Apprentissage statistique : modélisation descriptive et introduction aux réseaux de neurones (RCP208)

Estimation de densité

Michel Crucianu
(prenom.nom@cnam.fr)
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/ml/

EPN05 Informatique
Conservatoire National des Arts & Métiers, Paris, France

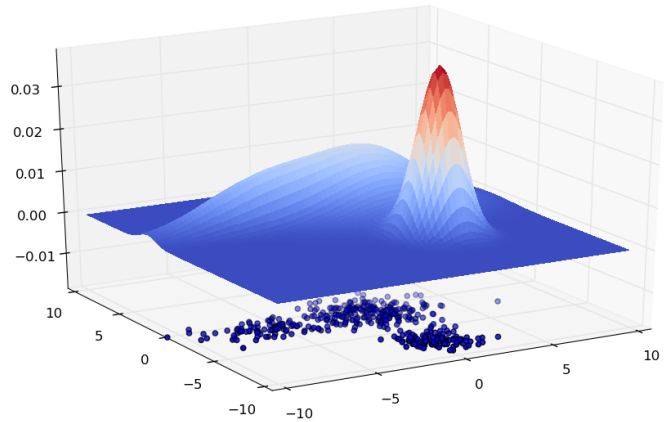
7 novembre 2024

Plan du cours

Objectifs et utilisations de l'estimation de densités

- Objectif général :
  - Soit $\mathcal{D}_N = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$ (en général $\mathcal{D}_N \subset \mathbb{R}^d$) un ensemble de N observations

  $\Rightarrow$ De quelle densité de probabilité f est issu l'échantillon aléatoire $\mathcal{D}_N$?



- Utilisations :
  - Caractériser la distribution des données dans un domaine d'intérêt

    $\rightarrow$ quelles sont les régions de densité élevée, ces régions diffèrent-elles d'une classe à une autre (si les observations appartiennent à différentes classes), etc.
  - Caractériser le support de la distribution (la région où la densité ne peut pas être assimilée à 0)

    $\rightarrow$ comment détecter les *outliers*, où faut-il envisager un rejet de non représentativité, etc.
  - Construire un modèle décisionnel sur la base des densités

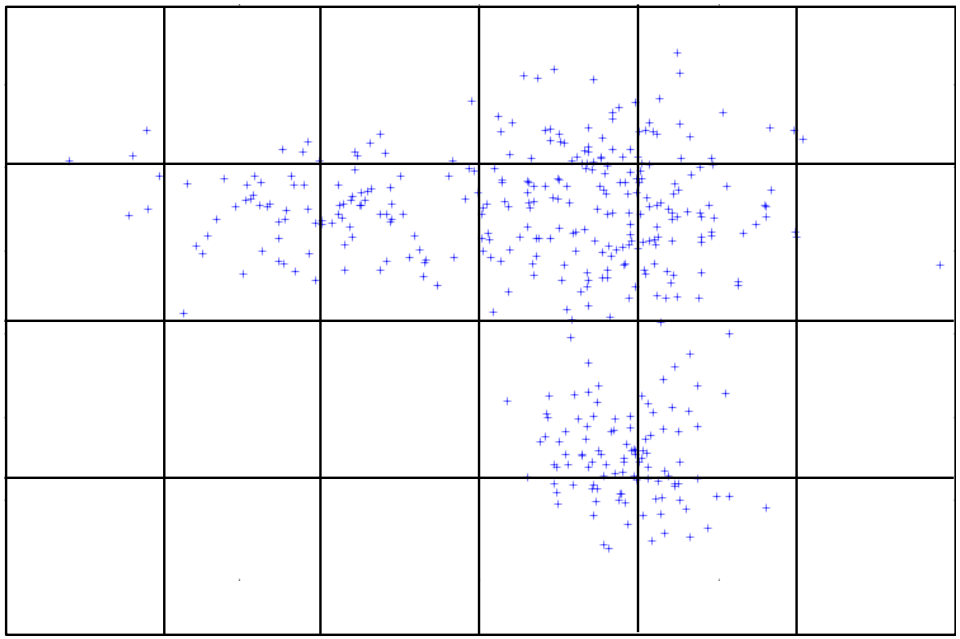
Typologie des méthodes d'estimation de densités

1. Méthodes non paramétriques : absence d'hypothèses sur la densité f
   1. Estimation par histogramme
   2. Estimation par noyaux
   3. Estimation par k_n plus proches voisins
2. Méthodes paramétriques : hypothèses sur l'appartenance de f à une famille paramétrée $\rightarrow$ estimation des paramètres du modèle
   - Loi simple ou mélange (en général additif) de lois simples
   - Méthodes d'estimation :
     - Maximisation de la vraisemblance : modèle qui explique le mieux les observations $\mathcal{D}_N$
     - Maximisation de l'*a posteriori* : tenir compte aussi de connaissances *a priori*

Plan du cours

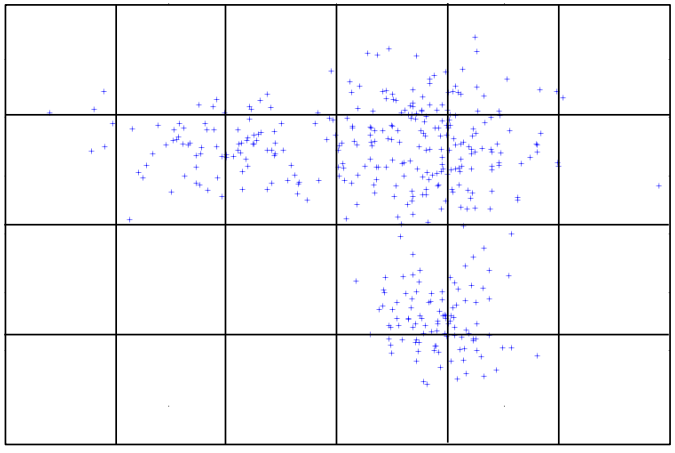
Estimation par histogramme

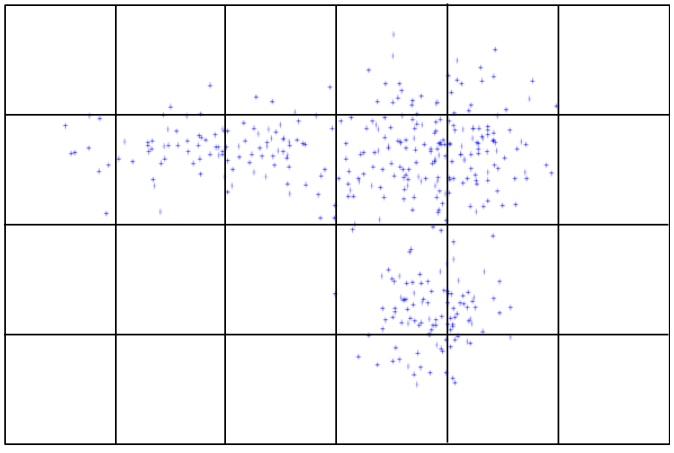
- Méthode :
  1. Découpage du domaine en intervalles de même « volume » v
  2. Si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ se trouve dans l'intervalle i qui contient k_i observations de $\mathcal{D}_N$, estimation de la densité en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ par $\widehat{f}(\mathbf{x}) = \frac{k_i/N}{v}$



Estimation par histogramme (2)

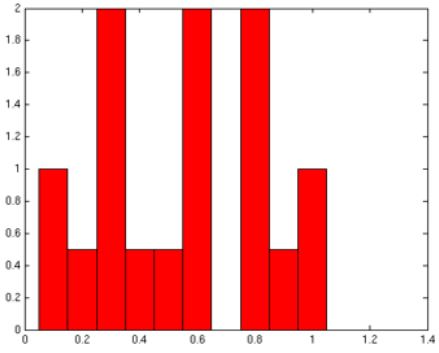
- Caractérisation de la méthode d'estimation :
  - Qualité d'estimation : résultats proches pour un autre échantillon issu de la même densité f (faible variance) ?
  - Résolution : « volume » v auquel s'applique une estimation
- Constats :
  - Variance élevée si changement d'échantillon ou décalage des intervalles
  - Avec v fixé, si N augmente $\Rightarrow$ la variance diminue (la qualité d'estimation s'améliore) mais représente une moyenne sur v
  - Avec N fixé, si v diminue $\Rightarrow$ la résolution (précision par rapport à $\mathbf{x}$) s'améliore mais la variance augmente (la qualité d'estimation se dégrade)

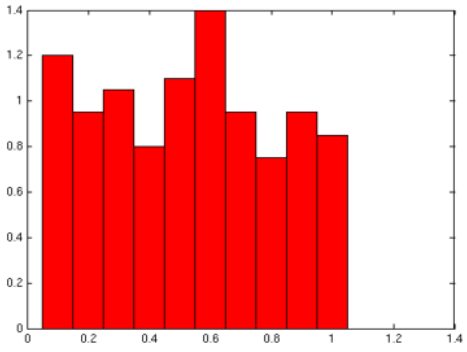


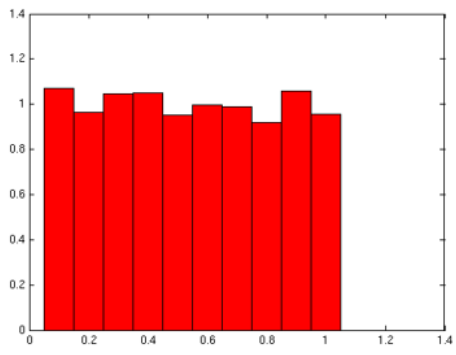


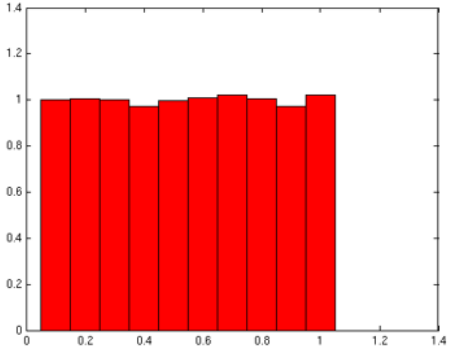
Estimation par histogramme : exemple unidimensionnel

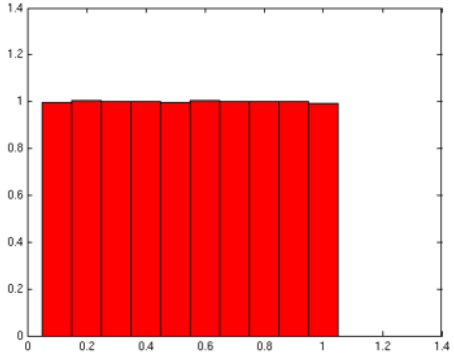
- Données générées suivant une distribution uniforme sur $[0, 1]$
- Nombre d'intervalles fixé, taille d'échantillon augmente $\Rightarrow$ variance diminue

