Chapitre 2 : Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM

- Introduction
- Intégration par la méthode de Monte Carlo
- Fonctions d'importance
- Méthodes d'accélération
- Algorithme EM

Utilisations de la simulation

1. intégration

$$\mathfrak{I} = \mathbb{E}_f[h(X)] = \int h(x)f(x)dx$$

2. comportement limite/stationnaire de systèmes complexes
3. optimisation

$$\arg\min_x h(x) = \arg\max_x \exp\{-\beta h(x)\} \qquad \beta > 0$$

Example (Propagation d'une épidémie)

Sur un territoire quadrillé, on représente par x, y les coordonnées d'un point.
La probabilité d'attraper la maladie est

$$P_{x,y} = \frac{\exp(\alpha + \beta \cdot n_{x,y})}{1 + \exp(\alpha + \beta \cdot n_{x,y})} \mathbb{I}_{n_{x,y}>0}$$

si $n_{x,y}$ dénote le nombre de voisins de (x, y) ayant déjà cette maladie.
La probabilité de guérir de la maladie est

$$Q_{x,y} = \frac{\exp(\delta + \gamma \cdot n_{x,y})}{1 + \exp(\delta + \gamma \cdot n_{x,y})}$$

Example (Propagation d'une épidémie (2))

Question

En fonction de $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$, quelle est la vitesse de propagation de cette épidémie ? la durée moyenne ? le nombre de personnes infectées ?

Intégration par Monte Carlo

Loi des grands nombres

Si $X_1, \ldots, X_n$ simulés suivant f,

$$\hat{\mathfrak{I}}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(X_i) \longrightarrow \mathfrak{I}$$

Théorème Central Limit

Evaluation de l'erreur par

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}(h(X_i) - \hat{\mathfrak{I}})^2$$

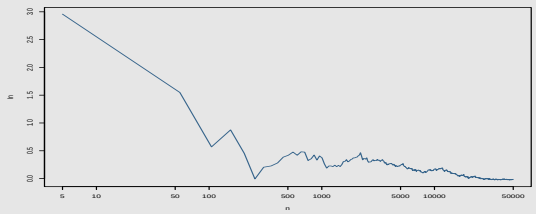
et

$$\hat{\mathfrak{I}}_n \approx \mathcal{N}(\mathfrak{I}, \hat{\sigma}_n^2)$$

Example (Normale)

Pour une loi normale, $\mathbb{E}[X^4] = 3$. Par la méthode de Monte Carlo,

n	5	50	500	5000	50,000	500,000
$\hat{\mathfrak{I}}_n$	1.65	5.69	3.24	3.13	3.038	3.029



Example (Cauchy / Normale)

On considère le modèle joint

$$X|\theta \sim \mathcal{N}(\theta, 1), \quad \theta \sim \mathcal{C}(0, 1)$$

Après observation de X, on estime θ par

$$\delta^{\pi}(x) = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta}{1+\theta^2} e^{-(x-\theta)^2/2} d\theta}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+\theta^2} e^{-(x-\theta)^2/2} d\theta}$$

Example (Cauchy / Normale (2))

Cette forme δ^π suggère de simuler des variables iid

$$\theta_1, \cdots, \theta_m \sim \mathcal{N}(x, 1)$$

et de calculer

$$\hat{\delta}^\pi_m(x) = \frac{\sum_{i=1}^m \frac{\theta_i}{1+\theta_i^2}}{\sum_{i=1}^m \frac{1}{1+\theta_i^2}} \,.$$

Par la **Loi des Grands Nombres**,

$$\hat{\delta}^\pi_m(x) \longrightarrow \delta^\pi(x) \quad \text{quand } m \longrightarrow \infty.$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Intégration par la méthode de Monte Carlo

Example (FdR normale)

Approximation de la fonction de répartition de la loi normale

$$\Phi(t) = \int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} dy$$

par

$$\hat{\Phi}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}_{X_i \leq t},$$

ayant généré un échantillon de taille n, $(X_1, \ldots, X_n)$, via l'algorithme de Box-Muller.

