
EXPECTATION MAXIMIZATION POUR LES CHAÎNES DE MARKOV CACHÉES DISCRÈTES

Soit $(X_k)_{0 \leq k \leq n}$ une chaîne de Markov discrète à valeurs dans $\{1, \dots, r\}$, de matrice de transition Q et de loi initiale ν . On considère que cette chaîne est uniquement observée au travers des variables $(Y_k)_{0 \leq k \leq n}$, indépendantes conditionnellement à $(X_k)_{0 \leq k \leq n}$ et telles que pour tout $0 \leq \ell \leq n$, la loi de Y_ℓ sachant $(X_k)_{0 \leq k \leq n}$ est une gaussienne de moyenne μ_{X_ℓ} et de variance v_{X_ℓ} . Le paramètre inconnu est ici $\theta = \{\mu_1, \dots, \mu_r, v_1, \dots, v_r\}$.

1. Écrire la logvraisemblance jointe de $(X_{0:n}, Y_{0:n})$: $\theta \mapsto \log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n})$.

Notons φ_{μ, σ^2} la densité de la loi gaussienne de moyenne μ et de variance σ^2 . Nous avons, pour tout 1

$$\begin{aligned} \log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n}) &= \log p_\theta(X_{0:n}) + \log p_\theta(Y_{0:n} | X_{0:n}), \\ &= \log p_\theta(X_0) + \sum_{k=1}^n \log p_\theta(X_k | X_{k-1}) + \sum_{k=0}^n \log p_\theta(Y_k | X_k), \\ &= \sum_{i=1}^r \mathbb{1}_{X_0=i} \log \nu_i + \sum_{k=1}^n \sum_{i,j=1}^r \mathbb{1}_{X_{k-1}=i, X_k=j} \log Q_{i,j} + \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^r \mathbb{1}_{X_k=i} \log \varphi_{\mu_i, v_i}(Y_k). \end{aligned}$$

2. Écrire la quantité intermédiaire de l'EM $Q(\theta, \theta')$ pour tout θ, θ' :

$$Q(\theta, \theta') = \mathbb{E}_{\theta'} [\log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n}) | Y_{0:n}].$$

Par la question précédente,

$$\begin{aligned} Q(\theta, \theta') &= \mathbb{E}_{\theta'} [\log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n}) | Y_{0:n}], \\ &= \mathbb{E}_{\theta'} \left[\sum_{i=1}^r \mathbb{1}_{X_0=i} \log \nu_i + \sum_{k=1}^n \sum_{i,j=1}^r \mathbb{1}_{X_{k-1}=i, X_k=j} \log Q_{i,j} + \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^r \mathbb{1}_{X_k=i} \log \varphi_{\mu_i, v_i}(Y_k) \middle| Y_{0:n} \right], \\ &= \sum_{i=1}^r \mathbb{E}_{\theta'} [\mathbb{1}_{X_0=i} | Y_{0:n}] \log \nu_i + \sum_{k=1}^n \sum_{i,j=1}^r \mathbb{E}_{\theta'} [\mathbb{1}_{X_{k-1}=i, X_k=j} | Y_{0:n}] \log Q_{i,j} \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^r \mathbb{E}_{\theta'} [\mathbb{1}_{X_k=i} | Y_{0:n}] \log \varphi_{\mu_i, v_i}(Y_k). \end{aligned}$$

3. Écrire cette quantité en faisant apparaître les probabilités

$$\omega_{k-1,k}^\theta(i, j) = \mathbb{P}_\theta(X_{k-1} = i, X_k = j | Y_{0:n}),$$

pour $1 \leq k \leq n$ et

$$\tilde{\omega}_k^\theta(i) = \mathbb{P}_\theta(X_k = i | Y_{0:n}),$$

pour $0 \leq k \leq n$.

Il suffit d'appliquer la question précédente :

$$Q(\theta, \theta') = \sum_{i=1}^r \tilde{\omega}_0^{\theta'}(i) \log \nu_i + \sum_{k=1}^n \sum_{i,j=1}^r \omega_{k-1,k}^{\theta'}(i, j) \log Q_{i,j} + \sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^r \tilde{\omega}_k^{\theta'}(i) \log \varphi_{\mu_i, v_i}(Y_k).$$

4. À l'itération $p \geq 0$, on dispose de l'estimation $\hat{\theta}^{(p)}$. Écrire l'estimateur $\hat{\theta}^{(p+1)}$ en maximisant $\theta \mapsto Q(\theta, \hat{\theta}^{(p)})$, donner la valeur de $\theta^{(p+1)}$ en fonction des $\omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, j)$, $1 \leq k \leq n$, $1 \leq i, j \leq r$.

On peut montrer que la fonction $\theta \mapsto Q(\theta, \theta^{(p)})$ admet un maximum unique obtenu en résolvant l'équation $\nabla_{\theta} Q(\theta, \theta^{(p)}) = 0$.