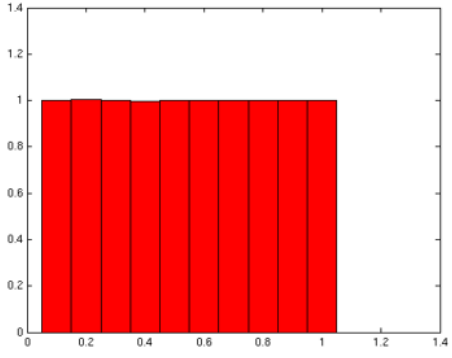
$N = 20$ 

$N = 200$ 

$N = 2\,000$ 


$N = 20\,000$

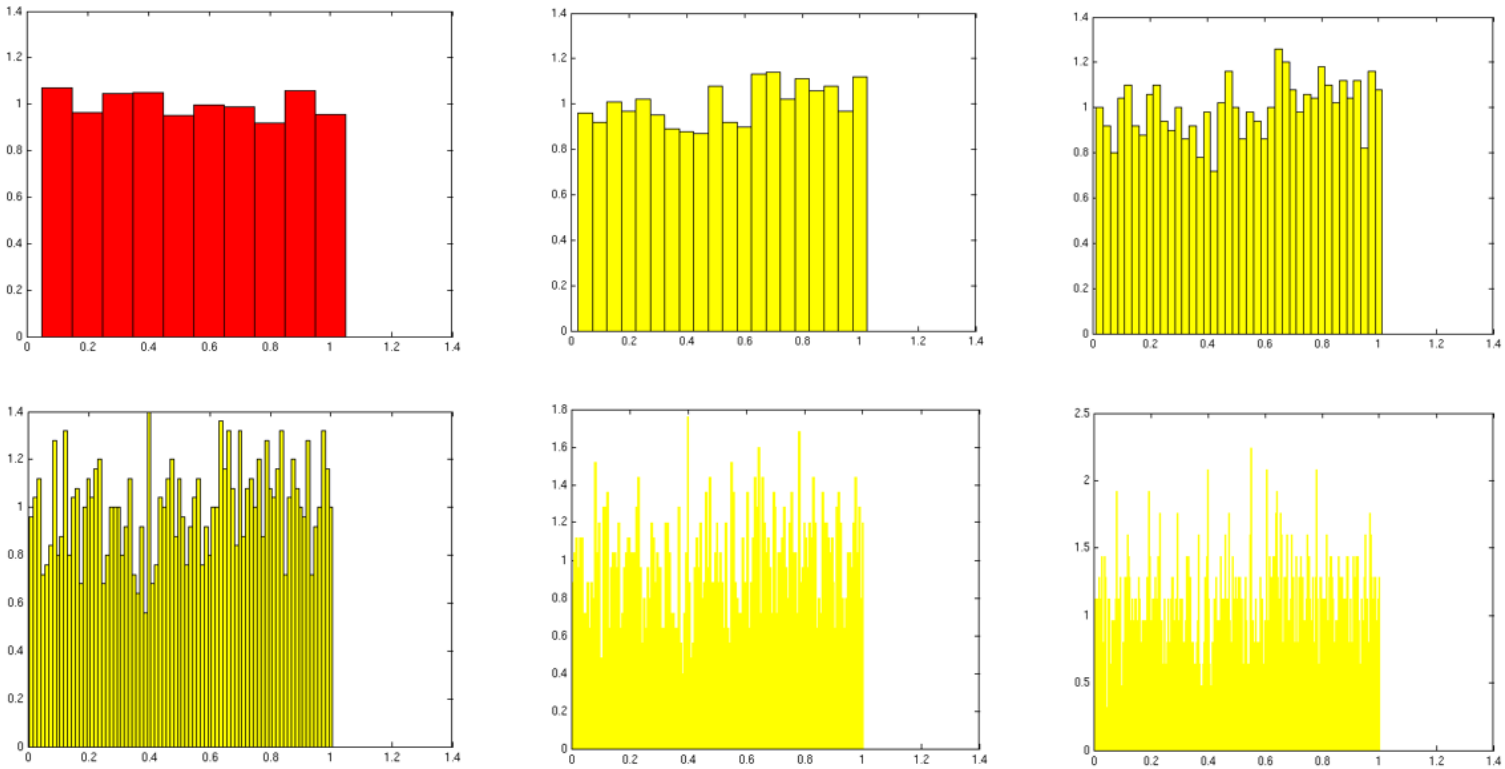

$N = 200\,000$


$N = 2\,000\,000$

Estimation par histogramme : exemple unidimensionnel (2)

- Échantillon fixé ($N = 2000$), nombre d'intervalles augmente $\Rightarrow$ variance augmente

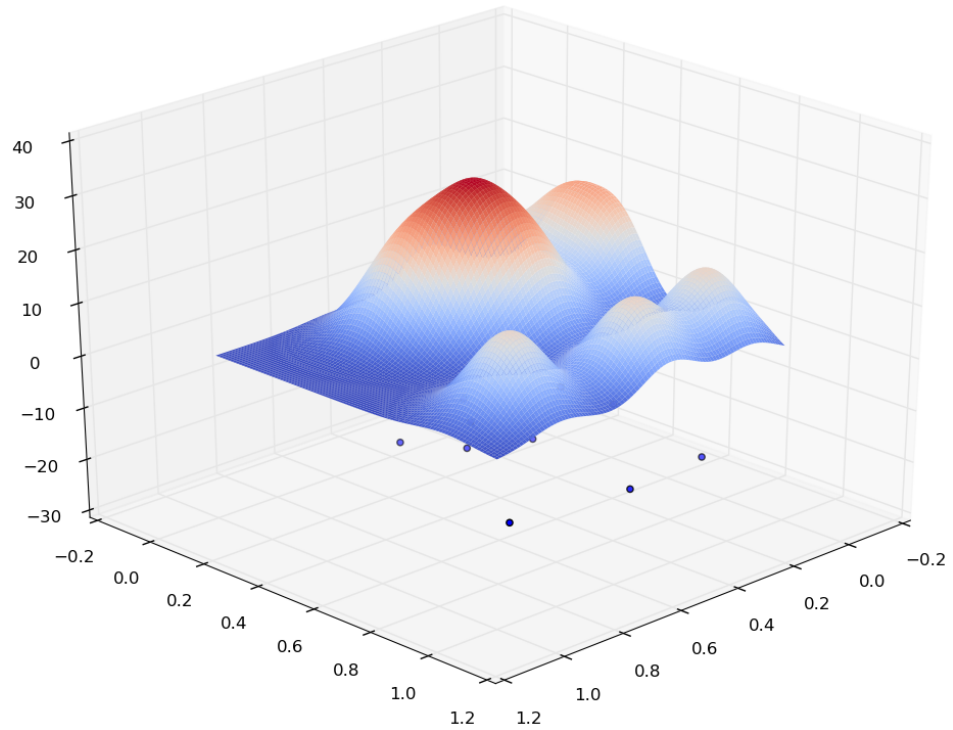
$v = 1/10$ $v = 1/20$ $v = 1/40$



$v = 1/80$ $v = 1/160$ $v = 1/320$

Estimation par noyaux

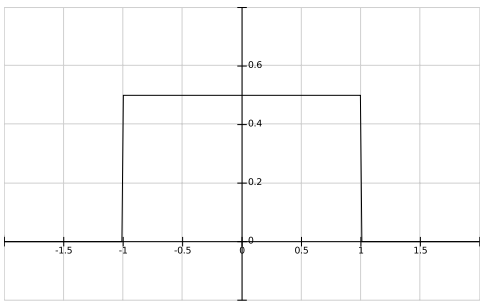
- Idées : lier le découpage aux données, « lisser » l'estimation de la densité
- Méthode (initiée par Rosenblatt en 1956, développée par Parzen en 1962)) :
  1. Choisir un type de noyau Φ et un paramètre (de lissage) h
  2. Centrer un noyau Φ_h sur chaque observation $\mathbf{x}_i \in \mathcal{D}_N$
  3. La densité en un point $\mathbf{x}$ est estimée par $\hat{f}_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \Phi_h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$
- Exemple :



Estimation par noyaux (2)

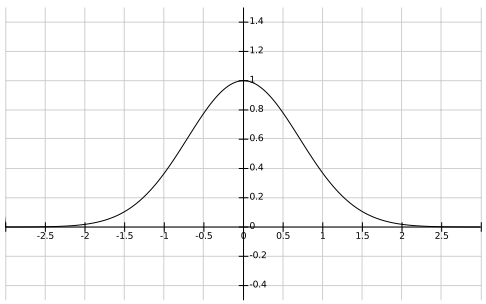
- En général les noyaux $\Phi_h : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^+$ s'expriment à travers des noyaux unidimensionnels $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+$, $\Phi_h(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{h}\ \phi\left(\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|}{h}\right)$
- Conditions suffisantes pour que l'estimateur soit une densité de probabilité :
  1. $\phi(u) \geq 0, \forall u \in \mathbb{R}$
  2. $\int_{\mathbb{R}} \phi(u) du = 1$
- Quelques noyaux :

Uniforme



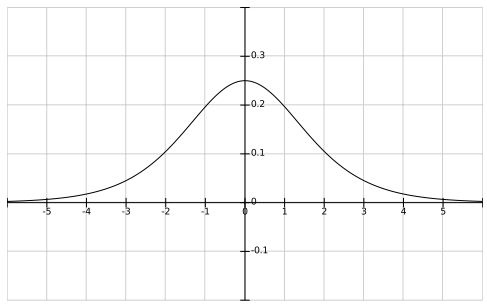
$$\phi(u) = \frac{1}{2}\mathbf{1}_{|u|\leq 1}$$

