REVUE DE STATISTIQUE APPLIQUÉE

C. DECOUX

Estimation de modèles de semi-chaînes de Markov cachées par échantillonnage de Gibbs

Revue de statistique appliquée, tome 45, nº 2 (1997), p. 71-88

<http://www.numdam.org/item?id=RSA_1997__45_2_71_0>

© Société française de statistique, 1997, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Revue de statistique appliquée » (http://www.sfds.asso.fr/publicat/rsa.htm) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (http://www.numdam.org/conditions). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
http://www.numdam.org/

Rev. Statistique Appliquée, 1997, **XLV** (2), 71-88

ESTIMATION DE MODÈLES DE SEMI-CHAÎNES DE MARKOV CACHÉES PAR ÉCHANTILLONNAGE DE GIBBS

C. Decoux

Université de Rouen, UFR des Sciences, Dépt. de Math., URA CNRS 1378.
E-mail : Claire.Decoux@univ-rouen.fr

RÉSUMÉ

Robert *et al.* (1993) ont proposé une méthode d'approximation des estimateurs de Bayes dans le cas de modèles de Markov cachés. Nous étendons ce travail au cas des modèles de semi-chaînes de Markov cachées, nous présentons les approximations bayésiennes obtenues par échantillonnage de Gibbs dans le cas de mélanges de lois normales et nous évaluons les performances de ces estimations. Nous illustrons notre méthode sur des données de sommeil des nourrissons.

Classification AMS (1991) : 60J10, 62F15, 62M05.

Mots-clés : *Dépendance markovienne, données manquantes, échantillonnage de Gibbs, théorème ergodique.*

ABSTRACT

Robert *and al.* (1993) proposed a method which approximates Bayes estimators in hidden Markov chains models. We extend this method to the case of hidden semi-Markov chains. We give Bayesian approximations obtained via Gibbs sampling for mixtures of Gaussian distributions. We evaluate the performances of these estimations and illustrate our method with newborn sleep records.

Keywords : *Markovian dependency, missing data, Gibbs sampling, ergodic theorem.*

1. Introduction

L'intérêt des modèles de Markov cachés (HMM, Hidden Markov Models) est d'étendre la modélisation par mélange i.i.d. à des phénomènes de dépendance. On peut également prolonger les modèles HMM aux semi-chaînes de Markov cachées comme dans Guedon et Cocozza-Thivent (1990) pour la reconnaissance de la parole ou comme dans Celeux et Clairambault (1992) pour la modélisation du sommeil des nourrissons, afin d'affiner la représentation de ces phénomènes en autorisant des plages de comportement non homogènes.

Rappelons que pour un modèle de mélange usuel, les observations sont indépendantes et de densité :

$$\phi(y) = \sum_{k=1}^{r} w_k f(y|\xi_k), \tag{1}$$

où les densités $f(.|\xi)$ appartiennent à une famille paramétrée donnée, généralement exponentielle. L'extension des modèles de Markov cachés supprime l'hypothèse d'indépendance entre les observations d'un échantillon de (1), pour la remplacer par une structure de dépendance markovienne. Plus formellement, on associe à chaque observation y_i de (1) un indicateur de donnée manquante z_i qui représente la composante à partir de laquelle l'observation y_i est générée, soit $y_i|z_i = k \sim f(y|\xi_k)$ pour $k \in \{1, \ldots, r\}$. Dans le cas des HMM, l'hypothèse faite sur les z_i est que la suite (z_n) est une chaîne de Markov, prenant ses valeurs dans $\{1, \ldots, r\}$, de matrice de transition $Q = (q_{lm})$, où $q_{lm} = P(z_i = m|z_{i-1} = l)$, et que, conditionnellement aux z_i, les y_i sont indépendants de loi $f(.|\xi_{z_i})$.