- Pour tout $1 \leq i \leq r$ et tout $1 \leq j \leq r-1$, en remarquant que $Q_{i,r} = 1 - \sum_{\ell=1}^{r-1} Q_{i,\ell}$,

$$\partial_{Q_{i,j}} Q(\theta, \theta^{(p)}) = \sum_{k=1}^n \frac{\omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, j)}{Q_{i,j}} - \sum_{k=1}^n \frac{\omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, r)}{Q_{i,r}}.$$

On obtient donc que pour tout $1 \leq i \leq r$ et tout $1 \leq j \leq r-1$,

$$\sum_{k=1}^n \frac{\omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, j)}{Q_{i,j}} = \sum_{k=1}^n \frac{\omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, r)}{Q_{i,r}},$$

puis que

$$Q_{i,j}^{(p+1)} = \frac{\sum_{k=1}^n \omega_{k-1,k}^{\theta^{(p)}}(i, j)}{\sum_{k=1}^n \tilde{\omega}_{k-1}^{\theta^{(p)}}(i, j)}$$

- Pour tout $1 \leq i \leq r$,

$$\partial_{\mu_i} Q(\theta, \theta^{(p)}) = -\frac{1}{v_i} \sum_{k=0}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i) (\mu_i + Y_k).$$

Ainsi,

$$\mu_i^{(p+1)} = \frac{\sum_{k=1}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i) Y_k}{\sum_{k=0}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i)}.$$

- Pour tout $1 \leq i \leq r$,

$$\partial_{v_i} Q(\theta, \theta^{(p)}) = \sum_{k=0}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i) \left(-\frac{1}{2v_i} + \frac{1}{2v_i^2} (Y_k - \mu_i)^2 \right).$$

Ainsi,

$$v_i^{(p+1)} = \frac{\sum_{k=0}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i) (Y_k - \mu_i^{(p+1)})^2}{\sum_{k=1}^n \tilde{\omega}_k^{\theta^{(p)}}(i)}.$$

5. Dans le cas où on souhaite également apprendre la loi initiale de la chaîne de Markov, i.e. si l'on note $\nu_i = \mathbb{P}(X_0 = i)$, $1 \leq i \leq r$ et que $\theta = \{\mu_1, \dots, \mu_r, v_1, \dots, v_r, \nu_1, \dots, \nu_r\}$, donner les équations de mise à jour de ν .

En utilisant la question 4, on obtient, pour tout $1 \leq i \leq r-1$,

$$\partial_{\nu_i} Q(\theta, \theta^{(p)}) = \frac{\tilde{\omega}_0^{\theta^{(p)}}(i)}{\nu_i} - \frac{\tilde{\omega}_0^{\theta^{(p)}}(r)}{\nu_r},$$

et

$$\nu_i^{(p+1)} = \tilde{\omega}_0^{\theta^{(p)}}(i).$$

6. Calculer le gradient de la logvraisemblance des observations : $\theta \mapsto \nabla_{\theta} \log p_{\theta}(Y_{0:n})$.

On remarque que pour tout θ, θ'

$$\begin{aligned}
\log p_\theta(Y_{0:n}) &= \sum_{i=1}^n \log p_\theta(Y_{0:n}) p_{\theta'}(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) \\
&= \sum_{i=1}^n \log \frac{p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n}, Y_{0:n})}{p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n})} p_{\theta'}(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}), \\
&= \sum_{i=1}^n \log p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n}, Y_{0:n}) p_{\theta'}(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \log p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) p_{\theta'}(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}),
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\nabla_{\theta=\theta'} \log p_\theta(Y_{0:n}) = \mathbb{E}_{\theta'} [\nabla_{\theta=\theta'} \log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n}) | Y_{0:n}],$$

car

$$\begin{aligned}
\nabla_{\theta=\theta'} \sum_{i=1}^n \log p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) p_{\theta'}(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) \\
= \nabla_{\theta=\theta'} \sum_{i=1}^n p_\theta(X_{0:n} = x_{0:n} | Y_{0:n}) = 0.
\end{aligned}$$

Le score se calcule à l'aide d'une espérance conditionnelle du même type que la quantité intermédiaire de l'EM.

7. En déduire un algorithme de mise à jour des paramètres de type "descente de gradient".

Si l'on souhaite utiliser une méthode du premier ordre on peut écrire, pour $p \geq 0$,

$$\tilde{\theta}^{(p+1)} = \tilde{\theta}^{(p)} + \gamma_p \mathbb{E}_{\theta^{(p)}} [\nabla_{\theta=\theta^{(p)}} \log p_\theta(X_{0:n}, Y_{0:n}) | Y_{0:n}],$$

où les $\{\gamma_p\}_{p \geq 0}$ sont des pas positifs.

8. **Bonus:** Calcul des $\omega_{k-1,k}^\theta(i, j)$, $1 \leq k \leq n$, $1 \leq i, j \leq r$.

- (a) Montrer que l'on peut calculer récursivement $\mathbb{P}_\theta(X_k = i | Y_{0:k})$, $0 \leq k \leq n$, $1 \leq i, j \leq r$.
- (b) Montrer que l'on peut calculer récursivement, de $k = n$ à $k = 0$, $\mathbb{P}_\theta(X_k = i | Y_{0:n})$, $0 \leq k \leq n$, $1 \leq i \leq r$.
- (c) Conclure.