Gaussien



$$\phi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}}$$

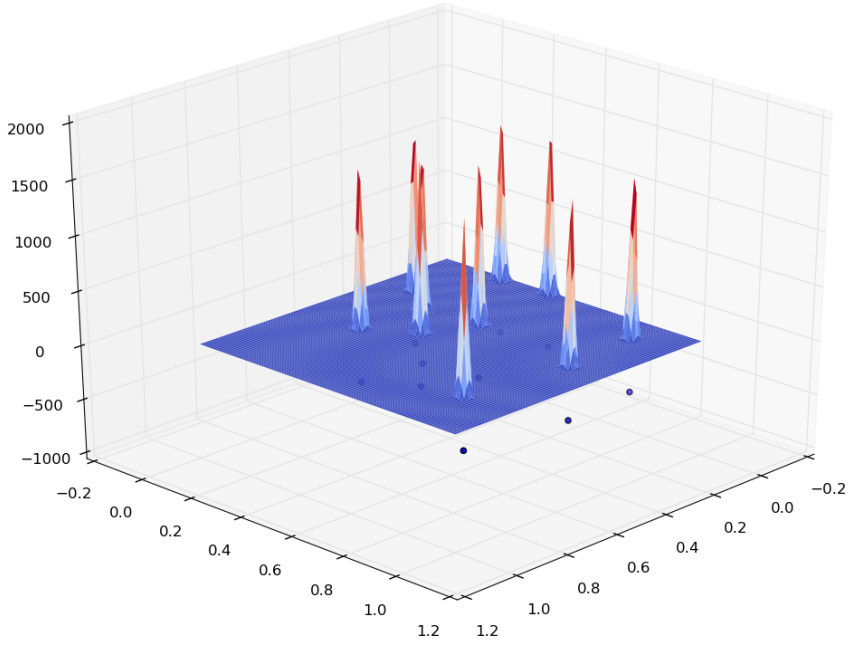
Logistique



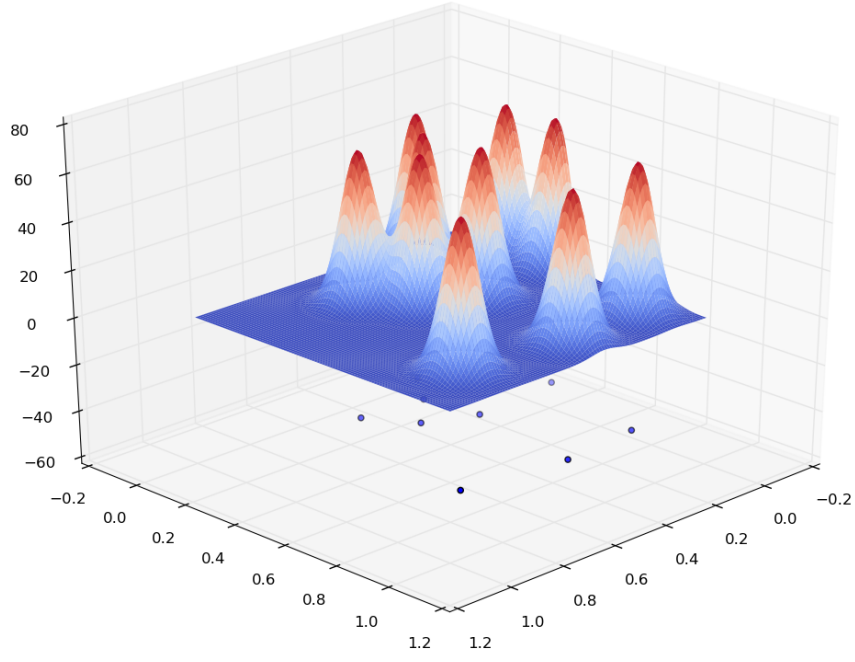
$$\phi(u) = \frac{e^{-|u|}}{\left(1+e^{-|u|}\right)^2}$$

Estimation par noyaux : exemple bidimensionnel

- $N = 10$ observations dans $\mathbb{R}^2$, noyau gaussien de variance indiquée



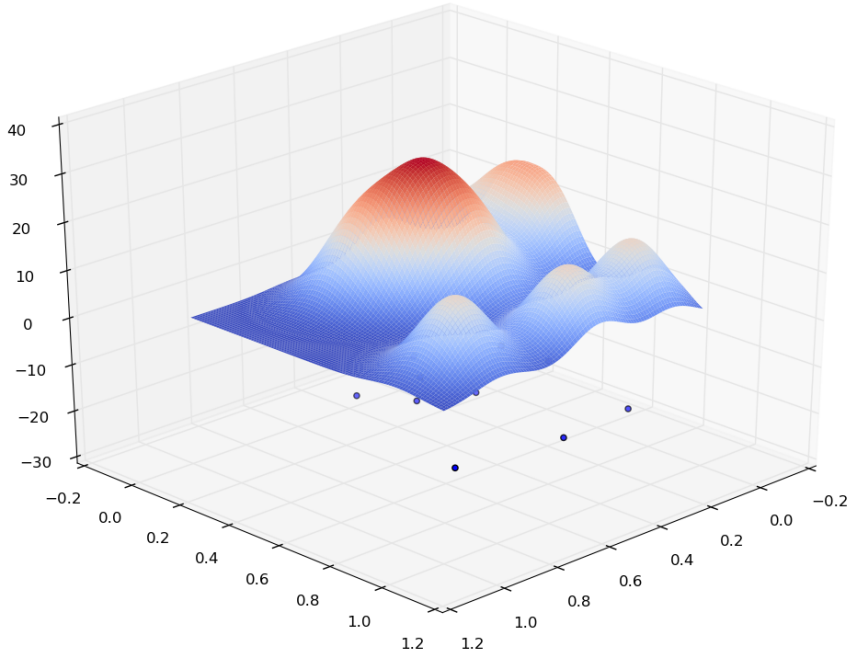
$h^2 = 0,01$



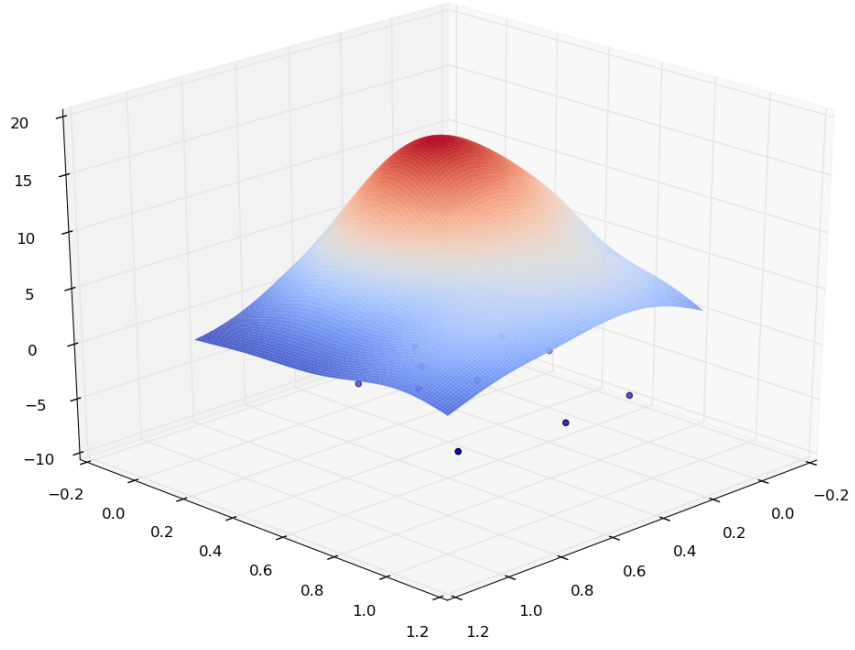
$h^2 = 0,05$

Estimation par noyaux : exemple bidimensionnel (2)

- $N = 10$ observations dans $\mathbb{R}^2$, noyau gaussien de variance indiquée



$h^2 = 0,1$



$h^2 = 0,2$

- Choix du paramètre h (via σ pour le noyau gaussien ci-dessus) : voir [1, 3]

Plan du cours

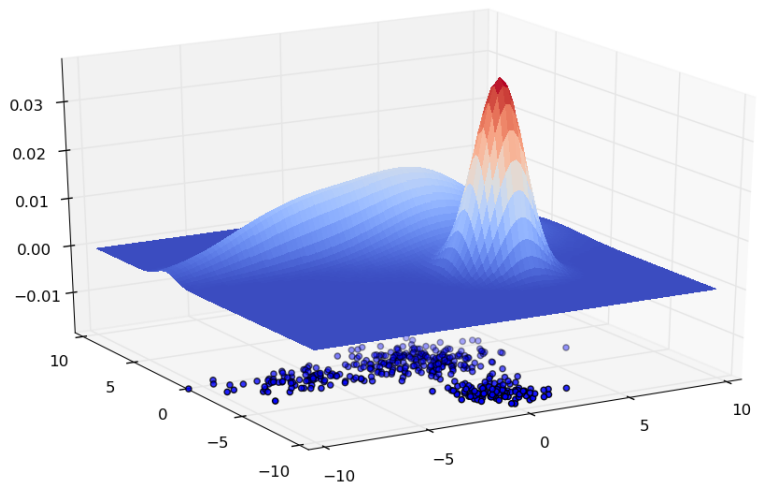
De l'estimation non paramétrique à l'estimation paramétrique

- N très grand $\Rightarrow$ le calcul de $\hat{f}_h(\mathbf{x})$ devient très coûteux
  - $\rightarrow$ Utilisation d'index spatiaux pour réduire la complexité, par ex. *KD tree* ou *Ball tree* dans `Scikit-learn`
- Et si, plutôt que d'ajouter un noyau pour chaque $\mathbf{x}_i \in \mathcal{D}_N$, on se servait plutôt de $\mathcal{D}_N$ pour trouver les bons paramètres d'une densité appartenant à une famille paramétrique ? Par exemple, celle des lois normales multidimensionnelles
- Si une seule loi explique mal les données, envisager alors un mélange additif de plusieurs lois de la même famille
  - $\rightarrow$ Peu de lois, chacune estimée à partir de plusieurs données de $\mathcal{D}_N$, plutôt que grand nombre de lois issue chacune d'une seule donnée (estimation par noyaux)
- Si le choix de la famille paramétrique est bien fondé, il est possible d'obtenir ainsi de meilleurs résultats avec moins de données

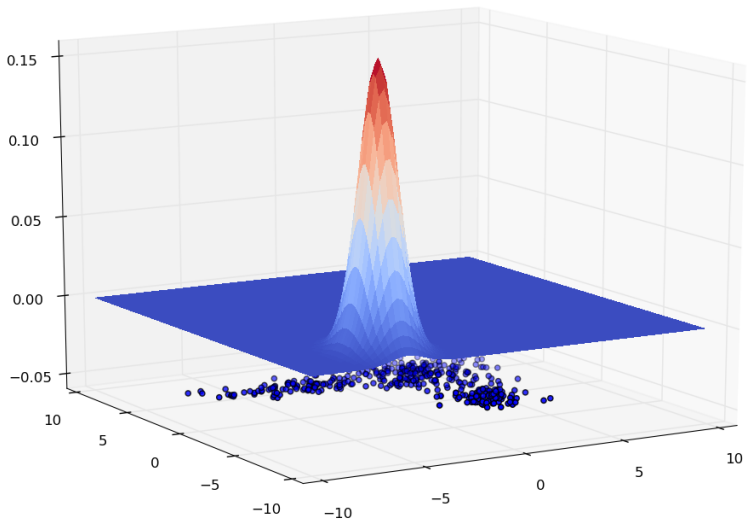
Estimation paramétrique

- On cherche la densité dans une famille $\mathcal{F}$ paramétrée par un vecteur de paramètres $\theta \in \Omega$ (on indique cela en écrivant f_θ au lieu de f)
- Étant donné $\mathcal{D}_N$, comment trouver le « bon » vecteur de paramètres ?
- Un vecteur θ engendre une densité f_θ qui « explique » plus ou moins bien les observations $\mathcal{D}_N$:

Données bien expliquées



Données mal expliquées



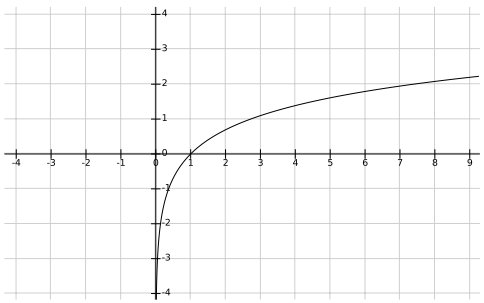
Estimation paramétrique (2)

- Une densité f_θ qui « explique » plus ou moins bien les observations $\mathcal{D}_N$, tel qu'indiqué par

$$p(\mathcal{D}_N|\theta) = \prod_{i=1}^{N} f_\theta(\mathbf{x}_i)$$

- Comme fonction de θ, $p(\mathcal{D}_N|\theta)$ est la vraisemblance (*likelihood*) de θ par rapport à l'échantillon $\mathcal{D}_N$
- On préfère en général travailler avec le logarithme de la vraisemblance (*log-likelihood*)

$$L(\theta) \equiv \ln\left[p(\mathcal{D}_N|\theta)\right] = \sum_{i=1}^{N} \ln\left[f_\theta(\mathbf{x}_i)\right]$$