La suite des z_i, en décrivant la suite des allocations de chacune des observations aux différentes composantes du modèle, met à jour des paquets pour lesquels les allocations sont identiques. Plus précisément, des observations consécutives peuvent être allouées à une même composante pendant un temps donné. Il semble alors assez naturel et réaliste de penser que ces temps puissent être gérés de façon aléatoire. Le modèle de semi-chaîne de Markov cachée étend le modèle de chaîne de Markov cachée en introduisant des temps de séjour aléatoires dans chaque état. Ces temps de séjour $\tau_p = T_p - T_{p-1}$ sont régis par une loi géométrique de paramètre λ. Le modèle complété est alors formé des $(T_p), (Z_{T_p}), (Y_t)$, où

$$T_p = \inf\{k > T_{p-1}; Z_k \neq Z_{T_{p-1}}\},\ T_1 = \inf\{k \geqslant 1; Z_k \geqslant Z_{T_0}\},\ T_0 = 0,$$

(Z_{T_p}) est une chaîne de Markov de matrice de transition $P = (p_{ij})$ avec $p_{ii} = 0$ pour tout i, donc de diagonale nulle au contraire des modèles de Markov cachés. On remarque aussi que si les temps de séjour suivent une loi de Poisson, on retombe dans le cas markovien.

Le problème inférentiel est d'estimer les paramètres ξ_j des lois des observations, les paramètres p_{ij} de la matrice de transition de la chaîne de Markov ainsi que le paramètre λ de la loi des temps de séjours entre deux sauts consécutifs. On notera $\theta = \{\xi_k, k = 1, \ldots, r; P; \lambda\}$.

L'approche bayésienne de ce problème consiste à calculer les moyennes a posteriori des paramètres. Ce calcul conduit à une intégrale non explicite et entraîne alors des problèmes d'implémentation. On a alors recours à des méthodes de simulation par échantillonnage de Gibbs. Cette méthode, basée sur des chaînes de Markov, met à profit l'existence d'une loi stationnaire pour traiter de problèmes de simulation complexes (Gelfand et Smith, 1990). Elle propose la génération d'une chaîne de Markov $(\theta^{(m)}, z^{(m)})$ de distribution stationnaire la loi d'intérêt π, fondant l'approximation des quantités d'intérêt sur un théorème ergodique (voir Tierney 1991, 1994). Comme dans le cas des mélanges, plusieurs paramétrisations de (1) sont possibles et conduisent à des performances différentes de l'échantillonnage de

Gibbs. On considère dans cet article un modèle de mélange de r lois normales $\mathcal{N}(\xi_k, \sigma_k)$, puis une reparamétrisation de ce modèle inspirée par Mengersen et Robert (1995). Dans les deux cas, nous exhibons des estimateurs bayésiens par les techniques d'échantillonnage de Gibbs. Dans une dernière partie, nous illustrons les performances de nos techniques. Un premier exemple est une implémentation sur un jeu de données simulées, qui permet de valider nos résultats. La deuxième implémentation est opérée sur deux jeux d'observations qui décrivent les intervalles entre battements cardiaques d'un nourrisson et la variabilité à haute fréquence extraite de ce même signal. L'objectif est de reconnaître les différents stades du sommeil du nourrisson, et plus exactement les stades de sommeil calme entre deux périodes de sommeil agité. Ces données ont été traitées par Celeux et Clairambault (1992) en utilisant un modèle de Markov caché et un algorithme EM à la Gibbs (une version stochastique de EM).

2. Estimation bayésienne

2.1. Écriture standard

On considère un mélange issu de r lois normales $\mathcal{N}(\xi_k, {\sigma_k}^2)$, $k = 1, \ldots, r$. Pour une semi-chaîne de Markov à r composantes, on note $K_n = \max\{p; T_p \leqslant n\}$ le nombre (non observé) de sauts effectués par la chaîne (latente) des affectations (Z_t), n étant le nombre d'observations. La vraisemblance associée est

$$\begin{aligned} f(y_0, \ldots, y_n|\theta) =& P[T_0 = t_0, \ldots, T_{K_n} = t_{K_n} \text{ et } K_n = 0] \prod_{m=t_0}^{n} f(y_m|\xi_{z_{T_0}}, {\sigma^2}_{z_{T_0}}) \\ &+ \sum_{K=1}^{n} \sum_{t_i<t_{i+1}} \sum_{z_{T_i} \neq z_{T_{i+1}}} P[T_0 = t_0, \ldots, T_{K_n} = t_{K_n} \text{ et } K_n = K] \\ &\times \prod_{l=1}^{K} p_{z_{T_{l-1}} z_{T_l}} \left[\prod_{i=t_{l-1}}^{t_l - 1} f(y_i|\xi_{z_{T_{l-1}}}, {\sigma^2}_{z_{T_{l-1}}}) \right] \\ &\times \prod_{m=t_{K_n}}^{n} f(y_m|\xi_{z_{T_{K_n}}}, {\sigma^2}_{z_{T_{K_n}}}), \end{aligned}$$

où les conditions de sommation sur les t_i sont

$$t_0 = 0 < t_1 < t_2 < \ldots < t_i < t_{i+1} < \ldots < t_K \leqslant n.$$

On impose sans perte de généralité que $z_{t_0} = 1$, c'est-à-dire que l'on suppose $Y_0 \sim \mathcal{N}(\xi_1, {\sigma_1}^2)$.

