

1 Le modèle

On a un modèle génératif M complexe qui se décompose en trois morceaux $M = (M_1, M_2, M_3)$ comme suit :

$$M_1 : Y|X^{I_1}, X^{I_2}, Z \sim X^{I_1} A_{I_1} + X^{I_2} A_{I_2} + \varepsilon \quad (1)$$

$$M_2 : X^{I_2}|X^{I_1}, Z \sim X^{I_1} B_{I_1}^{I_2} + \varepsilon_{X^{I_2}} \quad (2)$$

$$M_3 : X^{I_1}|Z \sim GM(\alpha) \quad (3)$$

On pose $\theta = (\alpha, \Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2})$ Pour un Z donné on a donc

$$P_{M,Z}(Y, X^{I_1}, X^{I_2}|\theta) = P_{M,Z}(X^{I_1}|\theta)P_{M,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\theta)P_{M,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\theta) \quad (4)$$

$$= P_{M_3,Z}(X^{I_1}|\alpha)P_{M_1,M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2})P_{M_1,M_2,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2}) \quad (5)$$

$P_{M_3,Z}(X^{I_1}|\alpha)$ vit tout seul et est estimé par Mixmod. On sait également que

$$P_{M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2}) = P_{M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}) \text{ et} \quad (6)$$

$$P_{M_1,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2}) = P_{M_1,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}) \quad (7)$$

De manière générale les gens s'arrêtent là, et obtiennent le modèle complet... qui ne tient pas compte de la structure. Mais nous, nous ne sommes pas juste sous M_2 pour les sous-régression ni juste sous M_1 pour Y . Donc la dépendance persiste (c'est ce qui permet que la contrainte aie une utilité, sinon elle serait inutile).

Du coup, il faut définir proprement $P_{M_1,M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2})$ et $P_{M_1,M_2,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\Sigma, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}, A_{I_1}, A_{I_2})$. Or il semble que ces vraisemblances ne soient pas explicites.

Vu que $P_{M_1,M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\theta) \neq P_{M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\theta)$ et $P_{M_1,M_2,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\theta) \neq P_{M_1,Z}(Y|X^{I_2}, X^{I_1};\theta)$, on se limite donc à une décomposition partielle de la vraisemblance et on obtient :

$$P_{M,Z}(Y, X^{I_1}, X^{I_2}|\theta) = P_{M_3,Z}(X^{I_1}|\alpha)P_{M_1,M_2,Z}(Y, X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}) \quad (8)$$

Le second membre suit une loi normale multivariée :

$$(Y, X^{I_2}|X^{I_1}) \sim \mathcal{N} \left(\begin{pmatrix} X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \sigma_Y^2 + \sum_{i \in I_2} (\sigma_i^2 a_i^2) & \dots & a_j \sigma_j^2 & \dots \\ \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ a_j \sigma_j^2 & 0 & \sigma_j^2 & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix} \right) = \mathcal{N} \left(\begin{pmatrix} X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \sigma_Y^2 + \sum_{i \in I_2} (\sigma_i^2 a_i^2) & \dots & a_j \sigma_j^2 & \dots \\ \vdots & & & \\ a_j \sigma_j^2 & & \Sigma_X^{I_2} & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \right) \quad (9)$$

On note $\bar{\Sigma}$ la matrice de variance-covariance correspondante Avec par conséquent une vraisemblance de la forme :

$$P_{M_1, M_2, Z}(Y, X^{I_2} | X^{I_1}; \Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}) = \mathcal{L}_{M_1, M_2, Z}(\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}; Y, X^{I_2} | X^{I_1}) \quad (10)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p_2+1}{2}} |\bar{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix} \right) \quad (11)$$

avec $|\bar{\Sigma}|$ le déterminant de $\bar{\Sigma}$.