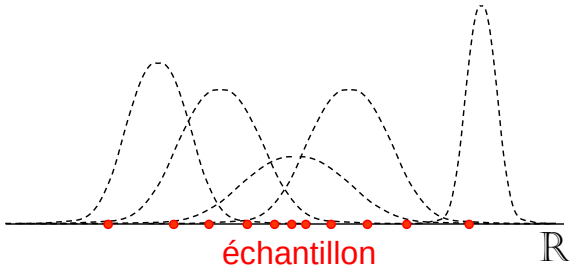


← $\ln$: fonction strictement croissante

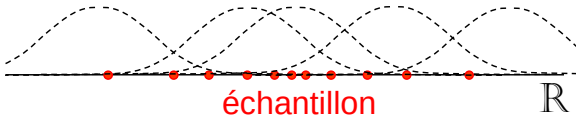
Cas simple : loi normale unidimensionnelle

- Considérons des données unidimensionnelles, $\mathcal{D}_N \subset \mathbb{R}$ $(d = 1)$
- Famille paramétrée : les lois normales $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$, donc $\theta = \begin{bmatrix} \mu \\ \sigma \end{bmatrix}$

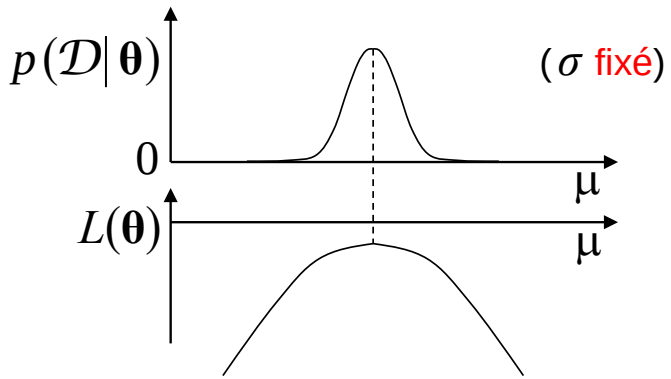
Quelques densités candidates :



Avec σ fixé :



- Variation de la vraisemblance et de la log-vraisemblance pour σ fixé :



Maximum de vraisemblance

- L'estimation $\hat{\theta}$ la plus en accord avec les observations $\mathcal{D}_N$ est celle qui correspond au maximum de la vraisemblance $p(\mathcal{D}_N|\theta)$
  - Logarithme en base e est monotone croissant $\Rightarrow$ maximum de la vraisemblance est atteint pour le même $\hat{\theta}$ que le maximum de la log-vraisemblance $l(\theta)$
- Pour le cas normal unidimensionnel considéré, $f_\theta(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}$ donc :

$$\ln\left[p(\mathcal{D}_N|\theta)\right] = \sum_{i=1}^{N} \ln\left[f_\theta(x_i)\right] = \sum_{i=1}^{N} \left[-\ln(\sigma\sqrt{2\pi}) - \frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu)^2\right]$$

- En dérivant par rapport à μ et respectivement σ on obtient

$$\frac{\partial \ln\left[p(\mathcal{D}_N|\theta)\right]}{\partial \mu} = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)$$

$$\frac{\partial \ln\left[p(\mathcal{D}_N|\theta)\right]}{\partial \sigma} = -\frac{N}{\sigma} + \frac{1}{\sigma^3}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2$$

Maximum de vraisemblance (2)

- Les dérivées partielles

$$\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu) \quad \text{et} \quad -\frac{N}{\sigma}+\frac{1}{\sigma^3}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2$$

s'annulent pour

$\hat{\mu}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i$ = moyenne empirique des observations

$\hat{\sigma}^2=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\hat{\mu})^2$ = variance empirique biaisée

et on peut vérifier que cette solution correspond bien à un maximum de $\ln\left[p(\mathcal{D}_N|\theta)\right]$

- Remarques :
  - L'estimation $\hat{\mu}$ est sans biais (son espérance sur les échantillons de taille N est égale à la vraie valeur de μ)
  - L'estimation $\hat{\sigma}^2$ est en revanche biaisée (mais asymptotiquement sans biais, $\lim_{N\to\infty} E\left(\hat{\sigma}^2\right)$ est la vraie valeur de σ) ; une estimation sans biais est

$$\hat{\sigma}^2=\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\hat{\mu})^2$$

Cas simple : loi normale multidimensionnelle

- Considérons des données multidimensionnelles, $\mathcal{D}_N \subset \mathbb{R}^d$ $(d > 1)$
- Famille paramétrée : les lois normales $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$

$$f_\theta(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^t \Sigma^{-1} (\mathbf{x}-\mu)}$$

- Ici, le vecteur de paramètres θ regroupe à la fois les composantes de l'espérance multidimensionnelle μ et de la matrice de variance-covariance Σ
- La solution qui maximise la vraisemblance est

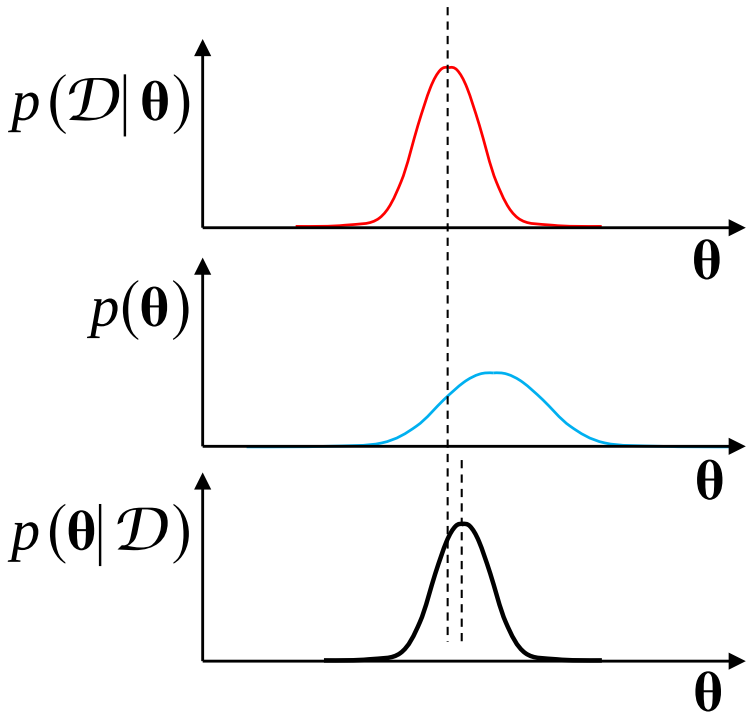
$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \quad \text{et} \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{x}_i - \hat{\mu})(\mathbf{x}_i - \hat{\mu})^t$$

  - Ici encore, l'estimation $\hat{\Sigma}$ est biaisée et une estimation sans biais est

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{x}_i - \hat{\mu})(\mathbf{x}_i - \hat{\mu})^t$$

Maximum *a posteriori*

- La solution qui maximise la vraisemblance est la plus en accord avec les (seules) données de $\mathcal{D}_N$
- Et si on dispose de connaissances *a priori* nous incitant à privilégier certains modèles (certaines valeurs des paramètres) par rapport à d'autres ?
- Connaissances $\rightarrow$ densité *a priori* $p(\theta) \rightarrow$ plutôt maximiser la probabilité *a posteriori* $p(\theta|\mathcal{D}_N) \propto p(\mathcal{D}_N|\theta)p(\theta)$



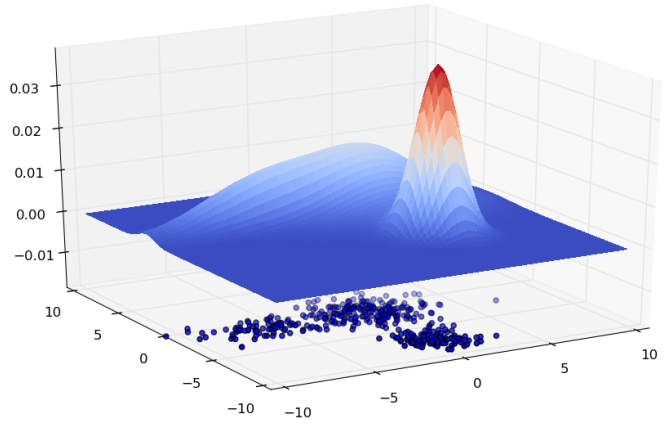
Modèles de mélange

- Une seule loi explique mal les données $\Rightarrow$ mélange additif de plusieurs lois de la même famille

$$f_{\alpha,\theta}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j f_j(\mathbf{x}|\theta_j)$$

avec

- m : nombre de composantes (lois individuelles) du mélange
- $f_j(\mathbf{x}|\theta_j)$: densité qui définit une composante, appartient à la famille paramétrée par θ_j
- α_j : coefficients de mélange tels que $\sum_{j=1}^{m} \alpha_j = 1$ (condition de normalisation)
- α : représentation vectorielle des m coefficients de mélange (pondérations des lois)
- θ : vecteur qui regroupe tous les θ_j



Modèles de mélange : estimation MV

- On cherche à trouver les paramètres $(\hat{\alpha}, \hat{\theta})$ qui maximisent la vraisemblance (MV) des observations de $\mathcal{D}_N$

$$p(\mathcal{D}_N|\alpha, \theta) = \prod_{i=1}^{N} f_{\alpha,\theta}(\mathbf{x}_i)$$

- En écrivant $f_{\alpha,\theta}(\mathbf{x}_i)$ comme un mélange additif, on obtient l'expression de la vraisemblance à maximiser

$$\ln p(\mathcal{D}_N|\alpha, \theta) = \sum_{i=1}^{N} \ln \left[\sum_{j=1}^{m} \alpha_j f_j(\mathbf{x}_i|\theta_j) \right] \quad (1)$$

sous la contrainte de normalisation $\sum_{j=1}^{m} \alpha_j = 1$

- Somme sous le logarithme $\Rightarrow$ pas de solution analytique à ce problème de maximisation $\Rightarrow$ méthodes d'optimisation itérative pour déterminer $(\hat{\alpha}, \hat{\theta})$

