.

### Chapitre 1

# Modélisation du problème et liminaire mathématique

Dans ce premier chapitre, nous introduirons les outils nécessaires pour modéliser mathématiquement le problème. Puis, nous présenterons successivement les deux situations existantes dans le cadre du recueil de données des nids d'oiseaux : celle dans laquelle et l'espèce et la taille du nid ont été observées; et celle dans laquelle seule la taille a pu être observée. Nous verrons et ce qui diffère entre ces deux situations, et les raisons qui ont incité à la création de l'algorithme EM, l'objet de notre projet.

Ce chapitre s'inspirera des références [1], [2] et [3]

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

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

suit une loi de mélange.

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

- $\nearrow$  La variable aléatoire X, modélisant le volume des nids, de densité f
- $\nearrow$  Z, la variable aléatoire discrète et à valeurs dans  $[\![1,J]\!]$ , représentant l'espèce d'oiseau qui a construit le nid

Enfin, nous nous placerons sous les hypothèses suivantes :

**Hypothèse 1.** Nous supposerons que,  $\forall j \in [1, J]$ , la taille des nids d'une espèce j ( <u>i.e.</u> X conditionnellement à (Z = j)) suit une loi normale  $\mathcal{N}(\mu_j, v_j)$ . Nous dénoterons par  $f(x|Z = j) := \gamma_{\mu_j, v_j}(x)$  cette densité.

$$\mathbf{Hypoth\`ese} \ \mathbf{2.} \ \textit{Soit} \ \Theta := \{\theta = (\alpha_j, \mu_j, v_j)_{1 \leq j \leq J} \ \textit{tels que} \ \alpha_j > 0 \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \ \textit{et} \ \sum_{j=1}^J \alpha_j = 1 \}. \ \textit{Soient} \ X_1, \cdots, X_n \}$$

un échantillon de même loi que X. On supposera qu'il existe un  $\theta \in \Theta$  tel que les données récoltées, ici les tailles des nids, soient la réalisation du précédent échantillon.

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

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

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

Il s'ensuit la proposition suivante, qui sera essentielle dans la suite.

**Proposition 1.** La distribution de la taille des nids des oiseaux, <u>i.e.</u> X, admet pour densité ,au point x et par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}$ , la fonction  $f_{\theta}$  définie comme suit

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

Démonstration. En effet,

$$\mathbb{P}(X \le x) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{j=1}^{J} (X \le x) \cap (Z = j)\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{J} \mathbb{P}((X \le x) \cap (Z = j))$$

$$= \sum_{i=1}^{J} \mathbb{P}(Z = j) \times \mathbb{P}(x \le X | Z = j)$$

$$= \sum_{i=1}^{J} \alpha_i \times \mathbb{P}(x \le X | Z = j)$$

$$= \sum_{i=1}^{J} \alpha_i \times f(x | Z = j)$$

Le but de ce projet sera d'étudier des méthodes permettant l'estimation des divers paramètres de cette densité. Nous dénoterons par  $\theta := (\alpha_i, \mu_i, v_i)_{1 \le i \le J}$  le vecteur des paramètres.

æ

#### 1.2 Une histoire de densités

Introduisons une dernière densité et une dernière probabilité, qui nous seront fort utile dans la suite :

Proposition 2. Nous avons les résultats suivant :

1. La loi du couple (X, Z) est donnée par

$$\mathbb{P}(X \le x, Z = j) = \int_{-\infty}^{x} f_{\theta}(u|Z = j) \times \mathbb{P}(Z = j) du$$
$$= \int_{-\infty}^{x} \underbrace{\gamma_{\mu_{j}, v_{j}}(u) \times \alpha_{j}}_{:=h_{\theta}(u, j)} du$$

 $\underline{où} \ h_{\theta}(u,j) \ est \ la \ "sous-densité" \ de \ X \times \mathbb{1}_{(Z=j)}$ 

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

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

 $\underline{où} \ f_{\theta}(x)$  est donnée par la proposition 1.

Démonstration. En effet,

$$\mathbb{P}(X \le x, Z = j) = \int_{-\infty}^{x} \mathbb{P}(Z = j | X = u) \times f_{\theta}(u) du$$

On obtient dès lors

$$\mathbb{P}(Z=j|X=u)\times f_{\theta}(u)=\gamma_{\mu_i,v_i}(u)\times \alpha_j$$

Soit

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

Se.

**Remarque 2.** Nous pouvons dès à présent noter que pour un échantillon  $X_1, \dots, X_n$  de même loi que X, nous avons

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

Ceci nous sera utile dans la suite.

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

### 1.3 Une approche idéaliste

Regardons dans un premier temps un cas simplifié, un cas ne décrivant pas la réalité des observations mais qui constitue une agréable entrée en matière.

Nous supposerons ici qu'ont été relevés simultanément et les mesures des tailles des nids et l'espèce d'oiseau qui l'a construit. Les observations considérées ici sont donc composées des couples  $(X_i, Z_i)$ ,  $i \in [1, n]$ . On considérera dès lors la fonction de densité  $h_{\theta}(x, z)$ , donnée par la proposition 2.

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

Proposition 3 (Fonction de Log-vraisemblance). La Log-vraisemblance du modèle s'écrit

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

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

Avant de démontrer cette proposition, nous allons introduire une notation qui nous sera immédiatement utile :

Notation 1. Dans ce qui suit, nous noterons

$$\delta_j := \mathbb{1}_{(Z_i = j)}(Z_i)$$

Ainsi,

$$h_{\theta}(X_i, Z_i) = \prod_{i=1}^{J} h_{\theta}(X_i, Z_i)^{\delta_j}$$

 $D\acute{e}monstration.$  La Log-vraisemblance du modèle s'écrit :

$$\mathcal{L}_{\theta}(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) = \ln \left( \prod_{i=1}^n h_{\theta}(X_i, Z_i) \right)$$

$$= \ln \left( \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^J h_{\theta}(X_i, Z_i)^{\delta_j} \right)$$

$$= \mathbb{1}_{(Z_i = j)}(Z_i) \times \ln \left( \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^J h_{\theta}(X_i, Z_i) \right)$$

 $Z_i$  est à valeur dans  $j \in [1, J]$ , on partitionne donc I := [1, n] comme  $I = \bigcup_{j=1}^J A_j$ .

