ECN 7060, cours 13

William McCausland

2021-12-08

Plan (résultats asymptotique)

- Les résultats asymptotiques reposent sur des conditions de regularité.
- Illustration des violations de ces conditions.
- Théorie asymptotique des estimateurs MV.

Un modèle de mélange I

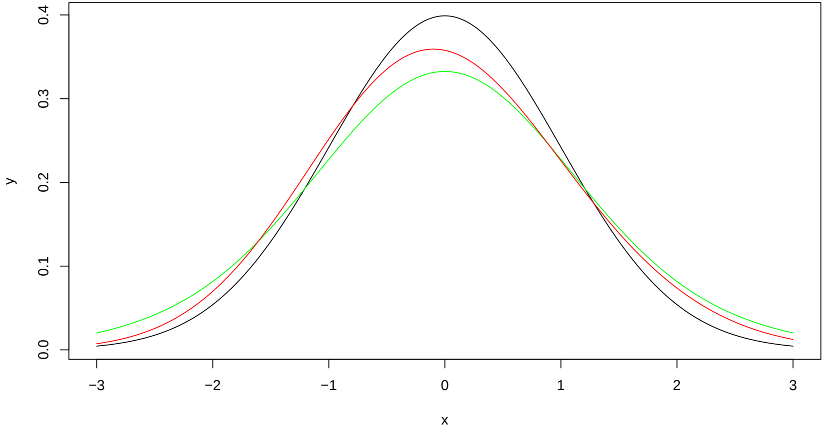
- Les X_i sont iid, chaque X_i un mélange de deux gaussiens

$$F(x_i|\theta) = p\Phi\left(\frac{x_i-\mu_1}{\sigma_1}\right) + (1-p)\Phi\left(\frac{x_i-\mu_2}{\sigma_2}\right)$$

- Le vecteur de paramètres est $\theta = (p, \mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2)$.
- Irregularité I : paramètres non-identifiés
  - (label switching)
    $$f(X|\theta) = f(X|\theta')$$
    où
    $$\theta' = (1-p, \mu_2, \mu_1, \sigma_2, \sigma_1)$$
  - (non-identification sous l'hypothèse $p = 1$)
    $$f(X|(1, \mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2))$$
    ne dépend pas de μ_2, σ_2.

Des mélanges de deux gaussiens

```
x = seq(-3, 3, by=0.001); y = dnorm(x, 0, 1)
y1 = 0.5 * dnorm(x, 0, 1) + 0.5 * dnorm(x, 0, 3/2)
y2 = 0.8 * dnorm(x, -1/4, 1) + 0.2 * dnorm(x, 1, 1)
plot(x, y, type='l'); lines(x, y1, col='green')
lines(x, y2, col='red')
```



La question d'identification (ponctuelle)

- Identification I : (où θ_0 est la vrai valeur)

$$\theta \neq \theta_0 \Rightarrow f(\cdot|\theta) \neq f(\cdot|\theta_0).$$

- Sinon, θ et θ_0 sont observationnellement équivalent.
- Identification II :

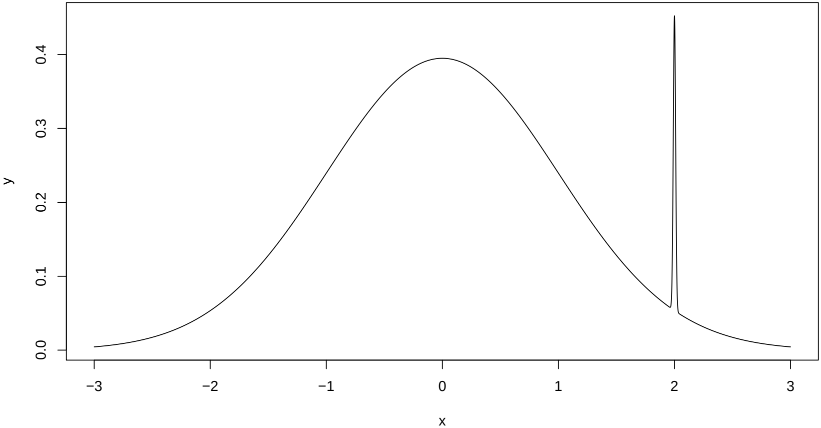
$$\theta_1 \neq \theta_2 \Rightarrow f(\cdot|\theta_1) \neq f(\cdot|\theta_2).$$

- La deuxième condition est plus forte. En pratique, elle est souvent la condition à vérifier, mais quelquefois l'identification (ou l'absense) est locale.