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Intégration par la méthode de Monte Carlo

Example (FdR normale (2))

- Variance
$$\Phi(t)(1-\Phi(t))/n,$$
car les variables $\mathbb{I}_{X_i \leq t}$ sont iid Bernoulli($\Phi(t)$).
- Pour t près de $t = 0$ la variance vaut approximativement $1/4n$: une précision de quatre décimales demande en moyenne
$$\sqrt{n} = \sqrt{2}\, 10^4$$
simulations, donc, 200 **millions d'itérations.**
- Plus grande précision [absolue] dans les queues

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Intégration par la méthode de Monte Carlo

Example (FdR normale (3))

n	0.0	0.67	0.84	1.28	1.65	2.32	2.58	3.09	3.72
10^2	0.485	0.74	0.77	0.9	0.945	0.985	0.995	1	1
10^3	0.4925	0.7455	0.801	0.902	0.9425	0.9885	0.9955	0.9985	1
10^4	0.4962	0.7425	0.7941	0.9	0.9498	0.9896	0.995	0.999	0.9999
10^5	0.4995	0.7489	0.7993	0.9003	0.9498	0.9898	0.995	0.9989	0.9999
10^6	0.5001	0.7497	0.8	0.9002	0.9502	0.99	0.995	0.999	0.9999
10^7	0.5002	0.7499	0.8	0.9001	0.9501	0.99	0.995	0.999	0.9999
10^8	0.5	0.75	0.8	0.9	0.95	0.99	0.995	0.999	0.9999

Evaluation de quantiles normaux par Monte Carlo fondée sur n générations normales.

Fonctions d'importance

Représentation alternative :

$$\mathfrak{I} = \int h(x)f(x)dx = \int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$$

Donc, si $Y_1, \ldots, Y_n$ simulés suivant g,

$$\tilde{\mathfrak{I}}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(Y_i)\frac{f(Y_i)}{g(Y_i)} \longrightarrow \mathfrak{I}$$

Intérêt

- Fonctionne pour tout choix de g tel que

$$\text{supp}(g) \supset \text{supp}(f)$$

- Amélioration possible de la variance
- Recyclage de simulations $Y_i \sim g$ pour d'autres densités f
- Utilisation de lois simples g

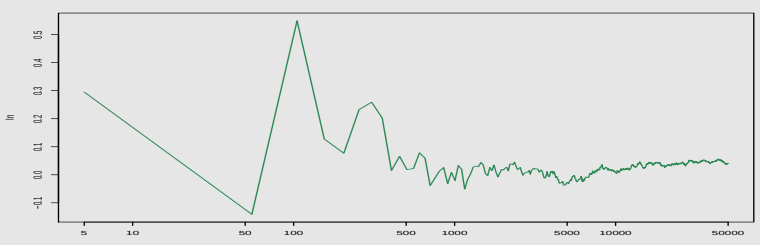
Example (Normale)

Pour la loi normale et l'approximation de $\mathbb{E}[X^4]$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-x^2/2}dx \overset{[y=x^2]}{=} 2\int_0^{\infty} y^{3/2}\frac{1}{2}e^{-y/2}dy$$

suggère d'utiliser $g(y) = \exp(-y/2)/2$

n	5	50	500	5000	50000
$\tilde{\mathfrak{I}}_n$	3.29	2.89	3.032	2.97	3.041



Choix de la fonction d'importance

La "bonne" fonction g dépend de la densité f *et* de la fonction h

Théorème (Importance optimale)

Le choix de g minimisant la variance de $\tilde{\mathfrak{I}}_n$ est

$$g^\star(x) = \frac{|h(x)|f(x)}{\mathfrak{I}}$$

Remarques

- Variance finie seulement si

$$\mathbb{E}_f\left[h^2(X)\frac{f(X)}{g(X)}\right] = \int_{\mathcal{X}} h^2(x)\,\frac{f(X)}{g(X)}\,dx < \infty\,.$$

- Variance **nulle** pour $g^\star$ si h positive (!!)
- $g^\star$ dépend de $\mathfrak{I}$ que l'on cherche à estimer (??)
- Remplacement de $\tilde{\mathfrak{I}}_n$ par moyenne harmonique

$$\check{\mathfrak{I}}_n = \frac{\sum_{i=1}^n h(y_i)/|h(y_i)|}{\sum_{i=1}^n 1/|h(y_i)|}$$