Ceci va nous permettre de nous désencombrer de l'indicatrice en réindexant la somme. Nous obtenons dès lors :

$$\mathcal{L}_{\theta}(X_1, \dots, X_n, Z_1, \dots, Z_n) = \ln \left( \prod_{i \in A_i} \prod_{j=1}^J h_{\theta}(X_i, Z_i) \right)$$

$$= \ln \left( \prod_{i \in A_i} \prod_{j=1}^J \alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(X_i) \right)$$

$$= \sum_{i \in A_i} \sum_{j=1}^J \ln(\alpha_j \gamma_{\mu_j, v_j}(X_i))$$

$$= \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i))$$

$$= \sum_{j=1}^J \#A_j \ln(\alpha_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{i \in A_j} \ln(\gamma_{\mu_j, v_j}(X_i))$$

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

**Proposition 4** (Estimateurs). Les estimateurs du maximum de vraisemblance  $\widehat{\alpha_j}$  (resp.  $\widehat{\mu_j}$ , et  $\widehat{v_j}$ ) de  $\alpha_j$  (resp.  $\mu_j$  et  $v_j$ ) sont donnés par

2

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

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

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

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

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

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

$$L(\theta) = \sum_{j=1}^{J} \#A_{j} ln(\alpha_{j}) + \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in A_{j}} ln(\gamma_{\mu_{j}, v_{j}}(X_{i})) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^{J} \alpha_{j} - 1\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{J} \#A_{j} ln(\alpha_{j}) + \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in A_{j}} ln\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi v_{j}}} \exp\left(-\frac{(X_{i} - \mu_{j})^{2}}{2v_{j}}\right)\right) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^{J} \alpha_{j} - 1\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{J} \#A_{j} ln(\alpha_{j}) + \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in A_{j}} \left(\frac{-1}{2} ln(2\pi v_{j}) - \frac{(X_{i} - \mu_{j})^{2}}{2v_{j}}\right) - \lambda \times \left(\sum_{j=1}^{J} \alpha_{j} - 1\right)$$

Il reste maintenant à résoudre le système suivant, afin d'obtenir le vecteur  $\widehat{\theta} := (\widehat{\alpha_j}, \widehat{\mu_j}, \widehat{v_j})_{j \in [\![1,J]\!]}$  solution du programme.

$$\begin{cases} \frac{\#A_j}{\widehat{\alpha_j}} - \lambda &= 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \sum_{i \in A_j} (X_i - \widehat{\mu_j}) / \widehat{v_j} &= 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \sum_{i \in A_j} \frac{-0.5 \times 2 \times \pi}{2\pi \widehat{v_j}} + \frac{(X_i - \widehat{\mu_j})^2}{2\widehat{v_j}^2} &= 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \sum_{j=1}^J \widehat{\alpha_j} = 1 \end{cases}$$

Ceci équivaut à

$$\begin{cases} \frac{\#A_j}{\widehat{\alpha_j}} &= \lambda \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{i \in A_j} X_i &= \sum\limits_{i \in A_j} \widehat{\mu_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{j = 1} (X_i - \widehat{\mu_j})^2 &= \sum\limits_{i \in A_j} \widehat{v_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{j = 1} \widehat{\alpha_j} = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\#A_j}{\widehat{\alpha_j}} &= \lambda \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{i \in A_j} \frac{X_i}{\#A_j} &= \widehat{\mu_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{i \in A_j} \frac{(X_i - \widehat{\mu_j})^2}{\#A_j} &= \widehat{v_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \sum\limits_{j = 1} \widehat{\alpha_j} = 1 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \widehat{\alpha_j} &= \frac{\#A_j}{n} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \widehat{\mu_j} &= \sum_{i \in A_j} \frac{X_i}{\#A_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \\ \widehat{v_j} &= \sum_{i \in A_j} \frac{(X_i - \widehat{\mu_j})^2}{\#A_j} \ \forall j \in \llbracket 1, J \rrbracket \end{cases}$$

### 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 supposerons que ne sont observées que les tailles des nids, les diverses espèces d'oiseaux les ayant construit étant en quelque sorte des données inobservées ou "cachées". Nous avons donc un échantillon  $X_1, \dots, X_n$  de même loi que la variable X comme définie ci-dessus. La log-vraisemblance des observations  $\mathcal{L}_{obs}$  s'obtient aisément :

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

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  $X_1, \dots, X_n$ .

**Définition 2** (log-vraisemblance conditionnelle). On définit la log-vraisemblance  $\mathcal{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \cdots, X_n)$  conditionnelle par

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

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 substancielle, qui nous sera immédiatement utile.

#### Proposition 5. Nous avons

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

Démonstration. En effet

$$\mathcal{L}_{c}(\theta, \tilde{\theta}, X_{1}, \cdots, X_{n}) = \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \mathcal{L}_{\theta}(X_{1}, \cdots, X_{n}, Z_{1}, \cdots, X_{n}) | X_{1}, \cdots, X_{n} \right]$$

$$= \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ ln \left( \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{J} h_{\theta}(X_{i}, Z_{i})^{\delta_{j}} \right) \middle| X_{1}, \cdots, X_{n} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \delta_{j} \times ln(h_{\theta}(X_{i}, Z_{i})) | X_{1}, \cdots, X_{n} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \mathbb{1}_{(Z_{i}=j)}(Z_{i}) \times ln(h_{\theta}(X_{i}, Z_{i})) \middle| X_{1}, \cdots, X_{n} \right]$$

Or, les couples  $(X_i, Z_i)$  sont indépendant, donc

$$\mathcal{L}_{c}(\theta, \tilde{\theta}, X_{1}, \dots, X_{n}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \mathbb{1}_{(Z_{i}=j)}(Z_{i}) \times \ln(h_{\theta}(X_{i}, Z_{i})) \middle| X_{i} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \mathbb{1}_{(Z_{i}=j)}(Z_{i}) \times \ln(h_{\theta}(X_{i}, j)) \middle| X_{i} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \ln(h_{\theta}(X_{i}, j)) \mathbb{E}_{\tilde{\theta}} \left[ \mathbb{1}_{(Z_{i}=j)}(Z_{i}) \middle| X_{i} \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \ln(h_{\theta}(X_{i}, j)) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})$$

3

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

**Proposition 6.** La fonction  $\mathscr{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \cdots, X_n)$  se réécrit sous la forme suivante :