Notons de plus que

$$\begin{aligned}
P[T_0 = t_0, \ldots, T_{K_n} = t_{K_n} \text{ et } K_n = K] \\
&= P[\tau_1 = t_1, \ldots, \tau_K = t_K - t_{K-1}, \tau_{K+1} > n - t_K] \\
&= \lambda(1-\lambda)^{t_1 - 1} \ldots \lambda(1-\lambda)^{t_K - t_{K-1} - 1} \lambda \sum_{i=n-t_K+1}^{\infty} (1-\lambda)^{i-1} \\
&= \lambda^K (1-\lambda)^{n-K},
\end{aligned}$$

ce qui implique

$$\begin{aligned}
f(y_0, \ldots, y_n|\theta) =& (1-\lambda)^n \prod_{m=t_0}^{n} f(y_m|\xi_{z_{T_0}}, \sigma^2_{z_{T_0}}) \\
&+ \sum_{K=1}^{n} \sum_{t_i} \sum_{z_{T_i}} \lambda^K (1-\lambda)^{n-K} \Bigg[\prod_{l=1}^{K} p_{z_{T_{l-1}} z_{T_l}} \\
&\times \prod_{i=t_{l-1}}^{t_l - 1} f(y_i|\xi_{z_{T_{l-1}}}, \sigma^2{}_{z_{T_{l-1}}}) \Bigg] \prod_{m=t_K}^{n} f(y_m|\xi_{z_{T_K}}, \sigma^2{}_{z_{T_K}}).
\end{aligned}$$

Les lois *a priori* retenues sur les paramètres $(\xi_k, \sigma_k, P, \lambda)$ sont un produit de lois de Dirichlet $\mathcal{D}(\alpha_1^k, \ldots, \alpha_r^k)$ sur les lignes p_k de la matrice P et une loi conjuguée sur les paramètres ξ_k, σ_k. N'ayant pas d'information *a priori* disponible sur le paramètre λ, on suppose comme loi *a priori* sur ce paramètre une loi bêta $\mathcal{B}e(\gamma, \beta)$, qui conduit alors à un calcul aisé de la loi *a posteriori* conditionnelle. Même avec ces lois conjuguées (Robert, 1992) la densité *a posteriori* n'est pas explicite, ce qui rend délicat le calcul des estimateurs bayésiens.

2.2. Implémentation par Gibbs

L'échantillonnage de Gibbs lève cette difficulté (Gelfand et Smith, 1990; Soubiran *et al.*, 1991; Robert, 1992). Il est fondé sur la génération itérative et successive des lois conditionnelles associées à la loi d'intérêt π. La génération des variables aléatoires est totalement circulaire : en démarrant avec une valeur initiale $\theta^{(0)}$ des paramètres, l'algorithme est itéré de la manière suivante :

`Générer à l'étape` m `:`

$$\begin{aligned}
z^{(m)} &\sim g(z|y, \xi^{(m)}, P^{(m)}, \lambda^{(m)}), \\
\xi^{(m+1)} &\sim \pi(\xi|y, z^{(m)}, \sigma^{(m)}, P^{(m)}, \lambda^{(m)}), \\
\sigma^{(m+1)} &\sim \pi(\sigma|z^{(m)}, \xi^{(m+1)}, P^{(m)}, \lambda^{(m)})), \\
P^{(m+1)} &\sim \pi(P|y, z^{(m)}, \xi^{(m+1)}, \sigma^{(m+1)}, \lambda^{(m)}), \\
\lambda^{(m+1)} &\sim \pi(\lambda|y, z^{(m)}, \xi^{(m+1)}, \sigma^{(m+1)}, P^{(m+1)}).
\end{aligned}$$

A chaque pas, la génération des v.a. est conditionnelle aux autres valeurs simulées. On note que lorsque les paramètres θ_i sont indépendants conditionnellement aux autres paramètres, l'échantillonnage de Gibbs est équivalent à l'algorithme d'accroissement de données de Tanner et Wong (1987).

