

# 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  $\lambda$  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)

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

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

$$(37)$$

Matriciellement, on obtient le système

$$B_{I_1} A = \hat{A}_{I_1} \quad (38)$$

$$= \quad (39)$$

### 2.3 étape B

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

$$\nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \quad (40)$$

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

$$g(B, \lambda) = \nabla f(B) + \lambda \nabla \psi(B) = 0 \quad (41)$$

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

$$\frac{\partial g(B, \lambda)}{\partial B_{i,j}} = -\frac{1}{2} \left[ \begin{pmatrix} -X^i A_j \\ 0 \\ -X^i \\ 0 \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} -X^i A_j \\ 0 \\ -X^i \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \lambda_i A_j \quad (42)$$

$$= \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \bar{\Sigma}^{-1} \begin{pmatrix} X^i A_j \\ 0 \\ X^i \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_i A_j \text{ Attention : le } X^i \text{ est en ligne } j+1 \quad (43)$$

$$= \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} \frac{X^i A_j}{\sigma_Y^2} - \frac{X^i A_j}{\sigma_Y^2} \\ -\frac{X^i A_j}{\sigma_Y^2} A_{I_2} + \frac{X^i A_j}{\sigma_Y^2} A_{I_2} + X^i \Sigma_{X^{I_2}}^{-1}(\cdot, j) \end{pmatrix} + \lambda_i a_j \quad (44)$$

$$= \begin{pmatrix} Y - X^{I_1}(A_{I_1} + B_{I_1}^{I_2} A_{I_2}) \\ (X^{I_2} - X^{I_1} B_{I_1}^{I_2})^t \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{X^i}{\sigma_j^2} \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_i A_j \quad (45)$$

$$= (X^j - X^{I_1} B_{I_1}^j) \frac{X^i}{\sigma_j^2} + \lambda_i A_j \quad (46)$$

$$\frac{\partial g(B, \lambda)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda \psi(B)}{\partial \lambda_i} = (B_i A - \hat{A}_i) = A_i + \sum_{j \in I_2} B_{i,j} A_j - \hat{A}_i \quad (47)$$

On doit donc résoudre :

$$B_{I_1} A - \hat{A}_{I_1} = 0 \quad (48)$$

$$\sum_{k=1}^n \left( (X_k^j - X_k^{I_1} B_{I_1}^j) \frac{X_k^i}{\sigma_j^2} + \lambda_i A_j \right) = 0 \quad \forall j \in I_2, \forall i \in I_1 \quad (49)$$

$$B_{i,j} \mathbf{1}_{[Z_{i,j}=0]} = 0 \quad \forall j \in I_2, \forall i \in I_1 \quad (50)$$