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

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

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

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\alpha_{j} \gamma_{\mu_{j}, v_{j}}(X_{i})) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} \left( ln(\alpha_{j}) + ln(\gamma_{\mu_{j}, v_{j}}(X_{i})) \right) \times \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\alpha_{j}) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i}) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\gamma_{\mu_{j}, v_{j}}(X_{i})) \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})$$

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:

$$\gamma_{\mu_j,v_j}(X_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v_j}} e^{-\frac{1}{2}\frac{(X_i - \mu_j)^2}{v_j}}$$

et

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

La double somme devient alors

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

On obtient de fait le résultat espéré :

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

2

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 7.** La fonction  $\theta \mapsto \mathscr{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \cdots, X_n)$  admet un unique maximum  $\theta_M$  donné par :

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

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

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

 $D\'{e}monstration. \ \ Soit \ \theta=(\alpha_j,\mu_j,v_j). \ \ Il \ s'agit \ ici \ de \ maximiser \ la fonction \ \theta\mapsto \mathscr{L}_c(\theta,\tilde{\theta},X_1,\cdots,X_n)$ 

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  $\mathscr{L}_c(\theta, \tilde{\theta}, X_1, \cdots, X_n)$  donnée dans la précédente proposition, nous obtenons ainsi l'expression suivante du Lagrangien

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

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

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha_{j}}(\theta^{*}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})}{v_{j}} - \lambda & = 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu_{j}}(\theta^{*}) = \sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})(-2X_{i} + 2\mu_{j}) & = 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_{j}}(\theta^{*}) = -\frac{1}{2v_{j}} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i}) + \frac{1}{2v_{j}^{2}} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j | X = X_{i})(X_{i} - \mu_{j})^{2} & = 0 \ \forall j \in [1, J] \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda}(\theta^{*}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} - 1 & = 0 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \alpha_{j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} g_{\tilde{\theta}}(j|X = X_{i})}{\lambda} & \forall j \in [1, J] \\ \mu_{j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_{i} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_{i})}{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_{i})} & \forall j \in [1, J] \\ v_{j} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_{i} - \mu_{j})^{2} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_{i})}{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{P}_{\tilde{\theta}}(Z = j|X = X_{i})} & \forall j \in [1, J] \\ \sum_{i=1}^{J} \alpha_{i} = 1 \end{cases}$$

Sous la contrainte  $\sum_{j=1}^{J} \alpha_j = 1$  et la première équation du système précedent on obtient l'égalité suivante :

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

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

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

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} 1}{\lambda} = 1$$

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.

2

### Chapitre 2

## L'algorithme EM

### 2.1 Présentation laconique et pseudo-code

Dans cette partie, nous allons faire le lien entre les outils développés dans le chapitre précédent, et expliciter en quels sens ils apportent une solution à notre problématique. Rappelons que cette dernière consiste en l'estimation de paramètres d'une log-vraisemblance des observations impossible à maximiser analytiquement. Comme mentionné lors de l'introduction, nous allons présenter l'algorithme EM. Il s'agit d'une méthode itérative, constituée de deux étapes; à savoir une étape "Expectation" et une étape "Maximization". Dans la suite de ce chapitre, nous verrons que cet algorithme nous permet de calculer une suite de paramètres qui auront la particularité de faire croître la log-vraisemblance des observations à chaque itération.

### 2.1.1 L'étape E (Expectation)

La phase E consiste à calculer la log-vraisemblance conditionnelle  $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}_{\widehat{\theta}_{k-1}}[\mathscr{L}_c(\theta_{k-1},\theta_k,X_1,\cdots,X_n)]$ . Son calcul sera rendu possible grâce à la formula (1,1).

calcul sera rendu possible grâce à la formule établie dans la proposition 6 et grâce à l'utilisation des paramètres  $\alpha_j, \mu_j, \sigma_j$  calculés à l'itération précédente lors de l'étape M. À l'itération zéro, il est donc indispensable de renseigner des paramètres initiaux. Leur détermination occupera donc une place centrale dans notre projet et nous en discuterons dans une section ultérieure.

### 2.1.2 L'étape M (Maximization)

La phase M consiste à maximiser la vraisemblance trouvée à l'étape E. Ce maximum sera atteint en  $\theta_M = (\widehat{\alpha_j}, \widehat{\mu_j}, \widehat{\sigma_j})$  et ces trois paramètres seront calculalés à l'aide maximiseur établis à la proposition 7. Une fois qu'ils auront étés déterminés, ce sont ces trois paramètres qui seront utilisés dans l'itération suivante pour mettre à jour la log-vraisemblance conditionnelle lors de l'étape M.

#### 2.1.3 Pseudo-code de l'algorithme EM

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): \widehat{\theta_0} \in \Theta, un jeu de données x_1 \dots x_n, K \in \mathbb{N};

1: pour k allant de 1 à K faire

2: ETAPE E: Calculer la fonction Q(\theta; \widehat{\theta}_{k-1}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{\widehat{\theta}_{k-1}} [\mathscr{L}_c(\theta_k - 1, \theta_k, X_1, \dots, X_n)];

3: ETAPE M: Calculer \widehat{\theta}_k = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} Q(\theta; \widehat{\theta}_{k-1});