(numérateur et dénominateur sont convergents)
souvent **mauvais** (variance infinie)

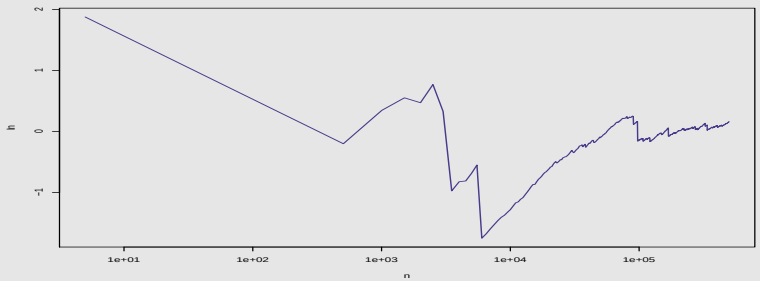
Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Fonctions d'importance

Example (Normale)

Pour la loi normale et l'approximation de $\mathbb{E}[X^4]$,
$g^\star(x) \propto x^4 \exp(-x^2/2)$, loi de la racine d'une $\mathcal{G}a(5/2, 1/2)$

[Exercice]

n	5	50	500	5,000	50,000	500,000
$\check{\mathfrak{I}}_n$	4.877	2.566	2.776	2.317	2.897	3.160



Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Fonctions d'importance

Example (Loi de Student)

$X \sim \mathcal{T}(\nu, \theta, \sigma^2)$, de densité

$$f(x) = \frac{\Gamma((\nu+1)/2)}{\sigma\sqrt{\nu\pi}\,\Gamma(\nu/2)}\left(1 + \frac{(x-\theta)^2}{\nu\sigma^2}\right)^{-(\nu+1)/2}\,.$$

Soient $\theta = 0$, $\sigma = 1$ et

$$\mathfrak{I} = \int_{2.1}^{\infty} x^5 f(x)dx.$$

à calculer

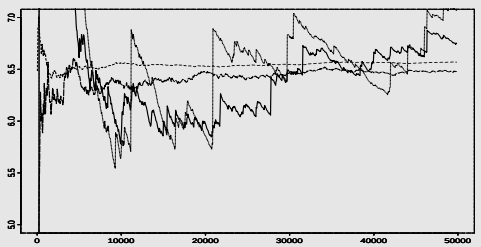
Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Fonctions d'importance

Example (Loi de Student (2))

- Choix de fonctions d'importance
  - f, car $f = \frac{\mathcal{N}(0,1)}{\sqrt{\chi^2_\nu/\nu}}$
  - Cauchy $\mathcal{C}(0,1)$
  - Normale $\mathcal{N}(0,1)$
  - $\mathscr{U}([0, 1/2.1])$

Résultats:

- Uniforme optimale
- Cauchy OK
- f et Normale mauvaises



Simulations corrélées

La correlation négative...

Deux échantillons $(X_1, \ldots, X_m)$ et $(Y_1, \ldots, Y_m)$ suivant f pour estimer

$$\mathfrak{I} = \int_{\mathbb{R}} h(x) f(x) dx \; .$$

Soient

$$\hat{\mathfrak{I}}_1 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} h(X_i) \quad \text{et} \quad \hat{\mathfrak{I}}_2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} h(Y_i)$$

de moyenne $\mathfrak{I}$ et variance σ^2

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accélération

Simulations corrélées (2)

...réduit la variance

La variance de la moyenne vaut

$$\text{var}\left(\frac{\hat{\mathfrak{I}}_1 + \hat{\mathfrak{I}}_2}{2}\right) = \frac{\sigma^2}{2} + \frac{1}{2}\text{cov}(\hat{\mathfrak{I}}_1, \hat{\mathfrak{I}}_2).$$

Par conséquent, si les deux échantillons sont **négativement corrélés**,

$$\text{cov}(\hat{\mathfrak{I}}_1, \hat{\mathfrak{I}}_2) \leq 0 \, ,$$

ils font mieux que deux échantillons indépendants de même taille

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accélération

Variables antithétiques

Construction de variables négativement corrélées

1. Si f symétrique autour de μ, prendre $Y_i = 2\mu - X_i$
2. Si $X_i = F^{-1}(U_i)$, prendre $Y_i = F^{-1}(1 - U_i)$
3. Si $(A_i)_i$ est une partition de $\mathcal{X}$, échantillonnage partitionné en prenant des X_j dans chaque A_i (nécessite de connaître $\Pr(A_i)$)