On passe à la log-vraisemblance :

$$L_{M_1, M_2, Z}(\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}; Y, X^{I_2} | X^{I_1}) = -\frac{1}{2} \left[(p_2 + 1) \ln(2\pi) + \ln(|\bar{\Sigma}|) + \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix} \right] \quad (12)$$

2 estimation

On veut maximiser la vraisemblance sous la contrainte $A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} = \hat{A}_{I_1}$ où \hat{A}_{I_1} a été préalablement calculé lors de l'étape explicative. Cette contrainte n'est pas linéaire mais devient linéaire si on se limite à A ou à B . On va donc procéder par optimisation alternée, en maximisant la vraisemblance pour un B fixé puis en recommençant avec le A obtenu, et ainsi de suite. La contrainte étant d'égalité, on utilisera le théorème de Lagrange. La partie de la vraisemblance relative à X^{I_1} ne dépend pas de la contrainte ni de l'autre membre et on la maximise donc en amont par Mixmod.

On commence par expliciter la matrice $\bar{\Sigma}^{-1}$

$$\bar{\Sigma} = \begin{pmatrix} E & C^t \\ C & \Sigma_{X^{I_2}} \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$E = \sigma_Y^2 + \sum_{i \in I_2} (\sigma_i^2 A_i^2) = \sigma_Y^2 + A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2} \text{ scalaire} \quad (14)$$

$$C = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_i \sigma_i^2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2} \text{ de taille } p_2 \times 1 \quad (15)$$

$$C^t = A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}}^t = A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} \text{ de taille } 1 \times p_2 \quad (16)$$

On a donc à l'aide du complément de Schur :

$$\bar{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} [E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C]^{-1} & \cdot \\ -\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} & [\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1}] \end{pmatrix} \text{ matrice symétrique} \quad (17)$$

Le complément de Schur est récurrent, on le note $S = E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C$. Après calculs on obtient $S^{-1} = \frac{1}{\sigma_Y^2}$ On obtient alors :

$$-\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} = -\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C S^{-1} = -\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2} S^{-1} = -\frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2} \text{ de taille } p_2 \times 1 \quad (18)$$

et enfin :

$$[\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1}] = \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2} A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} = \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2} A_{I_2}^t \text{ matrice symétrique pleine} \quad (19)$$

On a donc :

$$\bar{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_Y^2} & -\frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2}^t \\ -\frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2} & [\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \frac{1}{\sigma_Y^2} A_{I_2} A_{I_2}^t] \end{pmatrix} \text{ matrice symétrique pleine} \quad (20)$$

On note $\Sigma_{X^{I_2}(-k)}$ la matrice $\Sigma_X^{I_2}$ dépourvue de la ligne k et de la colonne k . On note $\bar{\Sigma}(-1, -k)$ la matrice $\bar{\Sigma}$ dépourvue de sa première colonne et de sa ligne k . On a alors

$$|\bar{\Sigma}| = (\sigma_Y^2 + A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2}) |\Sigma_X^{I_2}| + \sum_{k=1}^{p_2} (-1)^k A_{I_2(k)} \sigma_{I_2(k)}^2 |\bar{\Sigma}(-1, -(k+1))| \text{ développement 1 colonne} \quad (21)$$

$$= (\sigma_Y^2 + A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2}) |\Sigma_X^{I_2}| + \sum_{k=1}^{p_2} (-1)^k A_{I_2(k)} \sigma_{I_2(k)}^2 [(-1)^{k+1} A_{I_2(k)} \sigma_{I_2(k)}^2 \frac{1}{\sigma_{I_2(k)}^2} \prod_{j \in I_2} \sigma_j^2] \text{ developpements k colonne} \quad (22)$$

$$= \sigma_Y^2 \prod_{j \in I_2} \sigma_j^2 + \sum_{k=1}^{p_2} A_{I_2(k)}^2 \sigma_{I_2(k)}^2 \prod_{j \in I_2} \sigma_j^2 - \sum_{k=1}^{p_2} A_{I_2(k)}^2 \sigma_{I_2(k)}^2 \prod_{j \in I_2} \sigma_j^2 \quad (23)$$