Mélange gaussien : estimation MV

- Pour un mélange additif gaussien, chaque composante est une loi normale :

$$f_j(\mathbf{x}|\theta_j) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} |\Sigma_j|^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu_\mathbf{j})^t \Sigma_j^{-1}(\mathbf{x}-\mu_\mathbf{j})} \tag{2}$$

  et donc la log-vraisemblance $L(\alpha, \theta)$ devient

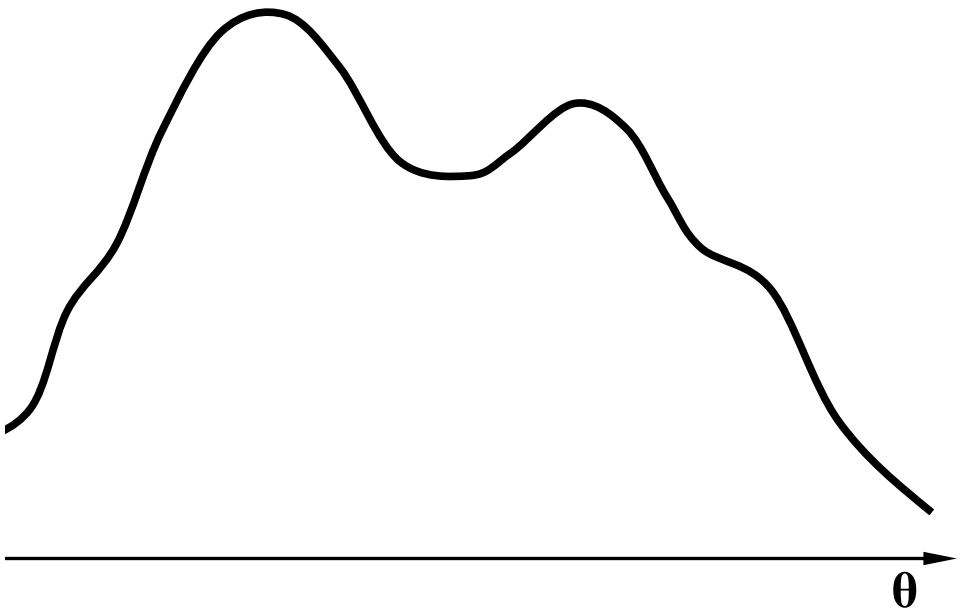
$$\ln p(\mathcal{D}_N|\alpha, \theta) = -\frac{Nd}{2}\ln(2\pi) + \sum_{i=1}^{N} \ln \left[\sum_{j=1}^{m} \alpha_j |\Sigma_j|^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_i-\mu_\mathbf{j})^t \Sigma_j^{-1}(\mathbf{x}_i-\mu_\mathbf{j})} \right] \tag{3}$$

  → recherche de maxima : absence de solution analytique
  → présence de maxima locaux

- Idée de l'algorithme EM :
  - Déterminer une approximation locale $I(\alpha, \theta)$ de $L(\alpha, \theta)$ qui minore $L(\alpha, \theta)$ et peut être maximisée analytiquement
  - Calculer $\hat{\alpha}_t, \hat{\theta}_t$ qui maximisent cette approximation locale
  - Itérer jusqu'à convergence

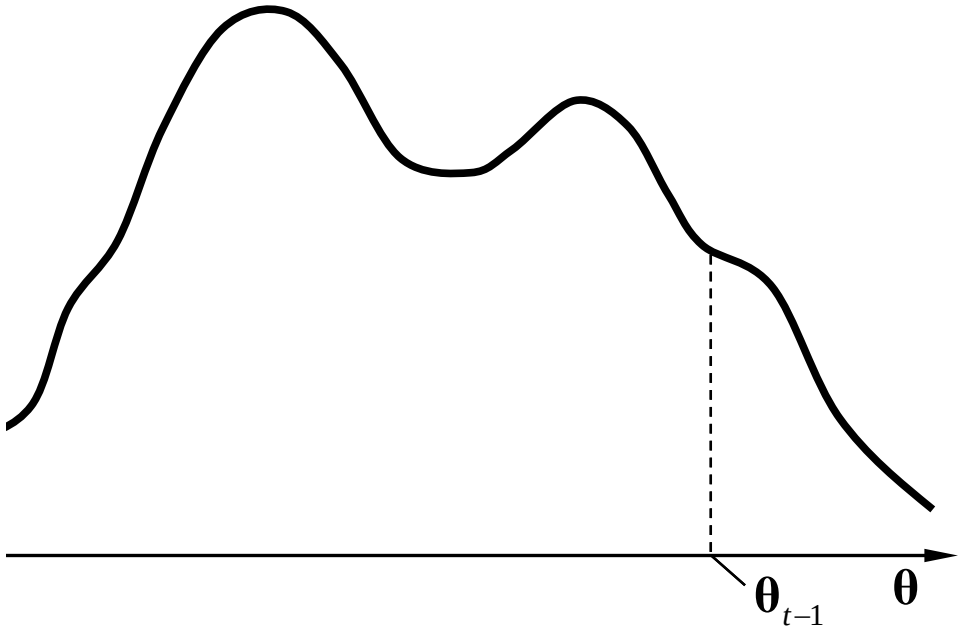
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



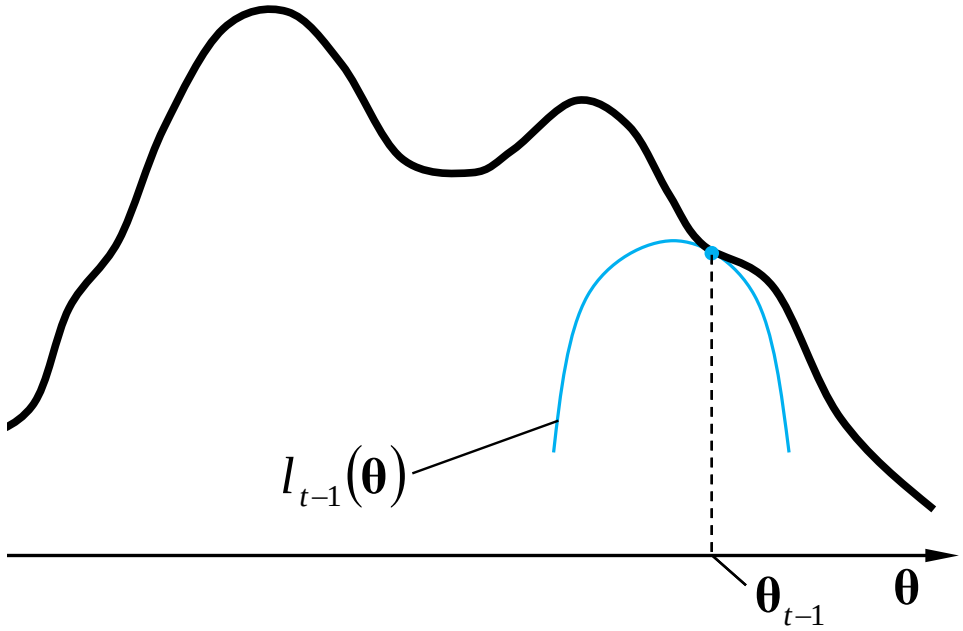
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



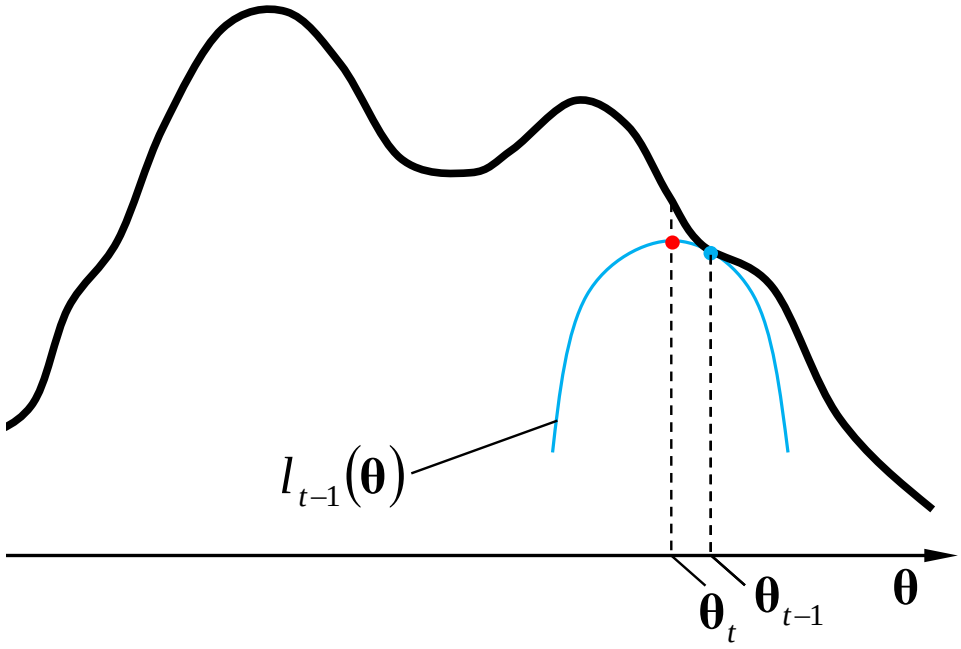
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



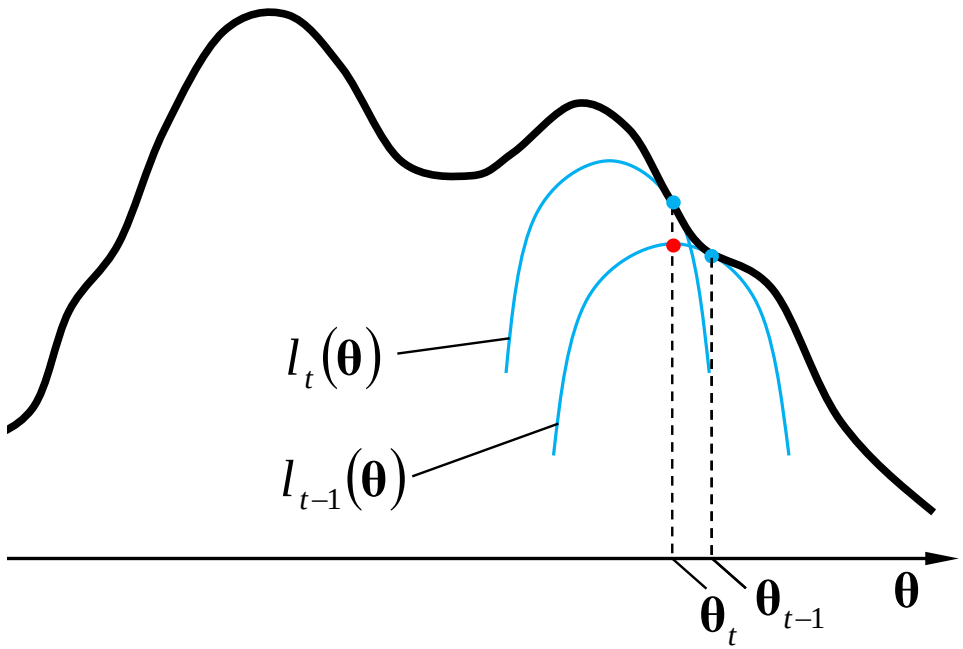
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



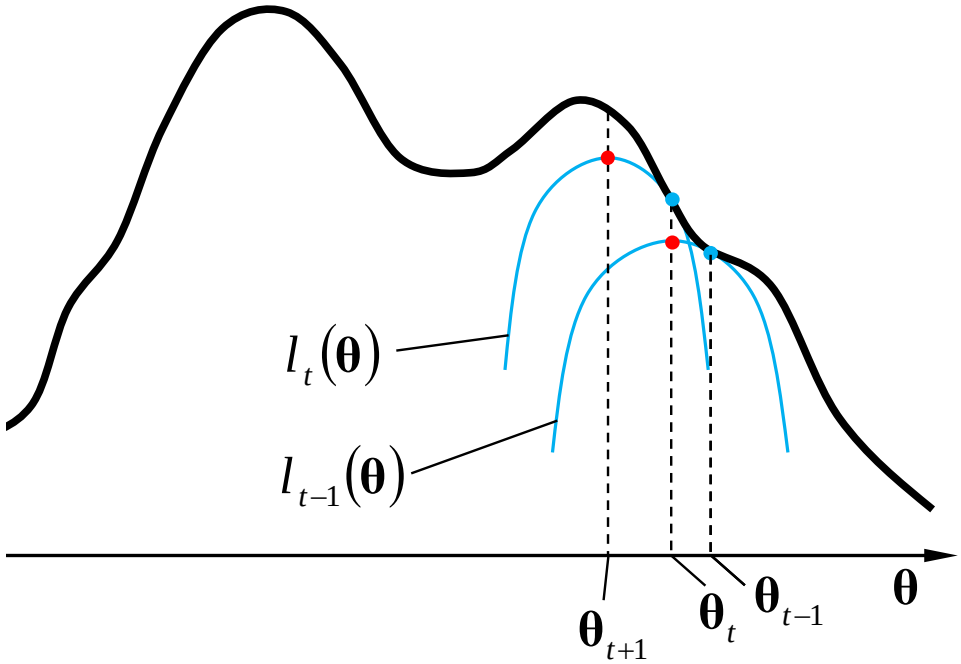
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