Pour le modèle considéré la densité conditionnelle *a posteriori* $\pi(\theta|y,z) = \pi(\xi, P, \lambda|y,z)$ est plus simple, car elle évite les sommations importantes sur les valeurs de K_n, des t_i et z_T. On a en effet

$$\begin{aligned}\pi(\xi, P, \lambda|y,z) =& \pi(\xi, \sigma, P, \lambda|y, K_n, \tau, z_T)\\ \propto& \lambda^{K+\gamma}(1-\lambda)^{n-K+\beta}\left[\prod_{l=1}^{K} p_{z_{T_{l-1}}, z_{T_l}} \prod_{i=t_{l-1}}^{t_l-1} f(y_i|\xi_{z_{T_{l-1}}}, {\sigma^2}_{z_{T_{l-1}}})\right]\\ &\times \prod_{m=t_K}^{n} f(y_m|\xi_{z_{T_K}}, {\sigma^2}_{z_{T_K}})\left[\prod_{k=1}^{r}\left(\pi(\xi_k)\pi(\sigma_k) \prod_{l=1;l\neq k}^{r} p_{kl}^{\alpha_l^k-1}\right)\right].\end{aligned}$$

Par conséquent, pour $p_k = (p_{k,l})_{l\neq k}$, la distribution conditionnelle de p_k est

$$\pi(p_k|y,\xi,\sigma,\lambda,z) \propto \prod_{l=1;l\neq k}^{r} p_{kl}^{\left(\alpha_l^k + \sum_{m=1}^{K} \mathbb{I}_{\{z_{T_{m-1}}=k\}}\, \mathbb{I}_{\{z_{T_m}=l\}} - 1\right)},$$

soit

$$p_k|y,\xi,\sigma,\lambda,z \sim \mathcal{D}_k\left(a_1^k, \ldots, a_r^k\right), \tag{2}$$

où $a_j^k = \alpha_j^k + \sum_{m=1}^{K} \mathbb{I}_{\{z_{T_{m-1}}=k\}}\, \mathbb{I}_{\{z_{T_m}=j\}}$.

Pour les paramètres ξ_k de loi conjuguée *a priori* $\mathcal{N}(\mu_k, \tau_k)$,

$$\xi_k|K,\tau,z_T,y,P,\sigma,\lambda \sim \mathcal{N}(m_k, v_k)$$

où

$$m_k = \frac{\mu_k {\sigma_k}^2 + {\tau_k}^2\left(\sum_{l=1}^{K}\sum_{i=t_{l-1}}^{t_l-1} y_i\, \mathbb{I}_{\{z_{T_{l-1}}=k\}} + \sum_{m=t_K}^{n} y_m\, \mathbb{I}_{\{z_{T_K}=k\}}\right)}{{\sigma_k}^2 + \left(\sum_{l=1}^{K}(t_l - t_{l-1})\, \mathbb{I}_{\{z_{T_{l-1}}=k\}} + (n - t_K + 1)\, \mathbb{I}_{\{z_{T_K}=k\}}\right){\tau_k}^2},$$

$$v_k = \left(\frac{\sum_{l=1}^{K}(t_l - t_{l-1})\, \mathbb{I}_{\{z_{T_{l-1}}=k\}} + (n - t_K + 1)\, \mathbb{I}_{\{z_{T_K}=k\}}}{{\sigma_k}^2} + \frac{1}{{\tau_k}^2}\right)^{-1}.$$

Pour les paramètres ${\sigma_k}^{-2}$ de loi conjuguée *a priori* $\mathcal{G}a(\delta_k, \nu_k)$, il vient

$$\sigma_k^{-2}|K, \tau, z_T, y, P, \xi, \lambda \sim \mathcal{G}a\left(\frac{n_k}{2} + \delta_k, \frac{A_k}{2}\right),$$

où

$$A_k = \sum_{l=1}^{K} \sum_{i=t_{l-1}}^{t_l - 1} (y_i - \xi_{Z_{T_{l-1}}})^2 \, \mathbb{I}_{\{z_{T_{l-1}}=k\}} + \sum_{m=t_K}^{n} (y_m - \xi_{Z_{T_K}})^2 \, \mathbb{I}_{\{z_{T_K}=k\}} + 2\nu_k,$$

n_k étant le nombre d'affectations à la $k$ième composante du mélange. Enfin, pour le paramètre λ la densité conditionnelle *a posteriori* est

$$\pi(\lambda|y, \xi, \sigma, P, z) \propto \lambda^K (1-\lambda)^{n-K} \lambda^{\gamma-1} (1-\lambda)^{\beta-1},$$

soit

$$\lambda|y, \xi, \sigma, P, z \sim \mathcal{B}e(K + \gamma, n - K + \beta). \tag{3}$$