Un mélange extrême de deux gaussiens

- Ici, $p = 0.01$, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 2$, $\sigma_1 = 1$, $\sigma_2 = 0.01$.

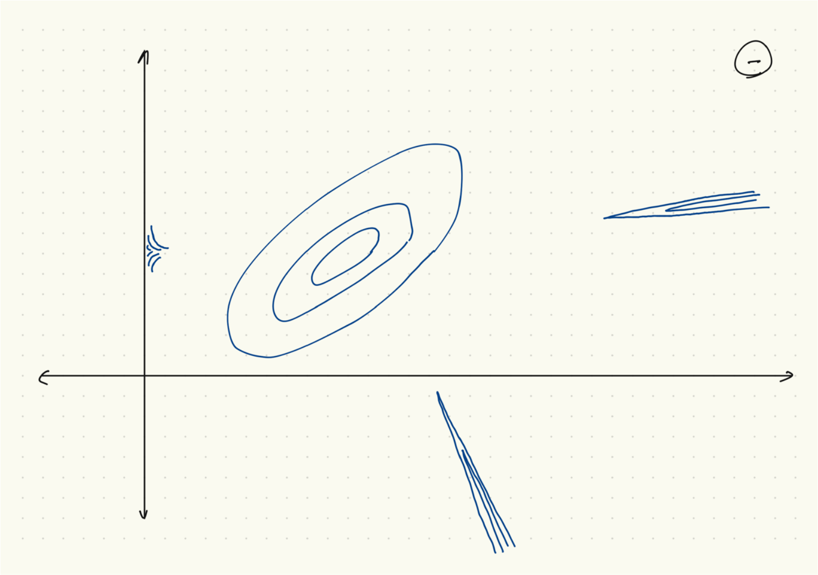
```
y = 0.01*dnorm(x, 2, 0.01) + 0.99*dnorm(x, 0, 1)
plot(x, y, type='l')
```



Un modèle de mélange II

- Rappel : $\theta = (p, \mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2)$
- Irregularité II : la vraisemblance n'est pas bornée
  - $x = (x_1, \ldots, x_n)$ est arbitraire. Soit $\bar{x} = n^{-1} \sum x_i$.
  - Soit $\theta(\epsilon) = (p, \mu_1, \mu_2, \sigma_1(\epsilon), \sigma_2) = (n^{-1}, x_1, \bar{x}, \epsilon, s)$.
  - $f(x_1|\theta(\epsilon)) = n^{-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} + (1 - n^{-1}) \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} e^{-(x_1 - \bar{x})/2s^2}$
  - $\lim_{\epsilon \downarrow 0} f(x_1|\theta(\epsilon)) = \infty$,
  - $\lim_{\epsilon \downarrow 0} f(x_2, \ldots, x_n|\theta(\epsilon)) \neq 0$,
  - alors $\lim_{\epsilon \downarrow 0} f(x|\theta(\epsilon)) = \infty$.
  - D'autres chemins où la vraisemblance croit sans borne
    - $p \in (0, 1)$ arbitraire
    - d'autres choix de μ_2, σ_2
    - échange d'index
- D'autres modèles de mélange

Une vraisemblance non-bornée



Le modèle de mélange, implications pour la loi *a posteriori*

- Mettons que la vraisemblance n'est pas bornée.
- Pour certaines lois *a priori*, la densité *a posteriori* est bornée:
  - Si $X_i \sim N(\mu, \omega^{-1})$ et $\omega \sim \mathrm{Ga}(\alpha, \beta)$,

$$f(x_i) \propto \omega^{1/2} \exp\left[-\tfrac{1}{2}\omega(x_i - \mu)^2\right], \quad f(\omega) \propto \omega^{\alpha-1} e^{-\beta\omega}.$$

- Bornée ou non, si la densité *a priori* est propre, la densité *a posteriori* l'est aussi.
- Même si la densité *a priori* est impropre, la densité *a posteriori* est souvent propre (mais il faut le vérifier).
- Dans le cas où la densité *a posteriori* est propre,
  - la région où la densité postérieure est plus grande que le maximum local régulier a souvent une probabilité négligeable, même si la densité postérieure n'est pas bornée.