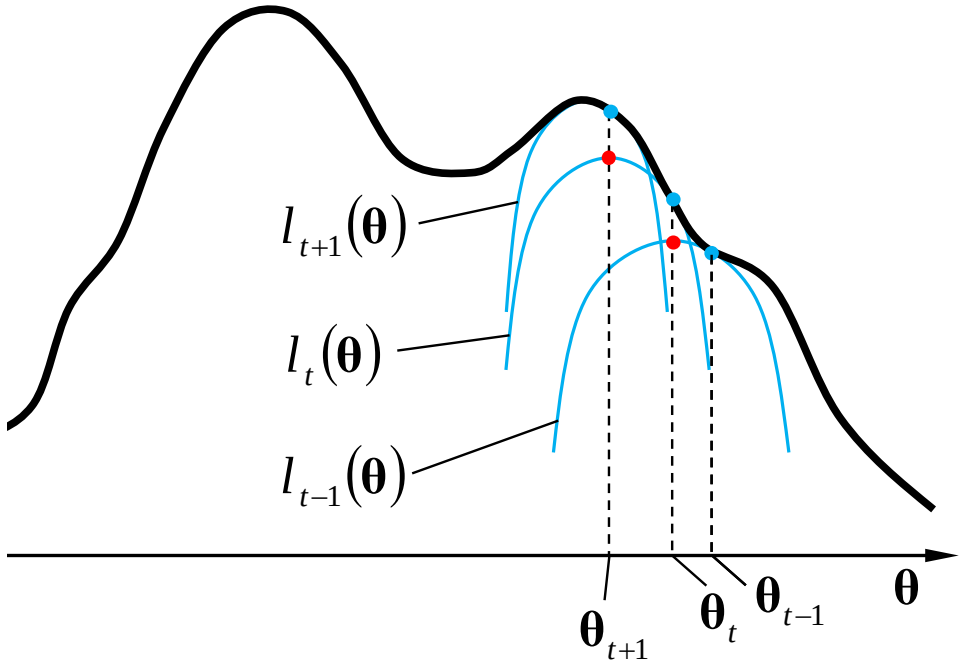
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



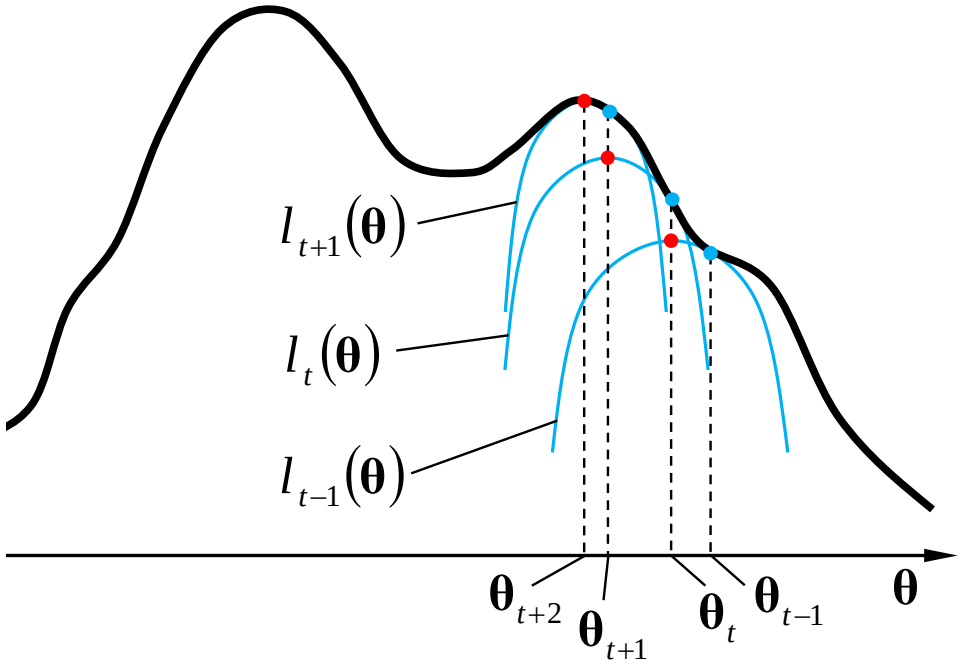
Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



Principe de l'algorithme EM

- Initialiser les paramètres (réduits ici à θ pour éviter de surcharger l'illustration)
- Itérer jusqu'à la convergence
  1. Étape E : avec les paramètres actuels, calculer l'approximation locale tangente qui minore la fonction à maximiser
  2. Étape M : trouver les paramètres qui maximisent l'approximation locale, en faire les nouveaux paramètres actuels



Espérance-Maximisation (EM)

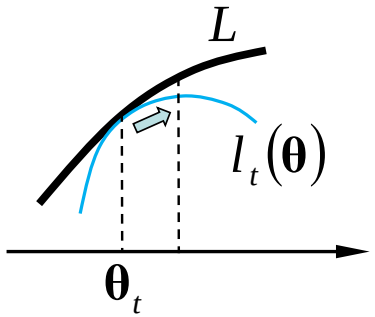
- Algorithme introduit dans [2] ; de nombreuses présentations alternatives existent, voir par ex. celle de https ://arxiv.org/abs/1105.1476v2
- On considère des données $\mathcal{D} = \{\mathcal{D}_o, \mathcal{D}_m\}$ où
  - $\mathcal{D}_o$ sont des données observées, de réalisations notées $\mathbf{x}$, issues d'une densité de probabilité $f_\theta \in \mathcal{F}$, inconnue et paramétrée par $\theta \in \Omega$
  - $\mathcal{D}_m$ sont des données manquantes, de réalisations notées $\mathbf{y}$, issues d'une densité de probabilité g (inconnue)

$\rightarrow$ On cherche le paramètre $\hat{\theta}^*$ qui maximise la log-vraisemblance $\ln p(\mathcal{D}_o|\theta)$ (notée dans la suite de façon simplifiée par $L(\mathbf{x};\theta)$)

- $\ln p(\mathcal{D}_o|\theta)$: log-vraisemblance des données incomplètes
- $\ln p(\mathcal{D}_o, \mathcal{D}_m|\theta)$: log-vraisemblance des données complètes ($L((\mathbf{x},\mathbf{y});\theta)$ dans la suite)

Espérance-Maximisation (2)

- Pour tout vecteur de paramètres fixé θ_t, trouver $l_t(\theta)$ une approximation locale de $L(\mathbf{x};\theta)$ telle que
  1. $L(\mathbf{x};\theta) - L(\mathbf{x};\theta_t) \geq l_t(\theta) - l_t(\theta_t)$
  2. $L(\mathbf{x};\theta_t) = l_t(\theta_t)$
- Maximiser (ou simplement augmenter) $l_t(\theta)$ permettra alors de s'approcher du maximum de $L(\mathbf{x};\theta)$:



1. Nous pouvons écrire

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{x};\theta) &= \ln p(\mathbf{x}|\theta) && \text{(notation simplifiée de } \ln p(\mathcal{D}_o|\theta)) \\
&= \ln \int p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\,dy && \text{(marginalisation de } p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)) \\
&= \ln \int p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\,\tfrac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}\,dy && \text{(multiplication par } 1 = \tfrac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}) \\
&= \ln \int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)\,\tfrac{p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}\,dy && \text{(échange entre } p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \text{ et } p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)) \\
&\geq \underbrace{\int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln \frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)}\,dy}_{\equiv\, l_t(\theta)} && \text{(par l'inégalité de Jensen)}
\end{aligned}
$$

(y discret $\Rightarrow$ somme plutôt qu'intégrale, l'inégalité fait passer le log sous la somme !)

Espérance-Maximisation (3)

2. Également, avec cette définition pour $l_t(\theta)$, nous avons

$$\begin{aligned} l_t(\theta_t) &= \int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln \frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta_t)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)} dy \\ &= \int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln p(\mathbf{x}|\theta_t) dy \qquad (\text{car } p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta_t) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)p(\mathbf{x}|\theta_t)) \\ &= \ln p(\mathbf{x}|\theta_t) \qquad (\text{car } \int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)dy = 1) \\ &= L(\mathbf{x};\theta_t) \end{aligned}$$

- L'algorithme EM résultant sera donc :
  1. Initialiser les paramètres θ_0
  2. Itérer jusqu'à la convergence
     1. Étape E : calculer $l_t(\theta) \leq L(\mathbf{x};\theta)$, égalité pour $\theta = \theta_t$
     2. Étape M : trouver θ_{t+1} qui maximise $l_t(\theta)$
- Utilisations de EM :
  - Modélisation à partir de données incomplètes (par ex. difficultés d'observation)
  - Introduction artificielle de variable(s) à valeurs manquantes pour faciliter la maximisation de la vraisemblance (variable(s) définie(s) t.q. maximisation des $l_t(\theta)$ successives plus facile que maximisation directe de $L(\mathbf{x};\theta)$)

Espérance-Maximisation (4)

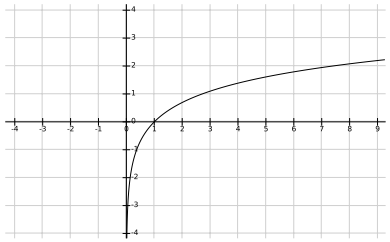
- Pourquoi le nom « Espérance » (*Expectation*) pour l'étape E ?
- Nous pouvons développer $l_t(\theta)$:

$$\begin{aligned} l_t(\theta) &= \int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln \frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)}{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)} dy \\ &= \underbrace{\int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta) dy}_{= Q(\theta|\theta_t)} - \underbrace{\int p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) \ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t) dy}_{= \text{constant (non dépendant de } \theta)} \end{aligned}$$

- $Q(\theta|\theta_t)$ est l'espérance conditionnelle de la log-vraisemblance des données complètes ($L((\mathbf{x},\mathbf{y});\theta)$ calculée pour des données manquantes qui suivent leur densité *a posteriori* $p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\theta_t)$)
- La différence entre $l_t(\theta)$ et $Q(\theta|\theta_t)$ ne dépendant pas de θ, la maximisation d'une des fonctions est équivalente à la maximisation de l'autre