Considérons maintenant la génération des données manquantes $(z_i)_{i=1,\ldots,n}$ qui nous permettra d'accéder aux valeurs des K_n, τ et des états z_T. Soit la fonction h définie, pour $(k, l) \in \{1, \ldots, r\}^2$, par

$$h(k, l) = (\lambda p_{kl})^{\mathbb{I}_{\{k \neq l\}}} \, (1-\lambda)^{\mathbb{I}_{\{k=l\}}}.$$

Les distributions conditionnelles des z_i par rapport aux y, θ et aux autres z_j pour $0 < i, \; j < n$, sont données comme dans Robert *et al.* (1993) par

$$g(z_i|y, \theta, z_{j \neq i}) = \frac{h(z_{i-1}, z_i) f(y_i|\xi_{z_i}) h(z_i, z_{i+1})}{\sum_{j=1}^{r} h(z_{i-1}, j) f(y_i|\xi_j) h(j, z_{i+1})} \tag{4}$$

et

$$g(z_n|y, \theta, z_{n-1}) = \frac{h(z_{n-1}, z_n) f(y_n|\xi_{z_n})}{\sum_{j=1}^{r} h(z_{n-1}, j) f(y_n|\xi_j)} \tag{5}$$

et la génération des z_i fournit les valeurs de K_n, $(T_1, \ldots, T_{K_n})$ et des états $(Z_{T_1}, \ldots, Z_{T_{K_n}})$.

Comme dans le cas des mélanges, un des défauts de cette approche est de réclamer l'emploi de lois conjuguées propres, donc la spécification d'hyperparamètres $\mu_k, \nu_k, \ldots$. L'alternative considérée dans le paragraphe 2.3 évite en partie ce problème.

2.3. Une reparamétrisation

On considère une reparamétrisation du modèle précédent : le mélange est issu de r lois normales $\mathcal{N}(\mu, \tau)$ et $\mathcal{N}(\mu + \tau\theta_i, \tau\sigma_i)$, avec $i = 1, \ldots, r-1$. Cette paramétrisation crée un lien *a priori* entre les composantes du modèle car chaque composante contribue à l'estimation de μ et τ. La moyenne μ et l'écart-type τ de la première composante du modèle sont pris comme les paramètres de position et d'échelle du modèle, tandis que les autres composantes représentent une perturbation de (μ, τ).

Considérons par exemple un mélange à trois composantes. On peut alors prendre pour loi *a priori* sur les paramètres $(\mu, \tau, \theta_1, \sigma_1, \theta_2, \sigma_2)$ les lois suivantes (voir Mengersen et Robert, 1995) : sur (μ, τ) la loi impropre $\pi(\mu, \tau) = \tau^{-1}$, sur θ_i une distribution normale $\mathcal{N}(0, \epsilon_i)$ où l'hyperparamètre ϵ_i est assez grand. En symétrisant un *a priori* uniforme sur σ_i, c'est-à-dire que $\sigma_i \sim \mathcal{U}$ ou $\sigma_i^{-1} \sim \mathcal{U}$, on prend $\pi(\sigma_i) = \frac{1}{2}\Big(\mathbb{I}_{(\sigma_i \in [0,1])} + {\sigma_i}^{-2}\mathbb{I}_{(\sigma_i > 1)}\Big)$. Pour le modèle considéré, les paramètres à estimer sont

$$\varphi = (\mu, \tau, \theta_1, \sigma_1, \theta_2, \sigma_2, P, \lambda).$$

Dans ce cas :