Un modèle Bernoulli

- $X_1, \ldots, X_n \sim \mathrm{iid}\,\mathrm{Bn}(p)$
- $R = \sum_{i=1}^n X_i$ est une statistique suffisante minimale pour p.
- Si $r = 0$,
  - $f(x|p) = (1-p)^n$,
  - $\hat{p}_{MV}(x) = 0$ (solution de coin),
  - $\mathrm{Var}_p[\hat{p}_{MV}(X)] = 0$ quand $p = \hat{p}_{MV}(x)$.
- Irregularité :
  - $\hat{p}_{MV}(x)$ se trouve sur la frontière de $\Theta = [0,1]$.
  - La dérivée (à droite) de $\log f(x|p)$ n'égale pas à zéro à l'estimation MV :

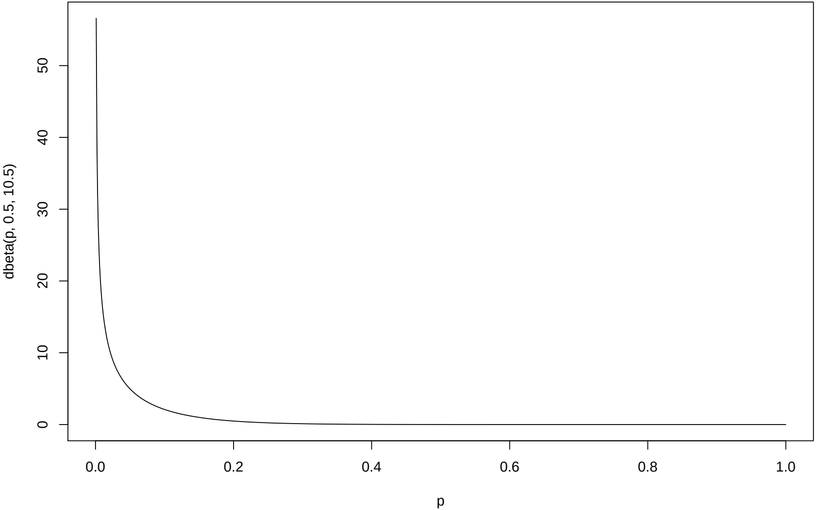
$$\left.\frac{\partial \log f(x|p)}{\partial p}\right|_{p=0} = \left.\frac{\partial n \log(1-p)}{\partial p}\right|_{p=0} = -n/(1-p)\big|_{p=0} = -n.$$

- D'autres cas :
  - Modèles avec restrictions sur les paramètres.

Un modèle Bernoulli, continué

Si $p \sim \mathrm{Be}(\alpha, \beta)$, $p|r \sim \mathrm{Be}(\alpha, \beta + n)$ quand $r = 0$.

Voici la densité pour $r = 0$, $n = 10$, $\alpha = \beta = 1/2$:



Un modèle uniform

- $X_1, \ldots, X_n \sim \mathrm{iid}\, U(0, \theta)$.
- $X_{(1)} = \max_i X_i$ est une statistique suffisante minimale pour θ.
- Ici,
  - $f(x|\theta) = \theta^{-n} 1_{[x_{(1)}, \infty)}(\theta)$.
  - $\hat{\theta}_{MV} = X_{(1)}$, la valeur minimale possible de θ
  - Pour $\theta > x_{(1)}$,
    - $\log f(x|\theta) = -n \log \theta$
    - $\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta} = -\frac{n}{\theta}$
    - $E_\theta[\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta}] = -\frac{n}{\theta} \neq 0$.
- Irregularités :
  - le support de X_i dépend de θ
  - on ne peut pas prendre la dérivé dans l'intégral

