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 :

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

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

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

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

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

$$(4)$$

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

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

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

$$(6)$$

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

$$(7)$$

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 $P_{M_1,M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma,\Sigma_{X^{I_2}},B^{I_2}_{I_1},A_{I_1},A_{I_2})$ et $P_{M_1,M_2,Z}(Y|X^{I_2},X^{I_1};\Sigma,\Sigma_{X^{I_2}},B^{I_2}_{I_1},A_{I_1},A_{I_2})$. 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 :

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

Le second membre suit une loi normale mulivariée :

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

$$(9)$$

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

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

$$(10)$$

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

$$(11)$$

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}|) + \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{2}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{1}}^{I_{2}})^{t} \end{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{2}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{1}}^{I_{2}})^{t} \end{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{2}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{2}}^{I_{2}})^{t} \end{array} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{2}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{2}}^{I_{2}})^{t} + B^{I_{2}}B_{I_{2}}^{I_{2}} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} 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} + B^{I_{2}}B_{I_{2}}^{I_{2}} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{1}}^{I_{2}}A_{I_{2}} \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{2}}B_{I_{1}}^{I_{2}})^{t} + B^{I_{2}}B_{I_{2}}^{I_{2}} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{1}}^{I_{2}}A_{I_{2}} \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{2}}B_{I_{2}}^{I_{2}} + B^{I_{2}}B_{I_{2}} \right)^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \left(\begin{array}{c} Y - X^{I_{1}}$$

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 $\bar{\Sigma}^{-1}$

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

$$E = \sigma_Y^2 + \sum_{i \in I_2} (\sigma_i^2 a_i^2) \text{ scalaire}$$
 (14)

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

$$(15)$$

On a donc:

$$\bar{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} [E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C]^{-1} & \cdot \\ -\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} & [\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C (E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1}] \end{pmatrix} \text{ matrice symétrique}$$
(16)

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

$$-\Sigma_{X^{I_2}}^{-1}C(E - C^t\Sigma_{X^{I_2}}^{-1}C)^{-1} = -\Sigma_{X^{I_2}}^{-1}CS^{-1} = \begin{pmatrix} \vdots \\ -\frac{a_{I_2(i)}}{\sigma_Y^2} \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ de taille } p_2 \times 1$$

$$(17)$$

et enfin:

$$\left[\Sigma_{X^{I_2}}^{-1} + \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C(E - C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1} C)^{-1} C^t \Sigma_{X^{I_2}}^{-1}\right] = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_i^2} + \frac{a_i^2}{\sigma_Y^2} \\ a_{I_2(i)} a_{I_2(j)} & \ddots \\ \vdots & a_{I_2(i)} a_{I_2(j)} & \ddots \end{pmatrix} \text{ matrice symétrique pleine}$$

$$\vdots \qquad a_{I_2(i)} a_{I_2(j)} & \ddots$$

$$(18)$$

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 $P_{M_2,Z}(X^{I_2}|X^{I_1};\Sigma_{X^{I_2}},B^{I_2}_{I_1})$). 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

$$\max_{A} f(A) = \max_{A} L_{M_{1}, M_{2}, Z}(\Sigma, A_{I_{1}}, A_{I_{2}}, \Sigma_{X^{I_{2}}}, B_{I_{1}}^{I_{2}}); Y, X^{I_{2}} | X^{I_{1}})$$
(19)

$$s.c. A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} - \hat{A}_{I_1} = 0 (20)$$

En notant $\psi(A) = A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2} - \hat{A}_{I_1}$ 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 :

$$g(A,\lambda) = \nabla f(A) + \lambda \nabla \psi(A) = 0 \tag{21}$$

pour $i \in I_1$, on remarque que $\bar{\Sigma}$ ne dépend pas de A_{I_1} :

$$\frac{\partial g(A,\lambda)}{\partial A_i} = -\frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} X^i \\ 0 \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1} (A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Y - X^{I_1} (A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} X^i \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \lambda_i$$
(22)

pour $i \in I_2$:

$$\frac{\partial g(A,\lambda)}{\partial A_i} = \dots + \sum_{j \in I_1} \lambda_j B_{i,j} \tag{23}$$

$$\frac{\partial g(A,\lambda)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda \psi(A)}{\partial \lambda_i} = \lambda_i (B_i A - \hat{A}_i) = \lambda_i (\sum_j B_{i,j} A_j - \hat{A}_i)$$
(24)

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 :

$$\nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \tag{25}$$

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

$$g(B,\lambda) = \nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \tag{26}$$

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

$$\frac{\partial g(B,\lambda)}{\partial B_{i,j}} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} X^{i}A_{j} \\ 0 \\ X^{i} \\ 0 \end{pmatrix}^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{1}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{1}}^{I_{2}})^{t} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Y - X^{I_{1}}(A_{I_{1}} + B_{I_{1}}^{I_{2}}A_{I_{2}}) \\ (X^{I_{2}} - X^{I_{1}}B_{I_{1}}^{I_{2}})^{t} \end{pmatrix}^{t} \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} X^{i}A_{j} \\ 0 \\ X^{i} \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_{i}a_{j} \tag{27}$$

$$\frac{\partial g(B,\lambda)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda \psi(B)}{\partial \lambda_i} = \lambda_i (B_i A - \hat{A}_i) = \lambda_i (\sum_j B_{i,j} A_j - \hat{A}_i)$$
(28)