4: fin du pour

5: retourner \widehat{\theta}_K;
```

Il n'existe pas de preuvre 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

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

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

$$\begin{split} \mathscr{L}_{c}(\theta,\theta_{k},X_{1},\cdots,X_{n}) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(h_{\theta}(X_{i},j)) \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln \big[ f_{\theta}(X_{i}) \times \mathbb{P}_{\theta}(Z=j|X=X_{i}) \big] \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(f_{\theta}(X_{i})) \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\mathbb{P}_{\theta}(Z=j|X=X_{i})) \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} ln(f_{\theta}(X_{i})) \times \underbrace{\sum_{j=1}^{J} \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i})}_{=1} + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\mathbb{P}_{\theta}(Z=j|X=X_{i})) \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} ln(f_{\theta}(X_{i})) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{J} ln(\mathbb{P}_{\theta}(Z=j|X=X_{i})) \mathbb{P}_{\theta_{k}}(Z=j|X=X_{i}) \\ &= \mathscr{L}_{obs}(\theta, X_{1}, \cdots, X_{n}) + \kappa_{\theta,\theta_{k}} \end{split}$$

Dès lors, on obtient

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

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

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

Il reste donc à prouver que

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

En effet, nous avons

$$\begin{split} \kappa_{\theta_k,\theta_k} - \kappa_{\theta_{k+1},\theta_k} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \\ &- \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln(\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z=j|X=X_i)) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln\left(\frac{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z=j|X=X_i)}\right) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \\ &= -n \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \ln\left(\frac{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z=j|X=X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i)}\right) \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \times \frac{1}{n} \\ &\geq -n \times \ln\left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \frac{\mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z=j|X=X_i)}{\mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i)} \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \times \frac{1}{n}\right) \\ & [\text{Cette dernière inégalité est due à la convexité de } \ln \text{ et au fait que } \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \mathbb{P}_{\theta_k}(Z=j|X=X_i) \times \frac{1}{n} \\ &= -n \times \ln\left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^J \mathbb{P}_{\theta_{k+1}}(Z=j|X=X_i) \times \frac{1}{n}\right) \\ &= -n \times \ln(1) \\ &= 0 \end{split}$$

On obtient ainsi

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

Et finalement

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

3

### Chapitre 3

### Etude de simulations

### 3.1 La fonction simulation

Afin de pouvoir lancer l'algorithme EM, nous avons besoin d'un échantillon issue d'un mélange gaussien. Dans le cadre de ce projet, nous disposons uniquement de données répertoriant les moyennes et les écarts-types des volumes des nids de treize espèces d'oiseaux différentes. En partant de ces données (moyennes et écart-types des volumes des nids) et de la commande  $rnorm(\mu,\sigma)$  de R, nous avons implémenté la fonction simulation, qui a pour mission de générer aléatoirement un échantillon d'un mélange Gaussien. Il s'agit d'une des plus importante fonction de ce projet, nous allons donc la décrire.

La fonction prend en argument  $data_th$  (le dataframe contenant les paramètres  $\alpha$ ,  $\mu$  et  $\sigma$ ) et n, qui indique la taille de l'échantillon à générer aléatoirement.

La fonction retourne le vecteur du mélange gaussien de taille n qui a été généré aléatoirement.

La plus partie la plus importante et subtile de ce script est celle dans laquelle nous distribuons aléatoirement les lois des différents  $(X_i)_{i \in \{1,...,n\}}$  de l'échantillon, de sorte à avoir un bon mélange gaussien.

Pour simplifier les choses nous allons prendre un exemple dans lequel nous voulons générer un mélange de

trois gaussiennes, ayant pour paramètres respectifs  $\theta_1 = (\alpha_1, \mu_1, \sigma_1)$ ,  $\theta_2 = (\alpha_2, \mu_2, \sigma_2)$  et  $\theta_3 = (\alpha_3, \mu_3, \sigma_3)$ . On rappelle que  $\sum_{i=1}^{3} \alpha_i = 1$ . Nous procédons de la manière suivante :

Nous génèrons une variable aléatoire Z de loi uniforme à l'aide de la commande runif de R; puis :

- Si  $Z < \alpha_1$  alors  $X \sim N(\mu_1, \sigma_1)$
- Sinon si  $\alpha_1 \leq Z \leq \alpha_1 + \alpha_2$  alors  $Z \sim N(\mu_2, \sigma_2)$
- Sinon si  $\alpha_1 + \alpha_2 \leq Z \leq \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$  alors  $Z \sim N(\mu_3, \sigma_3)$

Notre implémentation fonctionne dans le cas général d'un mélange de J gaussiennes avec  $J \in \mathbb{N}^*$  et repose exactement sur le même principe que celui précédemment expliqué.

### 3.2 Étude de simulations

Les différentes sections ci-dessous auront vocations à présenter plusieurs simulations dans le but de tester l'efficacité de notre implémentation de l'algorithme EM.

### 3.2.1 Étude d'un mélange gaussien à forte séparations

Dans cette partie, nous nous intéresserons à un mélange de trois lois gaussiennes, ayant comme lois respectives  $\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1)$ ,  $\mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2)$  et  $\mathcal{N}(\mu_3, \sigma_3)$  bien séparées, c'est à dire avec des paramètres bien différents les uns des autres (<u>i.e.</u>  $|\alpha_i - \alpha_j|_{i \neq j}$ ;  $|\mu_i - \mu_j|_{i \neq j}$ ;  $|\sigma_i - \sigma_j|_{i \neq j}$  assez grands). Nous avons généré un échantillon d'un mélange de trois gaussiennes à fortes séparations de taille n = 500. Les trois lois du mélange sont les suivantes :

- $-- \mathcal{N}(11,1)$
- $\mathcal{N}(49, 10)$
- $\mathcal{N}(92,3)$

La figure ci-dessous représente la distribution du mélange

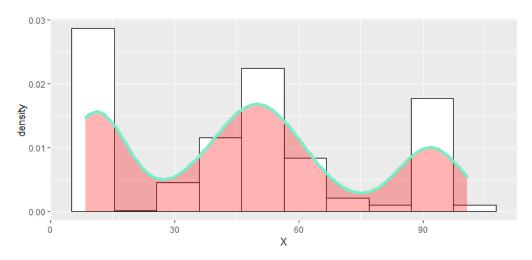


Figure 3.1 – Mélange gaussien à forte séparation

Nous avons lancé l'algorithme EM en choisissant un nombre d'itération k = 10. Comme on peut le voir sur la capture d'écran ci-dessous, les paramètres estimés par l'algorithme EM sont assez proche de ceux théoriques.

Figure 3.2 – Paramètres théoriques VS paramètres estimés

Nous allons maintenant regarder si l'augmentation de la taille de l'échantillon du mélange gaussien généré aléatoirement aura pour effet de diminuer et l'erreur absolue entre les paramètres estimés par l'algorithme EM, et les valeurs théoriques dans le cas d'un mélange à forte séparation. Pour cela nous allons utiliser notre fonction Monte-Carlo.

Nous avons effectué 100 itérations de Monte-Carlo pour les taille d'échantillon suivante :