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \int_0^\theta f(x_i|\theta)\, dx = 0 \quad \text{mais} \quad \int_0^\theta \frac{\partial}{\partial \theta} f(x_i|\theta)\, dx = \int_0^\theta \frac{-1}{\theta^2}\, dx = -\frac{1}{\theta}.$$

Conditions de Régularité (page 516)

Pour convergence de l'estimateur MV :

1. $X_i \sim \mathrm{iid}\ f(x|\theta)$ pour $\theta = \theta_0 \in \Theta$.
2. $\theta = \theta' \rightarrow f(\cdot|\theta) \neq f(\cdot|\theta')$.
3. Le support de $f(x|\theta)$ ne dépend pas de θ, $f(x|\theta)$ est dérivable en θ.
4. $\theta_0 \in \mathrm{int}(\omega)$, pour $\omega \subseteq \Theta$, ω ouvert.

Pour la normalité et l'efficacité asymptotique on rajoute :

5. Pour tout $x \in \mathcal{X}$, $f(x|\theta)$ est trois fois continuement dérivable par rapport à θ; $\int f(x|\theta)$ peut être dérivable trois fois à l'intérieure de l'intégral.
6. Une borne sur le troisième dérivé de $\log f(x|\theta)$.

Information de Fisher, deux formes

- Ici, $X = (X_1, \ldots, X_n)$, $x = (x_1, \ldots, x_n)$.
- Deux dérivées de la log vraisemblance, si elles existent :

$$\frac{\partial \log f(x|\theta)}{\partial \theta^\top} = \frac{1}{f(x|\theta)} \frac{\partial f(x|\theta)}{\partial \theta^\top}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \log f(x|\theta)}{\partial \theta \partial \theta^\top} &= \frac{1}{f(x|\theta)} \frac{\partial^2 f(x|\theta)}{\partial \theta \partial \theta^\top} - \frac{1}{f(x|\theta)^2} \frac{\partial f(x|\theta)}{\partial \theta^\top} \frac{\partial f(x|\theta)}{\partial \theta} \\ &= \frac{1}{f(x|\theta)} \frac{\partial^2 f(x|\theta)}{\partial \theta \partial \theta^\top} - \frac{\partial \log f(x|\theta)}{\partial \theta^\top} \frac{\partial \log f(x|\theta)}{\partial \theta}\end{aligned}$$

- Espérance des deux côtés, si on peut passer l'espérance après les dérivées :

$$E_\theta \left[\frac{\partial^2 \log f(X|\theta)}{\partial \theta \partial \theta^\top} \right] = -E_\theta \left[\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta^\top} \frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta} \right] \equiv -I_n(\theta)$$

- Attention : existence des dérivées, changement de l'ordre.

Une remarque

Si l'espérance du score est nulle,

$$E_\theta\left[\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta^\top}\right] = 0,$$

alors

$$E_\theta\left[\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta^\top}\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta}\right] = \mathrm{Var}\left[\frac{\partial \log f(X|\theta)}{\partial \theta^\top}\right]$$

Information de Fisher pour une observation

La même démarche pour $f(x_i|\theta)$ au lieu de $f(x|\theta)$ donne

$$E_\theta \left[\frac{\partial^2 \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta\partial\theta^\top} \right] = -E_\theta \left[\frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta^\top} \frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta} \right] \equiv -I(\theta)$$

Additivité de l'information de Fisher

On considère ici les modèles où les X_i sont iid et on peut échanger l'ordre de l'espérance et le gradient.