$$= \sigma_Y^2 \prod_{j \in I_2} \sigma_j^2 \quad (24)$$

On peut donc calculer plus finement la vraisemblance :

$$L_{M,Z}(\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}; Y, X^{I_2} | X^{I_1}) = -\frac{1}{2} \left[(p_2 + 1) \ln(2\pi) + \ln(|\bar{\Sigma}|) + \begin{pmatrix} Y - X^{I_1} (A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1} (A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix} \right] \quad (25)$$

$$= \dots \quad (26)$$

$$= -\frac{1}{2} \left[(p_2 + 1) \ln(2\pi) + \ln(|\bar{\Sigma}|) + (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2}) \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t + \frac{1}{\sigma_Y^2} (Y - XA)^2 \right] \quad (27)$$

2.1 initialisation

On commence par choisir une valeur de B . On pourrait en prendre une arbitraire, mais on choisit de commencer par le B obtenu par estimation indépendante des sous-régressions (par maximisation de $P_{M_2, Z}(X^{I_2}|X^{I_1}; \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2})$). Cela peut se faire par moindres carrés classiques appliqués de manière indépendante à chacune des sous-régressions.

2.2 étape A

pour cette étape, les paramètres $\Sigma_{X^{I_2}}$ et $B_{I_1}^{I_2}$ sont fixés (la connaissance de $B_{I_1}^{I_2}$) permet d'obtenir directement le $\Sigma_{X^{I_2}}$ associé. On se ramène à la maximisation de

$$\max_A f(A) = \max_A L_{M_1, M_2, Z}(\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}; Y, X^{I_2}|X^{I_1}) \quad (28)$$

$$s.c. \quad A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} - \hat{A}_{I_1} = 0 \quad (29)$$

En notant $\psi(A) = A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} - \hat{A}_{I_1} = B_{I_1} A - \hat{A}_{I_1}$ la contrainte, le théorème de Lagrange permet de dire qu'il existe un unique λ pour lequel résoudre notre maximisation sous contrainte revient à résoudre :

$$g(A, \lambda) = \nabla f(A) + \lambda \nabla \psi(A) = 0 \quad (30)$$

pour $i \in I$:

$$\frac{\partial g(A, \lambda)}{\partial A_i} = \frac{\partial}{\partial A_i} \left(-\frac{1}{2\sigma_Y^2} (Y - XA)^2 + \lambda (B_{I_1} A - \hat{A}_{I_1}) \right) \quad (31)$$

$$= -\frac{1}{2\sigma_Y^2} (-2YX^i + 2X^i XA) + \lambda B_{I_1}^i \quad (32)$$

$$= \frac{1}{\sigma_Y^2} X^i (Y - XA) + \lambda B_{I_1}^i \quad (33)$$

On a pour $i \in I_1$: $\lambda B_{I_1}^i = \lambda_i$ et pour $i \in I_2$: $\lambda B_{I_1}^i = \sum_{j \in I_1} \lambda_j B_{j,i}$
et $\forall i \in I_1$ on a :

$$\frac{\partial g(A, \lambda)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda \psi(A)}{\partial \lambda_i} = (B_i A - \hat{A}_i) = A_i + \sum_{j \in I_2} B_{i,j} A_j - \hat{A}_i \quad (34)$$

On a donc un système à résoudre de la forme (individus iid+log-vraisemblance)

$$B_{I_1} A - \hat{A}_{I_1} = 0 \quad (35)$$

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_Y^2} X_k^i (Y_k - X_k A) + \lambda B_{I_1}^i \right) = 0 \quad \forall i \in I \quad (36)$$

$$(37)$$

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{\sigma_Y^2} X_k^i (Y_k - X_k A) + \lambda B_{I_1}^i \right) = n B_{I_1}^{I_1} \lambda^t + \frac{1}{\sigma_Y^2} (X^i)^t Y - \frac{1}{\sigma_Y^2} (X^i)^t X A \quad (38)$$

$$= \left(-\frac{1}{\sigma_Y^2} (X^i)^t X \ n B_{I_1}^{I_1} \right) \begin{pmatrix} A \\ \lambda^t \end{pmatrix} + \frac{1}{\sigma_Y^2} (X^i)^t Y \quad (39)$$