```
-n = 100
```

-n = 250

-n = 500

Les boites à moustaches (boxplot) ci-dessous, modélisent l'erreur absolue entre les paramètres estimés par l'algorithme Em et ceux théoriques.

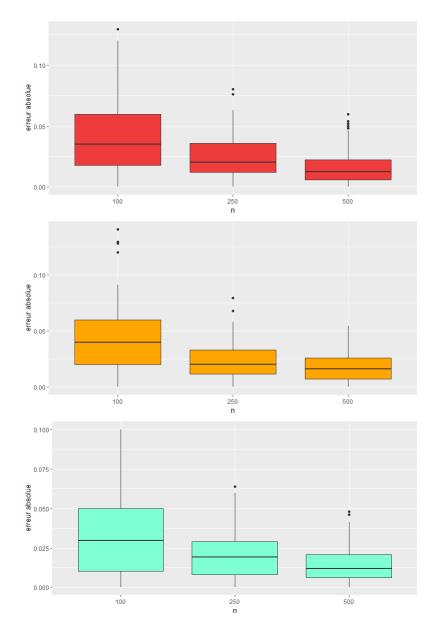


Figure 3.3 – Boxplot des erreurs absolues pour  $\alpha_1,\,\alpha_2$  et  $\alpha_3$ 

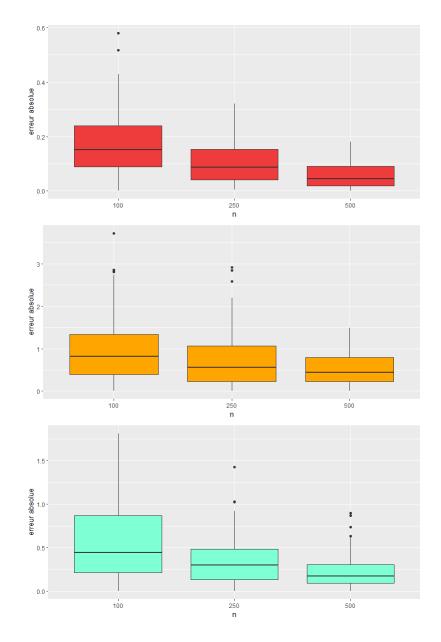


FIGURE 3.4 – Boxplot des erreurs absolues pour  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  et  $\mu_3$ 

D'après les boites à moustaches, nous constatons que plus la taille de l'échantillons du mélange gaussien est grande, et plus l'erreur absolue entre les paramètre estimés par l'algorithme EM et ceux théoriques, diminuent.

#### 3.2.2 Étude d'un mélange gaussien à faible séparations

Dans cette partie, nous nous intéresserons à un mélange de trois gaussiennes ayant comme loi respectives  $\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1)$ ,  $\mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2)$  et  $\mathcal{N}(\mu_3, \sigma_3)$  faiblement séparées, c'est à dire avec des paramètres assez proches les uns des autres (i.e.  $|\alpha_i - \alpha_j|_{i \neq j}$ ;  $|\mu_i - \mu_j|_{i \neq j}$ ;  $|\sigma_i - \sigma_j|_{i \neq j}$  assez petits). De même que pour la première étude, nous avons généré un échantillon d'un mélange de trois lois gaussiennes de taille 500, cette fois-ci avec faible séparation. Les trois lois du mélange sont les suivantes :

- $--\mathcal{N}(5,1)$
- $--\mathcal{N}(13.6,11)$
- $-\mathcal{N}(15.3,6)$

La figure ci-dessous représente la distribution du mélange à faibles séparations;

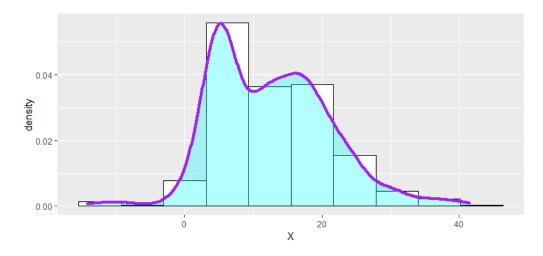


Figure 3.5 – Mélange gaussien à faibles séparations

Ici aussi, nous avons lancé l'algorithme EM en choisissant un nombre d'itération k=10. Comme nous pouvons le voir sur la capture d'écran ci-dessous, même avec un mélange à faibles séparations, les paramètres estimés par l'algorithme EM sont assez proches de ceux théorique.

FIGURE 3.6 – Paramètres théoriques VS paramètres estimés

De même que pour l'étude précèdente, nous allons maintenant regarder si l'augmentation de la taille de l'échantillon du mélange gaussien généré aléatoirement aura pour effet de diminuer l'erreur absolue entre les paramètres estimés par l'algorithme EM et les valeurs théoriques dans le cas d'un mélange à faibles séparations. Pour cela nous allons utiliser notre fonction *Monte-Carlo*.

Nous avons effectué 100 itérations de Monte-Carlo pour les différentes tailles d'échantillons suivantes :