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accélération

Variables de contrôle

Soit

$$\mathfrak{I} = \int h(x) f(x) dx$$

à évaluer et

$$\mathfrak{I}_0 = \int h_0(x) f(x) dx$$

connue

On estime quand même $\mathfrak{I}_0$ par $\hat{\mathfrak{I}}_0$ (et $\mathfrak{I}$ par $\hat{\mathfrak{I}}$)

Variables de contrôle (2)

Estimateur combiné

$$\hat{\mathfrak{I}}^* = \hat{\mathfrak{I}} + \beta(\hat{\mathfrak{I}}_0 - I_0)$$

$\hat{\mathfrak{I}}^*$ **est sans biais pour** $\mathfrak{I}$ **et**

$$\text{var}(\hat{\mathfrak{I}}^*) = \text{var}(\hat{\mathfrak{I}}) + \beta^2\text{var}(\hat{\mathfrak{I}}) + 2\beta\text{cov}(\hat{\mathfrak{I}}, \hat{\mathfrak{I}}_0)$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accéleration

Variables de contrôle (3)

Choix optimal de β

$$\beta^\star = -\frac{\text{cov}(\hat{\mathfrak{I}}, \hat{\mathfrak{I}}_0)}{\text{var}(\hat{\mathfrak{I}}_0)} ,$$

avec

$$\text{var}(\hat{\mathfrak{I}}^\star) = (1 - \rho^2)\ \text{var}(\hat{\mathfrak{I}}) ,$$

où ρ corrélation entre $\hat{\mathfrak{I}}$ et $\hat{\mathfrak{I}}_0$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accéleration

Example (Approximation de quantiles)

Soit à évaluer

$$\varrho = \text{Pr}(X > a) = \int_a^\infty f(x)dx$$

par

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{I}(X_i > a), \qquad X_i \overset{\text{iid}}{\sim} f$$

avec $\text{Pr}(X > \mu) = \frac{1}{2}$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accéleration

Example (Approximation de quantiles (2))

La variable de contrôle

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{I}(X_i > a) + \beta\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{I}(X_i > \mu) - \text{Pr}(X > \mu)\right)$$

améliore $\hat{\varrho}$ si

$$\beta < 0 \quad \text{et} \quad |\beta| < 2\frac{\text{cov}(\delta_1, \delta_3)}{\text{var}(\delta_3)} = 2\frac{\text{Pr}(X > a)}{\text{Pr}(X > \mu)}.$$

Intégration par conditionnement

Tirer parti de l'inégalité

$$\mathbf{var}(\mathbb{E}[\delta(\mathbf{X})|\mathbf{Y}]) \leq \mathbf{var}(\delta(\mathbf{X}))$$

appelée aussi **Théorème de Rao-Blackwell**

Conséquence :

Si $\hat{\mathfrak{I}}$ est un estimateur sans biais de $\mathfrak{I} = \mathbb{E}_f[h(X)]$, avec X simulé à partir de la densité jointe $\tilde{f}(x, y)$, où

$$\int \tilde{f}(x, y)dy = f(x),$$

l'estimateur

$$\hat{\mathfrak{I}}^* = \mathbb{E}_{\tilde{f}}[\hat{\mathfrak{I}}|Y_1, \ldots, Y_n]$$

domine $\hat{\mathfrak{I}}(X_1, \ldots, X_n)$ en variance (et est aussi sans biais)

Example (Espérance de loi de Student)

Soit à calculer

$$\mathbb{E}[h(x)] = \mathbb{E}[\exp(-x^2)] \quad \text{avec} \quad X \sim \mathscr{T}(\nu, 0, \sigma^2)$$

La loi de Student peut être simulée par

$$X|y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2 y) \qquad \text{et} \qquad Y^{-1} \sim \chi^2_\nu.$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Méthodes d'accélération

Example (Espérance de loi de Student (2))