$$\begin{aligned}
\pi(\varphi|y) \propto & \sum_K \sum_{t_i} \sum_{z_{t_i}} \lambda^K (1-\lambda)^{n-K} \prod_{l=1}^{K} \Bigg[p_{z_{t_{l-1}} z_{t_l}} \\
& \times \prod_{i=t_{l-1}}^{t_l - 1} \left(\frac{1}{\tau} e^{-\frac{1}{2\tau^2}(y_i-\mu)^2 \mathbb{I}_{\{z_{t_{l-1}}=1\}}} \prod_{v=1}^{2} \frac{1}{\tau\sigma_v} e^{-\frac{1}{2\tau^2 {\sigma_v}^2}(y_i-\mu-\tau\theta_v)^2 \mathbb{I}_{\{z_{t_{l-1}}=v+1\}}} \right) \Bigg] \\
& \times \prod_{m=t_K}^{n} \left(\frac{1}{\tau} e^{-\frac{1}{2\tau^2}(y_m-\mu)^2 \mathbb{I}_{\{z_{t_K}=1\}}} \prod_{v=1}^{2} \frac{1}{\tau\sigma_v} e^{-\frac{1}{2\tau^2 {\sigma_v}^2}(y_i-\mu-\tau\theta_v)^2 \mathbb{I}_{\{z_{t_K}=v+1\}}} \right) \\
& \times \frac{1}{\tau} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{{\theta_1}^2}{{\epsilon_1}^2} + \frac{{\theta_2}^2}{{\epsilon_2}^2}\right)} \pi(\sigma_1)\, \pi(\sigma_2)\, \pi(P)\, \pi(\lambda).
\end{aligned}$$

Comme précédemment, on utilise les lois conditionnelles pour mettre en œuvre l'échantillonnage de Gibbs. On notera

$$n_j = \sum_{i=0}^{n} \mathbb{I}_{\{z_i=j\}},\ \bar{y_j} = \sum_{i=0}^{n} y_i \mathbb{I}_{\{z_i=j\}},\ {S_j}^2 = \sum_{i=0}^{n} (y_i - \mu)^2 \mathbb{I}_{\{z_i=j\}},$$

et $\varphi_{|a}$, l'ensemble des paramètres privé du paramètre a.

Les lois conditionnelles sont alors les suivantes :

$$\mu|y,z,\varphi_{|\mu} \sim \mathcal{N}\left(\frac{{\sigma_1}^2{\sigma_2}^2\bar{y_1} + {\sigma_2}^2(\bar{y_2} - \tau\theta_1 n_2) + {\sigma_1}^2(\bar{y_3} - \tau\theta_2 n_3)}{n_1{\sigma_1}^2{\sigma_2}^2 + n_2{\sigma_2}^2 + n_3{\sigma_1}^2}; \frac{\tau^2{\sigma_1}^2{\sigma_2}^2}{n_1{\sigma_1}^2{\sigma_2}^2 + n_2{\sigma_2}^2 + n_3{\sigma_1}^2}\right), \quad (6)$$

$$\theta_1|y,z,\varphi_{|\theta_1} \sim \mathcal{N}\left(\left(\frac{n_2}{{\sigma_1}^2} + \frac{1}{{\epsilon_1}^2}\right)^{-1}\frac{\bar{y_2} - n_2\mu}{\tau{\sigma_1}^2}; \left(\frac{n_2}{{\sigma_1}^2} + \frac{1}{{\epsilon_1}^2}\right)^{-1}\right), \quad (7)$$

$$\theta_2|y,z,\varphi_{|\theta_2} \sim \mathcal{N}\left(\left(\frac{n_3}{{\sigma_2}^2} + \frac{1}{{\epsilon_2}^2}\right)^{-1}\frac{\bar{y_3} - n_3\mu}{\tau{\sigma_2}^2}; \left(\frac{n_3}{{\sigma_2}^2} + \frac{1}{{\epsilon_2}^2}\right)^{-1}\right), \quad (8)$$

$${\sigma_1}^{-2}|y,z,\varphi_{|\sigma_1} \sim \mathcal{G}a\left(\frac{n_2+1}{2}; \frac{1}{2\tau^2}\sum_{i=0}^{n}(y_i - \mu - \tau\theta_1)^2\, \mathbb{I}_{\{z_i=2\}}\right) \times\left(\mathbb{I}_{(\sigma_1\in[0,1])} + \frac{1}{{\sigma_1}^2}\mathbb{I}_{(\sigma_1>1)}\right), \quad (9)$$