L'inégalité de Jensen

- Si $\phi : \mathcal{A} \in \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est une fonction convexe et X une variable aléatoire à valeurs dans $\mathcal{A}$, alors
$$\phi\left(E[X]\right) \leq E\left[\phi(X)\right]$$
- Pour une densité de probabilité : soit g une fonction à valeurs réelles, ϕ convexe sur le co-domaine de g et f une densité de probabilité, alors
$$\phi\left(\int g(x)f(x)dx\right) \leq \int \phi\left(g(x)\right)f(x)dx$$
- Cas d'un échantillon (fini) : soit $\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = 1$, alors
$$\phi\left(\sum_{i=1}^{N} \lambda_i g(x)\right) \leq \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \phi\left(g(x)\right)$$
- Si ϕ est concave, comme $\ln$ (voir figure), alors le sens des inégalités est inversé



EM pour modèle de mélange

- Introduction de variables aléatoires non observées $\{Y_i\}_{i=1}^N$ à valeurs $y_i \in \{1, \ldots, m\}$, telles que $y_i = j \Leftrightarrow$ l'observation $\mathbf{x}_i$ a été générée par la composante j du mélange
- Pour maximiser $\ln p(\mathcal{D}_o|\alpha, \theta)$, la log-vraisemblance des données incomplètes, le vecteur de paramètres à trouver est $\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\theta} \end{pmatrix}$
- Les variables $\{Y_i\}$ prenant des valeurs discrètes, l'expression de $Q(\theta|\theta_t)$ devient

$$\begin{aligned} Q(\alpha, \theta|\alpha_t, \theta_t) &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^m P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) \ln p(\mathbf{x}_i, y_i = k|\alpha, \theta) \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^m P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) \ln [p(\mathbf{x}_i|y_i = k, \theta_k) P(y_i = k|\alpha, \theta)] \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^m P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) \ln [P(y_i = k|\alpha, \theta) f_k(\mathbf{x}_i|\theta_k)] \end{aligned}$$

en vertu de la définition des données non observées (manquantes) ; ici f_k est la densité de la k-ème composante du mélange (de paramètres θ_k)

→ Il n'y a plus de somme sous le logarithme, la maximisation de $Q(\alpha, \theta|\alpha_t, \theta_t)$ admet donc une solution analytique, contrairement à celle de la log-vraisemblance des données incomplètes, expression (1)

EM pour mélange gaussien

- La distribution $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ est obtenue par normalisation

$$P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) = \frac{\alpha_{kt} f_k(\mathbf{x}_i|\theta_{kt})}{\sum_{j=1}^{m} \alpha_{jt} f_j(\mathbf{x}_i|\theta_{jt})}$$

  $f_k(\mathbf{x}_i|\theta_{kt})$ étant la densité de la composante k avec les paramètres de l'itération t
- $Q(\alpha, \theta|\alpha_t, \theta_t)$ devient donc :

$$\begin{aligned} Q(\alpha, \theta|\alpha_t, \theta_t) &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) \ln \left[\alpha_k f_k(\mathbf{x}_i|\theta_k)\right] \\ &= \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t) \ln \alpha_k}_{= \text{constant (non dépendant de } \alpha, \theta)} + \\ &\quad + \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} \frac{\alpha_{kt} f_k(\mathbf{x}_i|\theta_{kt})}{\sum_{j=1}^{m} \alpha_{kt} f_j(\mathbf{x}_i|\theta_{kt})} \ln f_k(\mathbf{x}_i|\theta_k) \end{aligned}$$

- La maximisation s'intéresse au second terme qui, tenant compte de (2), devient

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{m} \frac{\alpha_{kt} f_k(\mathbf{x}_i|\mu_{kt}, \Sigma_{kt})}{\sum_{j=1}^{m} \alpha_{jt} f_j(\mathbf{x}_i|\mu_{jt}, \Sigma_{jt})} \left[-\frac{d}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\Sigma_j| - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_\mathbf{k})^t \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \mu_\mathbf{k})\right]$$

EM pour mélange gaussien (2)

- Nous obtenons *in fine* les relations de mise à jour suivantes :

$$P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t) = \frac{\alpha_k f_k(\mathbf{x}_i|\mu_{kt}, \Sigma_{kt})}{\sum_{j=1}^{m} \alpha_j f_j(\mathbf{x}_i|\mu_{jt}, \Sigma_{jt})} \tag{4}$$

$$\alpha_{k,t+1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t) \tag{5}$$

$$\mu_{k,t+1} = \frac{\sum_{i=1}^{N} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t)\mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^{N} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t)} \tag{6}$$

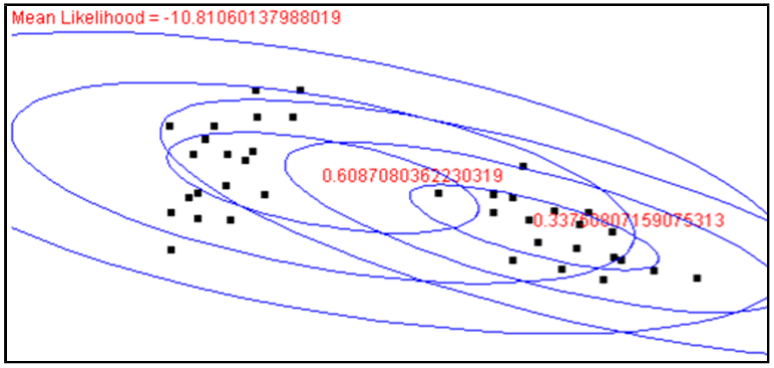
$$\Sigma_{k,t+1} = \frac{\sum_{i=1}^{N} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t)(\mathbf{x}_i - \mu_{k,t+1})(\mathbf{x}_i - \mu_{k,t+1})^t}{\sum_{i=1}^{N} P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \mu_t, \Sigma_t)} \tag{7}$$

- On peut placer (4) dans l'étape E et (5), (6), (7) dans l'étape M

EM pour mélange gaussien : illustration

- Au départ composantes peu spécialisées
- Valeurs $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ équilibrées

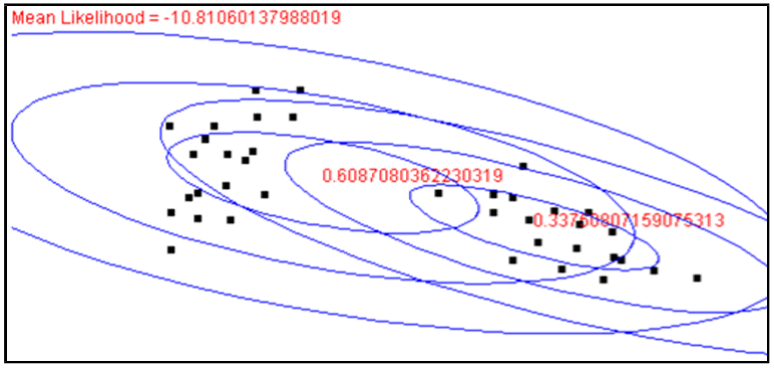
$\rightarrow$ Après 1 itération :



EM pour mélange gaussien : illustration

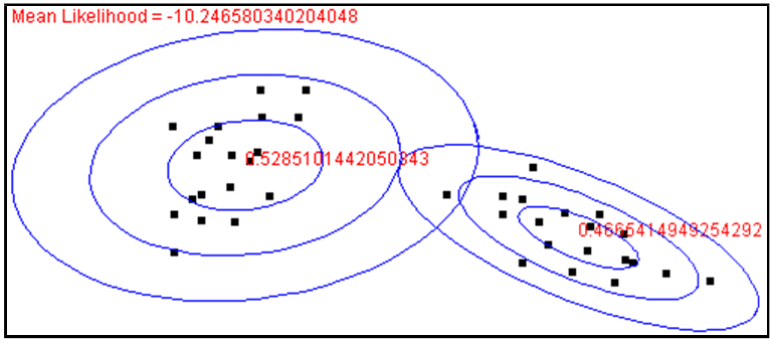
- Au départ composantes peu spécialisées
- Valeurs $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ équilibrées

→ Après 1 itération :



- Spécialisation progressive
- Les $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ se différencient
- Paramètres calculés à partir des données mieux expliquées

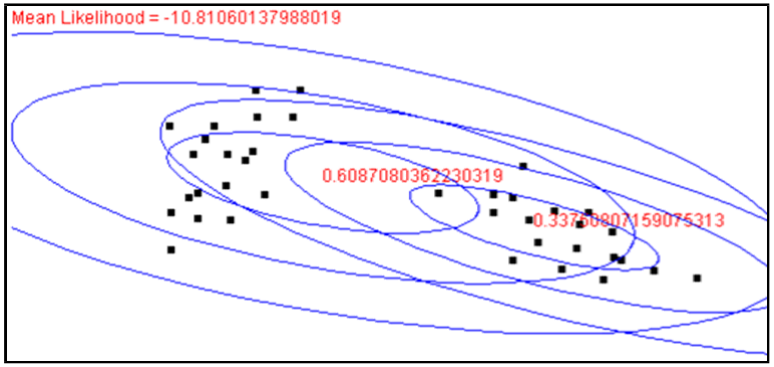
→ Après 4 itérations :



EM pour mélange gaussien : illustration

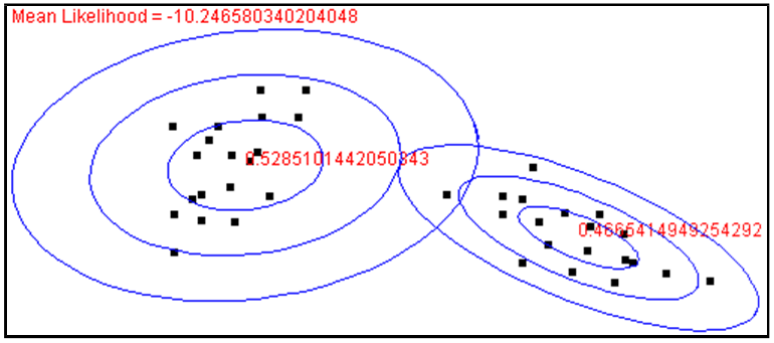
- Au départ composantes peu spécialisées
- Valeurs $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ équilibrées

→ Après 1 itération :



- Spécialisation progressive
- Les $P(y_i = k|\mathbf{x}_i, \alpha_t, \theta_t)$ se différencient
- Paramètres calculés à partir des données mieux expliquées

→ Après 4 itérations :



- Spécialisation complète
- Paramètres calculés à partir des données expliquées

→ Après ≥ 5 itérations :