```
-n = 100
```

-n = 250

$$-n = 500$$

Les boites à moustaches (boxplot) ci-dessous, modélisent l'erreur absolue entre les paramètres estimés par l'algorithme Em et ceux théoriques dans le cas d'une faible séparation.

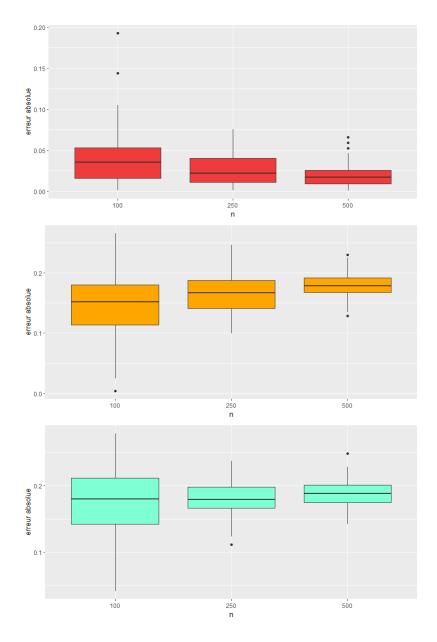


Figure 3.7 – Boxplot des erreurs absolues pour  $\alpha_1,\,\alpha_2$  et  $\alpha_3$ 

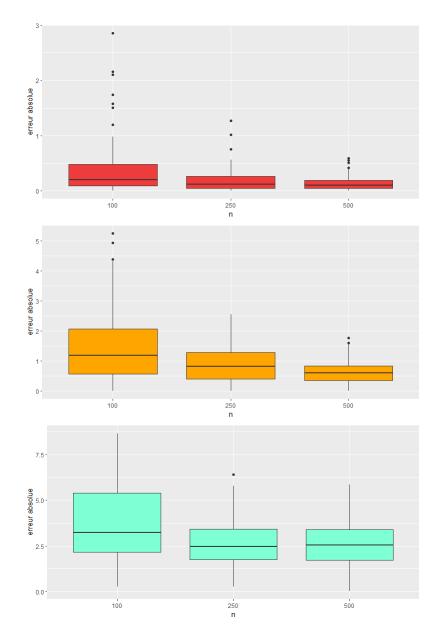


Figure 3.8 – Boxplot des erreurs absolues pour  $\mu_1,\,\mu_2$  et  $\mu_3$ 

Même dans le cas d'un mélange à variables faiblement séparées, on constate que plus on augmente la taille de l'échantillons et plus l'erreur absolue diminue, ce qui est rassurant.

### Chapitre 4

# Un modèle pour les nids d'oiseaux

Dans ce quatrième et dernier chapitre, nous nous proposons de mettre en oeuvre ce que nous avons développé dans les précédents chapitres. Nous allons nous placer en situation réelle, et étudier un jeu de données correspondant à un mélange de lois gaussiennes. Notre thématique ne changera pas, il sera toujours question de nids d'oiseaux.

#### 4.1 Préambule

Nous n'avons hélas pu trouver des jeux de données sur la taille de nids d'oiseaux en libre accès. Toutefois, nous avons récupéré sur le site de l'*Université de Lincoln (Royaume-Uni)* la prébublication [4], contenant des informations fortes utiles sur une douzaine d'espèces d'oiseaux. En voici un extrait :

	Female	Total mass	Cup diameter	Cup diameter	Nest diameter	Nest diameter	Upper wall	Base	Cup depth	Nest Height	Volume (cm <sup>3</sup> )
	Body	of nest (g)	parallel to	perpendicular	parallel to	perpendicular	thickness	Thickness	(mm)	(mm)	
	Mass (g)		long axis	to long axis	long axis	to long axis	(mm)	(mm)			
			(mm)	(mm)	(mm)	(mm)					
Fringillidae	1										
European Goldfinch	16.4	$8.3 \pm 2.4$	$62.8 \pm 12.1$	$54.8 \pm 7.4$	$91.4 \pm 9.3$	$77.8 \pm 7.9$	$12.8 \pm 3.3$	$15.7 \pm 4.3$	$26.0 \pm 5.5$	$41.6 \pm 7.4$	$38.0 \pm 9.1$
(Carduelis Carduelis) [10]											
Common Linnet	18.0	$18.9 \pm 5.4$	$74.7 \pm 6.3$	$59.9 \pm 8.6$	$107.9 \pm 8.8$	95.1 ± 10.2	$16.9 \pm 4.9$	$24.5 \pm 8.9$	$30.6 \pm 9.8$	$55.1 \pm 9.2$	$60.9 \pm 20.8$
(Linaria cannabina) [11]											
Common Chaffinch	21.5	14.5 ± 2.9	$63.3 \pm 8.1$	$50.8 \pm 8.0$	$98.7 \pm 10.9$	$90.3 \pm 9.8$	$18.5 \pm 3.6$	$23.6 \pm 7.6$	$34.3 \pm 7.8$	$58.0 \pm 7.3$	58.3 ± 15.0
(Fringilla coelebs) [11]											
European Greenfinch	25.9	$22.4 \pm 6.2$	$75.6 \pm 7.8$	53.9 ± 11.8	$128.6 \pm 13.7$	99.7 ± 16.2	$24.9 \pm 7.9$	$29.4 \pm 6.0$	$35.4 \pm 5.7$	$64.9 \pm 9.4$	$74.5 \pm 12.2$
(Chloris chloris) [5]											
Eurasian Bullfinch	27.3	12.1 ± 4.6	$80.8 \pm 12.1$	$66.4 \pm 8.1$	$129.7 \pm 23.4$	117.5 ± 19.6	$24.8 \pm 10.9$	24.2 ± 10.7	$22.6 \pm 4.5$	$46.8 \pm 11.3$	$45.0 \pm 3.8$
(Pyrrhula pyrrhula) [17]											
Hawfinch (Coccothraustes	52.9	$27.4 \pm 7.3$	102.2 ± 17.9	$78.8 \pm 25.2$	153.4 ± 19.1	131.3 ± 27.1	$25.4 \pm 5.9$	23.3 ± 4.9	$31.4 \pm 10.9$	54.7 ± 11.5	$71.6 \pm 12.9$
coccothraustes) [4]											

Parmi elles ce trouve des volumes moyens de nids ainsi que la variance associée.

Afin de se conformer aux hypothèses que nous avons précédemment mentionné, nous supposerons ici que les volumes des nids suivent une loi normale. Nous ferons une dernière hypothèse; nous supposerons le nombre de lois connu lors de l'observation.

Plaçons nous dès à présent dans le cadre d'une étude. Pour ce faire, commençons par établir une méthodologie. Il sera en premier lieu choisi, aléatoirement, plusieurs espèces d'oiseaux parmi celles que nous avons à disposition. Puis nous allons générer, avec R, les données dont nous avons besoin. Cet n-échantillon sera créé grâce à notre fonction de simulation. Notre jeu de données étant prêt, nous pourrons commencer l'étude.

Le premier problème qui se posera sera celui du choix des paramètres initiaux, notre algorithme nécessitant des valeurs initiales. Nous avons diverses solutions à notre portée.

La première est de faire une exploration des données; via une représentation graphique de la densité de l'échantillon. Pour ce faire nous utilisons la fonction pré-implémentée dans ggplot. Cette dernière se base sur une méthode d'estimation non-paramétrique, la méthode d'estimation par noyau. Décrivons brièvement son fonctionnement; son étude n'étant pas essentielle dans le cadre de ce projet. C'est une méthode qui estime point par point la densité de l'échantillon, via la fonction  $\widehat{f_n}(x)$  définie comme suit

$$\widehat{f_n}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_i}{h}\right)$$

où h est la taille de la fenêtre et n la taille de l'échantillon. Il s'agit, en quelque sorte, d'une moyenne "locale" en x avec les points de l'échantillon  $X_i$  qui appartiennent à la fenêtre [x-h,x+h]. K est une fonction de noyau. Souvent, elle est choisie comme une densité gaussienne centrée réduite.

Nous pourrons dès lors récupérer des informations bien utiles; si des pics bien distincts se présentent, cela nous permettra de régler judicieusement les moyennes et variances initiales. Nous détaillerons ceci ultérieurement.

Une seconde solution est d'utiliser est d'utiliser les quantiles pour l'estimation des moyennes, et l'écarttype empirique pour les variances initiales.

Une fois cela fait, nous pouvons exécuter notre algorithme et obtenir son estimation des paramètres. Nous pourrons dès lors émettre les conclusions appropriées.

Nous partons, pour ainsi dire, à l'aveugle, mais il sera gardé en mémoire les vraies valeurs, afin de vérifier si nous avons abouti aux bonnes conclusions.

Nous avons, à partir du tableau de données sus-mentionné, construit le data-frame *nest\_data* reprenant les noms des espèces, ainsi que les volumes moyens et variances associées. Ce dernier nous servira à créer les échantillons.

### 4.2 Etude d'un mélange à deux lois

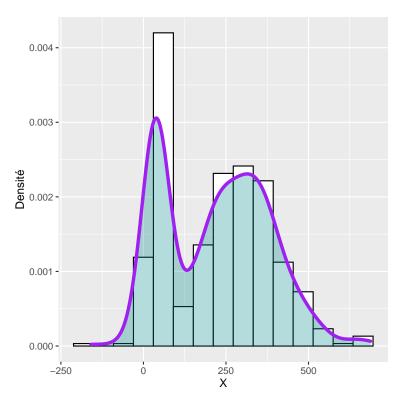
Dans cette section, nous allons étudier le cas d'un mélange de deux lois. Commençons par sélectionner aléatoirement deux espèces, ainsi que les proportions associées. Pour ce faire, nous utiliserons notre fonction, la fonction random species.