- Si les X_i sont indépendantes, les $\partial \log f(X_i|\theta)/\partial\theta$ le sont aussi.
- Si on peut changer l'ordre de l'espérance et le gradient, ils ont une expérance de 0.
- Alors

$$
\begin{aligned}
I_n(\theta) &= E_\theta\left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta^\top} \sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta}\right] \\
&= \sum_{i=1}^n E_\theta\left[\frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta^\top} \frac{\partial \log f(X_i|\theta)}{\partial\theta}\right] \\
&\equiv nI(\theta).
\end{aligned}
$$

Exemple gaussien

Supposons que $y = X\beta + u$, $u \sim N(0, \sigma^2 I_n)$, la matrice X des covariables est $n \times K$, le paramètre β est $K \times 1$ et le paramètre scalaire σ^2 est connu. Alors

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\beta; y) &= \frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}(y - X\beta)^\top(y - X\beta) \\ &= \frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}(y^\top y - 2\beta^\top X^\top y + \beta^\top X^\top X\beta)\end{aligned},$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta^\top} = -\frac{1}{\sigma^2}(X^\top X\beta - X^\top y) = \frac{1}{\sigma^2}X^\top u.$$

Puisque $E[u] = 0$,

$$E\left[\frac{\partial \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta^\top}\right] = 0.$$

La matrice hessienne ne dépend pas de β :

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta^\top \partial \beta} = -\frac{1}{\sigma^2}X^\top X.$$

Exemple gaussien, continué

Ici, la variance du score est moins l'espérance de la matrice hessienne :

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Var}\left[\frac{\partial \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta^\top}\right] &= E\left[\frac{\partial \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta^\top}\frac{\partial \mathcal{L}(\beta; y)}{\partial \beta}\right] \\
&= \frac{1}{\sigma^4}E[X^\top u u^\top X] = \frac{1}{\sigma^2}X^\top X
\end{aligned}
$$

Dans un contexte bayésien où $\beta \sim N(\bar{\beta}, \bar{H}^{-1})$,

$$\beta | y, X \sim N(\bar{\bar{\beta}}, \bar{\bar{H}}^{-1}),$$

où $\bar{\bar{H}} = \bar{H} + \sigma^{-2} X^\top X$, $\bar{\bar{\beta}} = \bar{\bar{H}}^{-1}(\bar{H}\bar{\beta} + \sigma^{-2}X^\top X b)$ et $b = (X^\top X)^{-1} X^\top y$.

Gradient de la log vraisemblance

- Soit $l(\theta; x) \equiv \sum_{i=1}^{n} \log f(x_i|\theta)$.
- Soit $\hat{\theta}$ l'estimateur MV, θ_0 la vraie valeur du paramètre.
- Expansion Taylor du gradient à $\hat{\theta}$ (où $\lim_{\theta \to \theta_0} h(\theta) = 0_{K \times K}$)

$$\frac{\partial l(\hat{\theta}; x)}{\partial \theta^\top} = \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial \theta^\top} + \frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial \theta \partial \theta^\top}(\hat{\theta} - \theta_0) + h(\hat{\theta})(\hat{\theta} - \theta_0).$$

- Alors si le gradient à gauche est nulle,

$$(\hat{\theta} - \theta_0) = -\left[\frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial \theta \partial \theta^\top} + h(\hat{\theta})\right]^{-1} \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial \theta^\top}$$

- Notes : on a besoin de
  - l'existence d'un maximum intérieur de la vraisemblance
  - l'existence des dérivées jusqu'au deuxième ordre
  - la non-singularité de la matrice hessienne

Continuous mapping theorem

- Si $g(\cdot)$ est continu, X, $X_1, X_2, \ldots$ des vecteurs aléatoires,

$$X_n \to_p X \Rightarrow g(X_n) \to_p g(X),$$

$$X_n \to_{ps} X \Rightarrow g(X_n) \to_{ps} g(X),$$

$$X_n \to_d X \Rightarrow g(X_n) \to_d g(X).$$

- Notes
  - Le théorème de Slutsky est un cas spécial parce que $X_n \to_p c \Rightarrow X_n \to_d c$.
  - Slutsky : si $X_n \to_d X$ et $Y_n \to_p c$, $X_n + Y_n \to_d X + c$, $X_n Y_n \to_d cX$, $X_n / Y_n \to_d X/c$ si $c > 0$.
  - On peut relacher la continuité : g peut avoir un ensemble D de points de discontinuité avec $P(X \in D) = 0$.