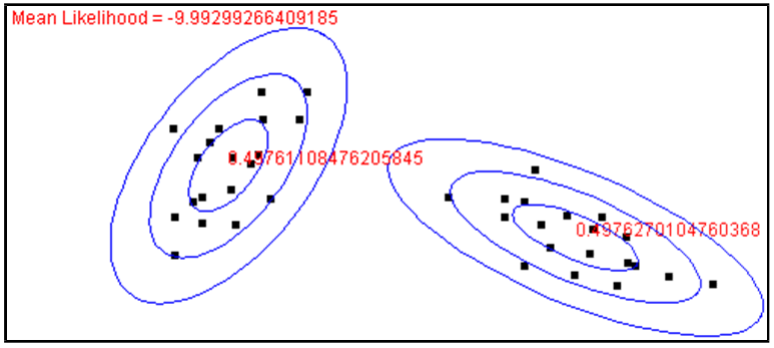
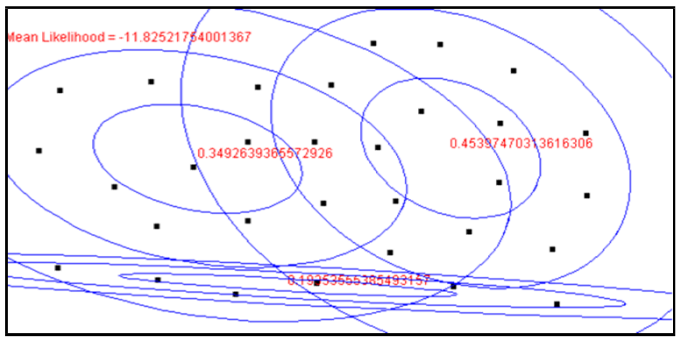
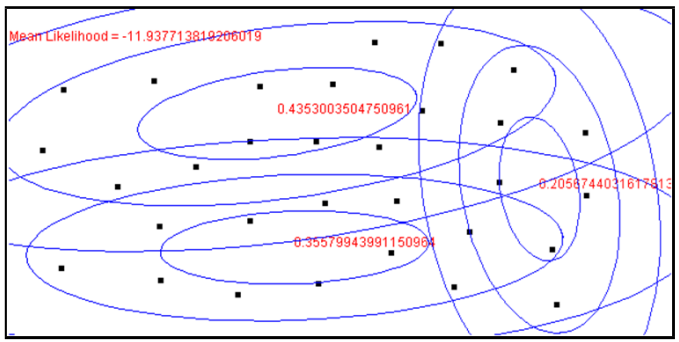
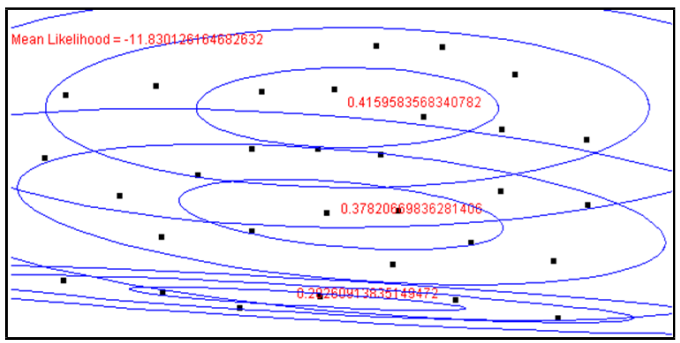


Illustration : données non structurées

- Résultats obtenus avec des initialisations différentes de l'algorithme EM pour des données issues d'une distribution uniforme :



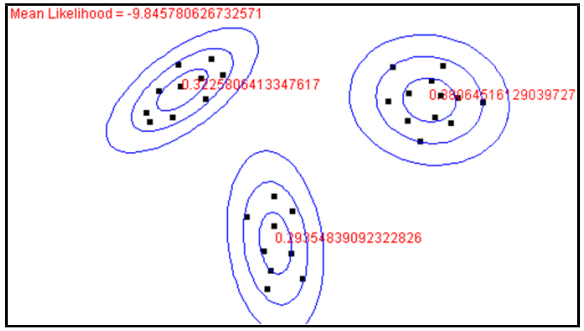




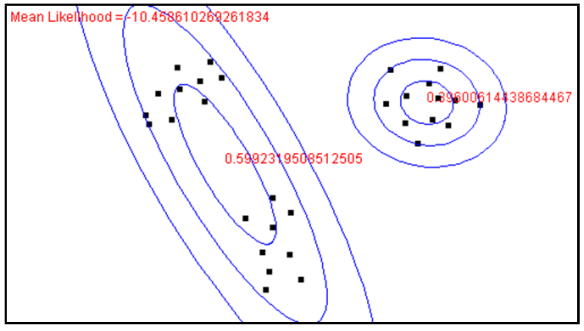
→ lorsque les données ne respectent pas les hypothèses, les résultats présentent une grande variabilité et ne sont pas pertinents

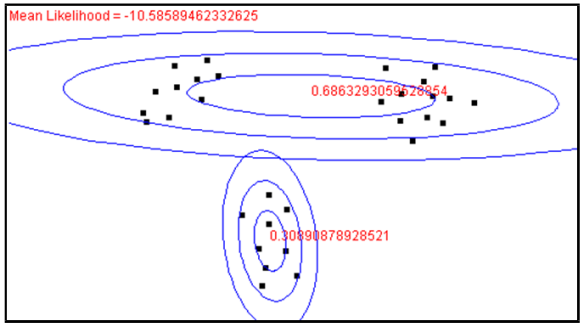
Illustration : nombre variable de composantes

Avec 3 composantes :

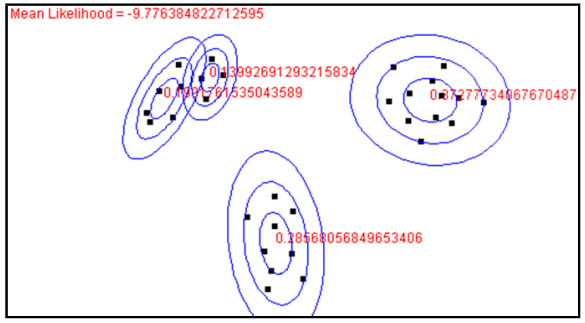


Avec 2 composantes :





Avec 4 composantes :



Sélection de modèle en estimation de densités

- Complexité du modèle de mélange :
  - Nombre de composantes : chaque nouvelle composante ajoute comme paramètres son coefficient de mélange et les coefficients qui définissent sa densité
  - Augmentation du nombre de paramètres lors des passages : matrice covariances identité (« sphérique ») $\rightarrow$ diagonale $\rightarrow$ quelconque
- Augmentation du nombre de paramètres $\rightarrow$ en général, augmentation de la valeur maximale que peut atteindre la log-vraisemblance, $\ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta}) \Rightarrow$ la log-vraisemblance seule ne peut servir de critère de choix de la complexité !
- Types de méthodes (voir [4]) :
  - Tests d'hypothèses : inspirés par LRTS (*likelihood ratio test statistic*) pour m composantes vs. $m+1$ composantes
  - Critères « d'information » : ajout de pénalités (qui augmentent avec le nombre de paramètres libres) à la $-$log-vraisemblance
  - Critères de classification : évaluer la capacité du mélange à produire des groupes (1 groupe $=$ données mieux expliquées par une des composantes) bien séparés
  - Autres méthodes : validation croisée, critères graphiques, etc.

Critère d'information d'Akaike

- Ce critère, introduit par Akaike en 1971, ajoute une pénalité qui dépend uniquement, et de façon linéaire, du nombre de paramètres libres :

$$\mathrm{AIC} = -2 \ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta}) + 2k \tag{8}$$

  k : nombre de paramètres libres à estimer ($k \geq 0$)

- Comparaison de modèles : préférer le modèle qui minimise AIC
  - k augmente $\rightarrow$ augmentation de $\ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta})$ $\rightarrow$ diminution de $-2 \ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta})$
  - Ajout de $2k$ $\rightarrow$ pénalité croissant avec k
- Idée du critère : lorsque k diminue, le biais du modèle augmente (terme $-\ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta})$) ; lorsque k augmente, la variance du modèle augmente (terme k) $\Rightarrow$ additionner les deux pour trouver le meilleur compromis entre biais et variance

Critère d'information bayésien

- Ce critère, introduit par Schwartz en 1978 sur des considérations bayésiennes, tient compte également du nombre d'observations

$$\mathrm{BIC} = -2 \ln p(\mathcal{D}_o|\hat{\theta}) + k \ln N \tag{9}$$

  k : nombre de paramètres libres à estimer ($k \geq 0$)
  N : nombre d'observations ($N \gg k$) ; la pénalité augmente avec le (logarithme du) nombre d'observations !

- Des définitions résulte que la pénalité BIC est plus forte que la pénalité AIC dès que $N \geq 8$ ($\ln N > 2$)
- Idée du critère : maximiser la probabilité *a posteriori* du modèle, en considérant une distribution *a priori* non informative sur les modèles et sur les paramètres de chaque modèle

BIC ou AIC ?

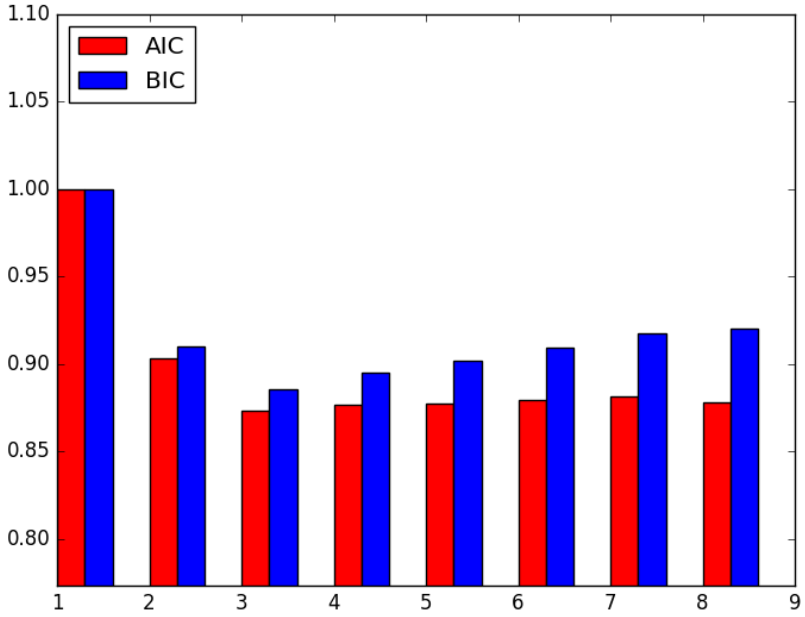


FIG. – AIC et BIC en fonction du nombre de composantes pour un ensemble $\mathcal{D}_o$

- La pénalité BIC augmente plus vite que la pénalité AIC $\Rightarrow$ modèles en général plus simples (k plus faible) avec BIC (mais pas dans l'exemple ci-dessus)

Paramétrique ou non paramétrique ?

- Avantages des méthodes paramétriques :
  - Si les hypothèses sont valides, bonne estimation avec des échantillons de taille comparativement faible
  - Après construction du modèle, faible coût de l'estimation de la densité en un point précis
- Avantages des méthodes non paramétriques :
  - Généralité due à l'absence d'hypothèses sur le nombre et les types de lois
  - Convergence garantie vers la vraie densité... si l'échantillon est suffisant !
  - Paramètre unique... mais difficile à choisir

Références I

C. Archambeau, M. Valle, A. Assenza, and M. Verleysen.

Assessment of probability density estimation methods : Parzen window and finite gaussian mixtures.

In *ISCAS*. IEEE, 2006.

A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin.

Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm.

Journal of the Royal Statistical Society : Series B, 39 :1–38, 1977.

M. C. Jones, J. S. Marron, and S. J. Sheather.

A brief survey of bandwidth selection for density estimation.

Journal of the American Statistical Association, 91(433) :401–407, 1996.

A. Oliveira-Brochado and F. V. Martins.

Assessing the Number of Components in Mixture Models : a Review.

FEP Working Papers 194, Universidade do Porto, Faculdade de Economia do Porto, Nov. 2005.