Matriciellement, on obtient donc le système

$$B_{I_1} A = \hat{A}_{I_1} \quad (40)$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t X & n B_{I_1}^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ \lambda^t \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t Y \quad (41)$$

et donc au final

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t X & B_{I_1}^t \\ B_{I_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ n \lambda^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t Y \\ \hat{A}_{I_1} \end{pmatrix} \quad (42)$$

On aura donc \hat{A} en p premières coordonnées du vecteur :

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t X & B_{I_1}^t \\ B_{I_1} & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sigma_Y^2} X^t Y \\ \hat{A}_{I_1} \end{pmatrix} \quad (43)$$

2.3 étape B

Pour cette étape, les paramètres Σ , A_{I_1} et A_{I_2} sont fixés (ici aussi, la connaissance de A permet d'obtenir le Σ associé). Comme pour l'étape A, on va résoudre :

$$\nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \quad (44)$$

où $f(B) = L_{M_1, M_2, Z}(\Sigma, A_{I_1}, A_{I_2}, \Sigma_{X^{I_2}}, B_{I_1}^{I_2}; Y, X^{I_2} | X^{I_1})$

$$g(B, \lambda) = \nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \quad (45)$$

pour $i \in I_1, j \in I_2$ et $Z_{i,j} \neq 0$:

$$\frac{\partial g(B, \lambda)}{\partial B_{i,j}} = \frac{\partial}{\partial B_{i,j}} \left(-\frac{1}{2} [(X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2}) \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t] \right) + \frac{\partial}{\partial B_{i,j}} (\lambda (B_{I_1} A - \hat{A})) \quad (46)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial B_{i,j}} \left(\sum_{l \in I_2} \frac{1}{\sigma_l^2} (X^l - \sum_{k \in I_1} X^k B_{k,l})^2 \right) + \lambda_i A_j \quad (47)$$

$$= \frac{X^i}{\sigma_j^2} (X^j - \sum_{k \in I_1} X^k B_{k,j}) + \lambda_i A_j \quad (48)$$

et pour tout $i \in I_1$:

$$\frac{\partial g(B, \lambda)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda \psi(B)}{\partial \lambda_i} = (B_i A - \hat{A}_i) = A_i + \sum_{j \in I_2} B_{i,j} A_j - \hat{A}_i = 0 \quad (49)$$

Et donc matriciellement on obtient le système :

$$\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t X^{I_1} + A_{I_2} \lambda = 0 \quad (50)$$

$$A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} = \hat{A}_{I_1} \quad (51)$$

On a donc

$$\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} (X^{I_2})^t X^{I_1} - \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} (B_{I_1}^{I_2})^t (X^{I_1})^t X^{I_1} + A_{I_2} \lambda = 0 \quad (52)$$

$$(B_{I_1}^{I_2})^t (X^{I_1})^t X^{I_1} = (X^{I_2})^t X^{I_1} + \Sigma_{X^{I_2}} A_{I_2} \lambda \quad (53)$$

$$(X^{I_1})^t X^{X^{I_1}} B_{I_1}^{I_2} = (X^{I_1})^t X^{I_2} + \lambda^t A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} \quad (54)$$

$$B_{I_1}^{I_2} = \left((X^{I_1})^t X^{X^{I_1}} \right)^{-1} \left[(X^{I_1})^t X^{I_2} + \lambda^t A_{I_2}^t \Sigma_{X^{I_2}} \right] \quad (55)$$