La moyenne empirique

$$\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \exp(-X_j^2)\,,$$

peut être améliorée à partir de l'échantillon joint

$$((X_1, Y_1), \ldots, (X_m, Y_m))$$

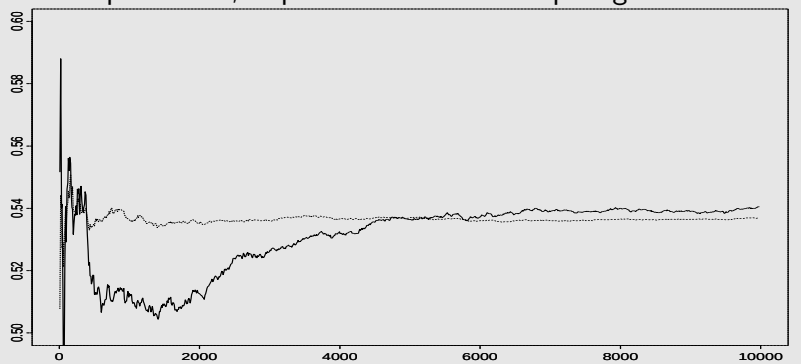
puisque

$$\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \mathbb{E}[\exp(-X^2)|Y_j] = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2 Y_j + 1}}$$

est l'espérance conditionnelle

Example (Espérance de loi de Student (3))

Dans ce cas particulier, la précision est **dix fois** plus grande



Estimateurs de $\mathbb{E}[\exp(-X^2)]$: moyenne empirique (traits pleins) contre espérance conditionnelle (pointillés) pour $(\nu, \mu, \sigma) = (4.6, 0, 1)$.

Optimisation par l'algorithme EM

Maximum de vraisemblance

On observe $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_n)$, iid $g(x|\theta)$ et on cherche

$$\theta^\star = \arg\max_\theta L(\theta|\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n g(X_i|\theta).$$

Utilisation de la représentation marginale

$$g(x|\theta) = \int_{\mathcal{Z}} f(x, z|\theta)\, dz$$

de la vraisemblance pour obtenir le maximum de vraisemblance

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Exemples

- Données censurées :

$$X = \min(X^*, a) \qquad X^* \sim \mathcal{N}(\theta, 1)$$

- Données de mélange

$$X \sim .3\,\mathcal{N}_1(\mu_0, 1) + .7\,\mathcal{N}_1(\mu_1, 1),$$

- Modèles de deséquilibre

$$X = \min(X^*, Y^*) \qquad X^* \sim f_1(x|\theta) \quad Y^* \sim f_2(x|\theta)$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Complétion

La méthode consiste à ajouter aux données un complément $\mathbf{z}$, où

$$(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) \sim f(\mathbf{x}, \mathbf{z}|\theta)$$

$\mathbf{Z}$ est appelé **vecteur des données manquantes** et le couple $(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ **vecteur des données complétées**
Notons que la densité conditionnelle de $\mathbf{Z}$ sachant les données $\mathbf{x}$ vaut

$$k(\mathbf{z}|\theta, \mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x}, \mathbf{z}|\theta)}{g(\mathbf{x}|\theta)}$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Décomposition de la vraisemblance

La vraisemblance associée aux données complétées

$$L^c(\theta|\mathbf{x}, \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}, \mathbf{z}|\theta)$$

et la vraisemblance associée aux données observées

$$L(\theta|\mathbf{x})$$

sont liées par

$$\begin{aligned} \log L(\theta|\mathbf{x}) &= \mathbb{E}[\log L^c(\theta|\mathbf{x}, \mathbf{Z})|\theta_0, \mathbf{x}] \\ &\quad -\mathbb{E}[\log k(\mathbf{Z}|\theta, \mathbf{x})|\theta_0, \mathbf{x}], \end{aligned} \tag{1}$$

pour tout θ_0, où l'intégration se fait suivant la loi conditionnelle de $\mathbf{Z}$ sachant les données, $k(\mathbf{z}|\theta_0, \mathbf{x})$

Remarque

Il y a "deux θ" ! : dans (1), θ_0 est une valeur fixe (mais arbitraire) qui sert à faire l'intégration, tandis que θ est libre (et variable)
Maximiser la vraisemblance **observée**

$$L(\theta|\mathbf{x})$$

revient à maximiser le terme de droite dans (1)

Intuition

Au lieu de maximiser (en θ) le terme de droite dans (1), on ne maximise que la première partie

$$\mathbb{E}[\log L^c(\theta|\mathbf{x},\mathbf{Z})|\theta_0,\mathbf{x}]$$

même si la seconde partie dépend de θ :
On cherche donc à maximiser la log-vraisemblance complétée ou plutôt son espérance puisque $\mathbf{Z}$ est inconnu, et on corrige l'omission du second terme de (1) ainsi que la dépendance à θ_0 en itérant les maximisations.