```
df <- random_species(nest_data, 2)</pre>
```

Nous pouvons dès lors générer l'échantillon, à l'aide de notre fonction simulation.

```
data <- simulation(df, 500)</pre>
```

Nous commençons par tracer la courbe de densité associée à l'échantillon.



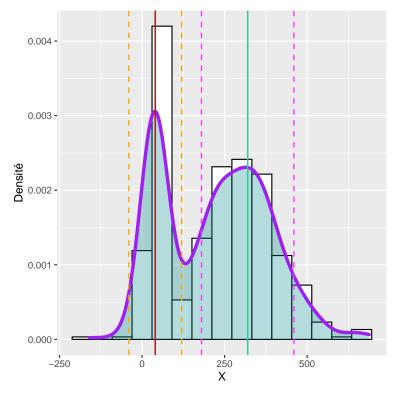
Le mélange des deux lois se distingue au premier coup d'oeil; nous distinguons nettement deux pics. L'"étalement des pics n'étant pas les mêmes, nous pouvons supposer que les variances des deux lois sont différentes. Il est cependant difficile d'émettre des hypothèses quant aux proportions.

Cette section sera composée de deux sous-sections. Dans la première, nous déterminerons les paramètres initiaux via la première méthode décrite précedemment. Nous pourrons dès lors réaliser une première exécution de notre implémentation de l'algorithme EM. Dans la seconde section, nous ferons de même, en considérant cette fois-ci la seconde méthode de détermination des paramètres initiaux.

#### 4.2.1 Première réalisation de l'étude

Commençons par déterminer les paramètres initiaux via une méthode graphique. Cette méthode sera basée sur des heuristiques très approximatives, mais nous permettra d'obtenir des valeurs initiales plutôt correctes

Pour les moyennes, nous considèrerons l'abscisse correspondant au point culminant des pics; et pour les écarts-types  $\sigma$ , nous tenterons de déterminer la valeur entre la moyenne précédemment déterminée et le point d'inflexion du pic. Après plusieurs essais sur R, nous obtenons



Nous avons tracé des lignes pleines aux abscisses X=40 et X=320, qui correspondent approximativement au point culminant des pics. Ceci nous donne donc nos moyennes initiales

$$\mu_{1_{init}} = 40 \text{ et } \mu_{2_{init}} = 320.$$

Pour les variances, nous avons tracé des lignes en pointillées aux abscisses  $\mu_{1_{init}} \pm 80$  et  $\mu_{2_{init}} \pm 140$ . Nous prendrons donc comme variances initiales

$$\sigma_{1_{init}} = 80$$
 et  $\sigma_{2_{init}} = 140$ 

Nous n'avons pas représenté les valeurs des abscisses sur le graphique pour des raisons de lisibilité. Pour les proportions initiales, nous nous proposons de les prendre égales;

$$\alpha_{1_{init}} = \alpha_{2_{init}} = 0.5.$$

Nous pouvons dès lors construire le dataframe des paramètres initiaux;

Nous avons ainsi tout les éléments nécessaire à l'exécution de notre algorithme. Comme nous l'avons vu dans le précédent chapitre, une dizaine d'itérations suffisent pour obtenir de bons résultats.

```
algo_EM(param_init_1, data, 10)
```

```
bird_names alpha mu sigma
1 European Goldfinch 0.2910832 37.76285 9.512478
2 Ring Ouzel 0.7089168 302.51936 125.951894
```

Nous obtenons ainsi nos paramètres estimés; comparons les avec les valeurs théoriques. Ces dernières sont contenues dans le dataframe df. Affichons le :

```
bird_names2 proportion_alpha mean_volume sd_volume
1 European Goldfinch 0.2878713 38.0 9.1
12 Ring Ouzel 0.7121287 298.6 125.1
```

Les proportions sont toutes deux très bien estimées, les erreurs sont de l'ordre de 1%. Il en est de même pour les moyennes, les erreurs d'estimations sont de l'ordre de 1%, , ce qui est plus que satisfaisante. Les variances sont de mêmes très bien estimées.

#### 4.2.2 Seconde réalisation de l'étude

La deuxième méthode à notre disposition pour déterminer les paramètres initiaux est d'utiliser le jeu de données en tant que tel. Pour les deux moyennes initiales, nous allons utiliser les quantiles; et plus précisément le premier et le troisième. En travaillant sur R, nous pouvons aisément obtenir ces derniers:

Nous obtenons ainsi nos moyennes initiales :

$$\mu_{1_{init}} = 45.15146 \text{ et } \mu_{2_{init}} = 352.69611.$$

Pour l'initalisation des écarts-types, nous prendrons

$$\sigma_{1_{init}} = \sigma_{2_{init}} = \widehat{\sigma}$$

οù

$$\widehat{\sigma} := \frac{1}{J} \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2}$$

est l'écart-type empirique; avec J le nombre de mélanges et n la taille de l'échantillon. Une fois de plus, R nous permet de calculer cela aisément :

```
sqrt(var(data))/2
```

80.29425

Ainsi,

$$\sigma_{1_{init}} = \sigma_{2_{init}} = 80.29425.$$

Pour les proportions initiales, nous proposons de nouveau de les prendre égales, ainsi  $\alpha_{1_{init}} = \alpha_{2_{init}} = 0.5$  Nous construisons le dataframe des paramètres initiaux :

🔀 Nous exécutons maintenant l'algorithme avec ce deuxième dataframe de paramètres initiaux.