Pour préparer une analyse asymptotique

- Pour préparer une analyse asymptotique, on peut écrire

$$(\hat{\theta} - \theta_0) = \left[-\frac{1}{n} \frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top} + \frac{1}{n} h_n(\hat{\theta}) \right]^{-1} \left[\frac{1}{n} \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial\theta^\top} \right].$$

$$\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0) = \left[-\frac{1}{n} \frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top} + \frac{1}{n} h_n(\hat{\theta}) \right]^{-1} \left[\sqrt{n} \frac{1}{n} \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial\theta^\top} \right].$$

Théorème central limite, loi de grand nombres pour le gradient

$$\sqrt{n}\frac{1}{n}\frac{\partial l(\theta_0; X)}{\partial \theta^\top} = \sqrt{n}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial \log f(X_i|\theta_0)}{\partial \theta^\top}$$

- Pour la vraie valeur θ_0, les termes sont iid, avec

$$E_{\theta_0}\left[\frac{\partial \log f(X_i|\theta_0)}{\partial \theta^\top}\right] = 0, \qquad \mathrm{Var}_{\theta_0}\left[\frac{\partial \log f(X_i|\theta_0)}{\partial \theta^\top}\right] = I(\theta_0).$$

- Par une loi de grand nombres,

$$\frac{1}{n}\frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial \theta^\top} \to_p 0.$$

- Par un théorème central limite,

$$\sqrt{n}\frac{1}{n}\frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial \theta^\top} \to_d N(0, I(\theta_0)).$$

Notes sur le gradient

On a besoin de

- l'existence des dérivées, échange d'ordre (intégral, dérivée),
- une variance fini,
- X_i indépendents, identiquement distribués.

Loi de grand nombres pour la matrice hessienne et son inverse

$$\frac{1}{n}\frac{\partial^2 l(\theta_0; X)}{\partial\theta\partial\theta^\top} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \log f(X_i|\theta_0)}{\partial\theta\partial\theta^\top} \to_p I(\theta_0)$$

- Par le théorème « continuous mapping, »

$$\left[\frac{1}{n}\frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top}\right]^{-1} \to_p I(\theta_0)^{-1}.$$

Combinaison des résultats

- Convergence de $(\hat{\theta} - \theta)$ en probabilité :

$$(\hat{\theta} - \theta_0) \approx \left[-\frac{1}{n} \frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top} \right]^{-1} \left[\frac{1}{n} \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial\theta^\top} \right] \rightarrow_p 0.$$

- Convergence de $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta)$ en loi :

$$\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0) \approx \left[-\frac{1}{n} \frac{\partial^2 l(\theta_0; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top} \right]^{-1} \left[\sqrt{n} \frac{1}{n} \frac{\partial l(\theta_0; x)}{\partial\theta^\top} \right] \rightarrow_d N(0, I(\theta_0)^{-1}).$$

- Remarquez que $I(\theta_0)^{-1}$ est la borne inférieure Cramer-Rao. Sous les conditions de régularité, $\hat{\theta}_{MV}$ est un estimateur asymptotiquement efficace de θ_0.

Distribution asymptotique de la statistique test LRT

- Considérez l'hypothèse ponctuelle $H_0 : \theta = \theta_0$.
- Développement quadratique de $l(\theta|x)$ autour de θ_0, évalué à $\hat{\theta}$:

$$l(\theta_0|x) = l(\hat{\theta}|x) + \frac{1}{2}(\hat{\theta} - \theta_0)^\top \frac{\partial^2 l(\hat{\theta}; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top}(\hat{\theta} - \theta_0) + \dots$$

- Sous l'hypothèse nulle $H_0 : \theta = \theta_0$,

$$\begin{aligned} -2\log\lambda(x) &= -2(l(\theta_0|x) - l(\hat{\theta}|x)) \\ &\to_d (\hat{\theta} - \theta_0)^\top \frac{\partial^2 l(\hat{\theta}; x)}{\partial\theta\partial\theta^\top}(\hat{\theta} - \theta_0) \to_d \chi^2_k. \end{aligned}$$