Espérance/Maximisation

On note l'**E**spérance de la log-vraisemblance complète

$$Q(\theta|\theta_0,\mathbf{x}) = \mathbb{E}[\log L^c(\theta|\mathbf{x},\mathbf{Z})|\theta_0,\mathbf{x}]$$

pour insister sur la dépendence en θ_0 et à l'échantillon $\mathbf{x}$

Principe

EM construit une suite d'estimateurs $\hat{\theta}_{(j)}$, $j = 1, 2, \ldots$, par itération des étapes **E**spérance et **M**aximisation :

$$Q(\hat{\theta}_{(j)}|\hat{\theta}_{(j-1)},\mathbf{x}) = \max_{\theta} Q(\theta|\hat{\theta}_{(j-1)},\mathbf{x}).$$

Algorithme EM

Itérer (en m)

1. (*étape E*) Calculer

$$Q(\theta|\hat{\theta}_{(m)},\mathbf{x}) = \mathbb{E}[\log L^c(\theta|\mathbf{x},\mathbf{Z})|\hat{\theta}_{(m)},\mathbf{x}]\,,$$

2. (*étape M*) Maximiser $Q(\theta|\hat{\theta}_{(m)},\mathbf{x})$ en θ et prendre

$$\hat{\theta}_{(m+1)} = \arg\max_{\theta} Q(\theta|\hat{\theta}_{(m)},\mathbf{x}).$$

tant qu'un point fixe [de Q] n'est pas obtenu

Justification

On démontre que la vraisemblance observée

$$L(\theta|\mathbf{x})$$

augmente à chaque étape de EM

$$L(\hat{\theta}_{(m+1)}|\mathbf{x}) \geq L(\hat{\theta}_{(m)}|\mathbf{x})$$

[Exercice]

Example (Données censurées)

Soit un échantillon $\mathcal{N}(\theta, 1)$ censuré à droite en a, de vraisemblance :

$$L(\theta|\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(x_i-\theta)^2\right\}[1-\Phi(a-\theta)]^{n-m}$$

La logvraisemblance complétée vaut

$$\log L^c(\theta|\mathbf{x},\mathbf{z}) \propto -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(x_i-\theta)^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=m+1}^{n}(z_i-\theta)^2\,,$$

où les z_i correspondent aux observations censurées, de densité

$$k(z|\theta,\mathbf{x}) = \frac{\exp\{-\frac{1}{2}(z-\theta)^2\}}{\sqrt{2\pi}[1-\Phi(a-\theta)]} = \frac{\varphi(z-\theta)}{1-\Phi(a-\theta)}, \qquad a < z.$$

Example (Données censurées (2))

A la j-ième itération de EM,

$$\begin{aligned} Q(\theta|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}) &\propto -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(x_i-\theta)^2 - \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\sum_{i=m+1}^{n}(Z_i-\theta)^2 \,\middle|\, \hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right] \\ &\propto -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(x_i-\theta)^2 \\ &\quad -\frac{1}{2}\sum_{i=m+1}^{n}\int_a^\infty (z_i-\theta)^2 k(z|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x})\,dz_i \end{aligned}$$

Example (Données censurées (3))

En différenciant en θ, on obtient

$$n\,\hat{\theta}_{(j+1)} = m\bar{x} + (n-m)\mathbb{E}[Z|\hat{\theta}_{(j)}]\,,$$

où

$$\mathbb{E}[Z|\hat{\theta}_{(j)}] = \int_a^\infty z k(z|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x})\,dz = \hat{\theta}_{(j)} + \frac{\varphi(a-\hat{\theta}_{(j)})}{1-\Phi(a-\hat{\theta}_{(j)})}.$$

Par conséquent, la suite EM est donnée par

$$\hat{\theta}_{(j+1)} = \frac{m}{n}\bar{x} + \frac{n-m}{n}\left[\hat{\theta}_{(j)} + \frac{\varphi(a-\hat{\theta}_{(j)})}{1-\Phi(a-\hat{\theta}_{(j)})}\right],$$

et elle converge vers le maximum de vraisemblance $\hat{\theta}$.