```
algo_EM(param_init_2, data, 10)
```

```
bird_names alpha mu sigma
1 European Goldfinch 0.2936202 37.79956 9.690775
2 Ring Ouzel 0.7063798 303.45499 125.198078
```

Comme pour le cas précédent, comparons les avec les valeurs théoriques. Nous rappelons une fois de plus les paramètres théoriques :

```
bird_names2 proportion_alpha mean_volume sd_volume
1 European Goldfinch 0.2878713 38.0 9.1
12 Ring Ouzel 0.7121287 298.6 125.1
```

Les proportions sont toutes deux très bien estimées, les erreurs sont de l'ordre de 1%. Il en est de même pour les moyennes, les erreurs d'estimations sont de l'ordre de 1%, , ce qui est formidable. Les variances sont elles aussi remarquablement bien estimées.

Les deux méthodes de déterminations des paramètres initiaux nous donnent des résultats très satisfaisant. Le cas étudié est très favorable, le mélange étant, en quelques sortes, à "fortes séparations".

# Bibliographie

- [1] Chafai D., Malrieu F. (2018). Recueil de modèles aléatoires, 105-11, *Prépublication* https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01897577v3
- [2] Frédéric Santos (2015). L'algorithme EM: une courte présentation, *Document de cours* https://members.loria.fr/moberger/Enseignement/AVR/Exposes/algo-em.pdf
- [3] Michael Collins (1997). The EM algorithm, *Document de cours* http://faculty.washington.edu/fxia/courses/LING572/EM\_collins97.pdf
- [4] 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
- [5] Fraley C., Raftery A.E., Scrucca L., Murphy T.B, Fop M. (2020). Package 'mclust', *Documentation du package mclust*https://cran.r-project.org/web/packages/mclust/mclust.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. Nous reprendrons ici les espèces étudiées lors du dernier chapitre; les divers paramètres seront conservés, seul l'échantillon généré changera. Nous nous somme appuyer sur [5] et [6] afin d'obtenir les éléments nécessaire à l'utilisation de ce package.

Pour commencer, installons et chargeons le Package mclust.

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

Nous reprenons les données des nids d'oiseaux :

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

Nous reprenons ici notre propre fonction de simulation

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

Les prérequis étant posés, nous simulons un échantillon X2 de deux espèces d'oiseaux et un autre X3 de trois espèces d'oiseaux :

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

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.

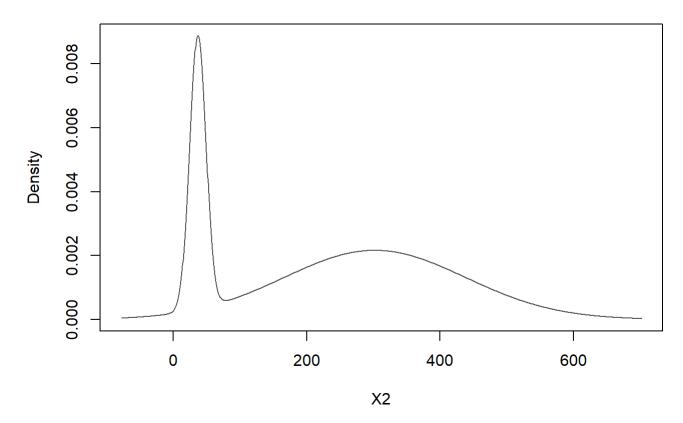
Cette dernière prend en argument des fonctionnalités pertinentes, comme le nombre de mélanges, mais ne permet pas de régler manuellement des valeurs initiales pour les paramètres à estimer.

### A.1 Un exemple sur un mélange à deux lois

Commençons par un executer la fonction densityMclust sur notre exemple de mélange à deux lois, contenu dans le dataframe X2:

```
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  $est\_2$ .

```
'densityMclust' model object: (V,2)
```

Available components:

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

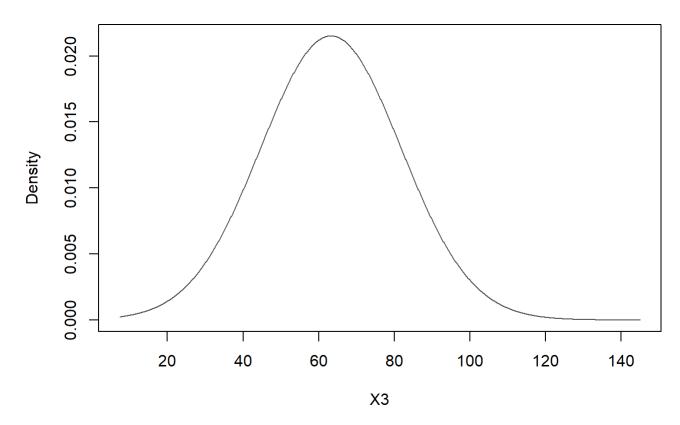
- 36.80898 301.97108
- [1] "Ecart-types estimés:"
- [1] 12.16256 136.32256

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 précisemment, 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 fasse 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]$parameters$<mark>mean
print</mark>("Ecart-types estimés:")
(est_3[13]$parameters$variance$sigmasq)^(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$sigmasq)^(1/2)</pre>
```

Les proportions sont plutôt bien estimées, quoique légèrement surestimées pour deux d'entres elles, mais les erreurs restent faibles. Il en est étonnament de même pour les moyennes, qui sont très bien estimées. Ceci est surprenant au vue 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 ambigüe met en exergue les limites de l'algorithme implémenté dans ce package.