Example (Mélanges)

Dans le cadre d'un mélange de deux distributions normales

$$.3\,\mathcal{N}_1(\mu_0,1) + .7\,\mathcal{N}_1(\mu_1,1),$$

échantillon $X_1,\ldots,X_n$ et paramètre $\theta=(\mu_0,\mu_1)$
Donnée manquante : $Z_i \in \{0,1\}$, variable indicatrice de la composante associée à X_i ,

$$X_i|z_i \sim \mathcal{N}(\mu_{z_i},1) \qquad Z_i \sim \mathcal{B}(.7)$$

La vraisemblance complétée vaut

$$\begin{aligned}\log L^c(\theta|\mathbf{x},\mathbf{z}) &\propto -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^n z_i(x_i-\mu_1)^2 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n (1-z_i)(x_i-\mu_0)^2 \\ &= -\frac{1}{2}n_1(\hat{\mu}_1-\mu_1)^2 - \frac{1}{2}(n-n_1)(\hat{\mu}_0-\mu_0)^2\end{aligned}$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Example (Mélanges (2))

A la j-ième itération de EM,

$$Q(\theta|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[n_1(\hat{\mu}_1-\mu_1)^2 + (n-n_1)(\hat{\mu}_0-\mu_0)^2|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right]$$

Différenciant,

$$\hat{\theta}_{(j+1)} = \begin{pmatrix} \mathbb{E}\left[n_1\hat{\mu}_1\middle|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right] \Big/ \mathbb{E}\left[n_1|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right] \\ \mathbb{E}\left[(n-n_1)\hat{\mu}_0\middle|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right] \Big/ \mathbb{E}\left[(n-n_1)|\hat{\theta}_{(j)},\mathbf{x}\right] \end{pmatrix}$$

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Example (Mélanges (3))

Soit $\hat{\theta}_{(j+1)}$ égal à

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[Z_i\middle|\hat{\theta}_{(j)},x_i\right] x_i \Big/ \sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[Z_i|\hat{\theta}_{(j)},x_i\right] \\ \sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[(1-Z_i)\middle|\hat{\theta}_{(j)},x_i\right] x_i \Big/ \sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[(1-Z_i)|\hat{\theta}_{(j)},x_i\right] \end{pmatrix}$$

Conclusion

L'étape *(E)* de EM consiste à remplacer les données manquantes Z_i par leur espérance conditionnellement à $\mathbf{x}$ (espérance qui dépend de $\hat{\theta}_{(m)}$).

Nouveaux outils informatiques pour la Statistique exploratoire (=NOISE)
Méthodes de Monte Carlo et algorithme EM
Algorithme EM

Propriétés

EM est un algorithme qui

- converge vers un maximum local ou un point-selle de la vraisemblance
- dépend de la condition initiale $\theta_{(0)}$
- nécessite plusieurs initialisations si la vraisemblance n'est pas unimodale

MCEM

Une difficulté supplémentaire avec EM est que le calcul de $Q(\theta|\theta_0, \mathbf{x})$ n'est pas toujours possible
On peut remplacer l'espérance par une approximation de Monte Carlo

$$\hat{Q}(\theta|\theta_0, \mathbf{x}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \log L^c(\theta|\mathbf{x}, \mathbf{Z}_i) \ ,$$

où $\mathbf{Z}_1, \ldots, \mathbf{Z}_m \sim k(\mathbf{z}|\mathbf{x}, \theta_0)$.
Quand $m \to \infty$, cette approximation converge vers

$$Q(\theta|\theta_0, \mathbf{x})$$

Inconvénient :

A moins de bénéficier de conditions spéciales, il faut recommencer la simulation des $\mathbf{Z}_i$ à chaque itération de MCEM. Besoin de grandes valeurs de m pour obtenir la stabilité.