$${\sigma_2}^{-2}|y,z,\varphi_{|\sigma_2} \sim \mathcal{G}a\left(\frac{n_3+1}{2}; \frac{1}{2\tau^2}\sum_{i=0}^{n}(y_i - \mu - \tau\theta_2)^2\, \mathbb{I}_{\{z_i=3\}}\right) \times\left(\mathbb{I}_{(\sigma_2\in[0,1])} + \frac{1}{{\sigma_2}^2}\mathbb{I}_{(\sigma_2>1)}\right) \quad (10)$$

et la distribution de τ^2 est obtenue en intégrant la loi jointe *a posteriori* sur les θ_i,

$$\tau^{-2}|y,z,\varphi_{|\tau} \sim \mathcal{G}a\left(\frac{n}{2}; \frac{1}{2}\left({S_1}^2 + \frac{1}{{\sigma_1}^2}{S_2}^2 + \frac{1}{{\sigma_2}^2}{S_3}^2 - \frac{{\epsilon_1}^2(\bar{y_2} - n_2\mu)^2}{{\sigma_1}^2({\sigma_1}^2 + n_2{\epsilon_1}^2)} - \frac{{\epsilon_2}^2(\bar{y_3} - n_3\mu)^2}{{\sigma_2}^2({\sigma_2}^2 + n_3{\epsilon_2}^2)}\right)\right). \quad (11)$$

Les lois *a posteriori* conditionnelles sur λ et les lignes p_k sont données par (3) et (2).

2.4. Contrôle de convergence

L'échantillonnage de Gibbs produit par construction une chaîne de Markov $(\theta^{(n)}, z^{(n)})$ de loi stationnaire $\pi(\theta, z|y)$. Les densités conditionnelles *a posteriori* étant positives, la chaîne est π-irréductible et apériodique d'unique mesure invariante π (Tierney, 1994). La chaîne (θ, z) est donc ergodique. Ce résultat entraîne l'application du théorème ergodique, c'est-à-dire que $E^{\pi}[h(\theta)|y] = \int_{\Theta} h(\theta)\pi(\theta|y)\, d\theta$ peut être approché par la moyenne

$$\frac{1}{M}\sum_{n=1}^{M} h(\theta^{(n)}). \quad (12)$$

Sous certaines conditions, on peut aussi approcher $E^{\pi}[h(\theta)|y]$ par la quantité $\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} E^{\pi}[h(\theta)|y, z^{(m)}]$, suivant une procédure appelée Rao-Blackwellisation (Gelfand et Smith, 1990). Cette procédure produit en général des estimateurs de plus petite variance que les estimateurs empiriques (voir Liu, Wong et Kong, 1994).

En fait, le modèle de semi-chaîne de Markov cachée n'offre pas de différence significative avec le modèle de Markov caché pour la validation théorique de l'échantillonnage de Gibbs. La chaîne $(z^{(m)})$ est une chaîne de Markov irréductible, apériodique et à espace d'états fini $\{1, \ldots, r\}$, donc uniformément ergodique et géométriquement ϕ-mélangeante. Bien que $(\theta^{(m)})$ ne soit pas une chaîne de Markov, nous pouvons transférer quelques propriétés de $(z^{(m)})$, la plus simple des deux chaînes, à la séquence $(\theta^{(m)})$, par le principe de dualité (voir Diebolt et Robert, 1994).

Ainsi la convergence géométrique uniforme de la chaîne $(\theta^{(n)})$ se déduit de la convergence géométrique de la chaîne $(z^{(n)})$. D'autre part, la chaîne $(\theta^{(n)})$ est aussi ϕ-mélangeante. Cette dernière propriété est importante car elle garantit le théorème de la limite centrale, et permet donc un contrôle de la vitesse de convergence de la moyenne (12) vers $E^{\pi}[h(\theta)|y]$ (Geyer, 1991).

Dans de nombreux cas, la moyenne empirique et sa version Rao-Blackwellisée sont similaires dès les premières estimations et ne peuvent alors servir à contrôler la convergence. Yu et Mykland (1994) ont proposé une évaluation graphique du contrôle de convergence fondée sur la représentation graphique des différences partielles suivantes :

$$D_i = \sum_{t=1}^{i}\Big(\theta^{(t)} - \Big(\frac{1}{M}\sum_{n=1}^{M}\theta^{(n)}\Big)\Big).$$

Plus la chaîne est fortement mélangeante, plus le graphe des sommes est bruité et concentré autour de zéro. Les chaînes faiblement mélangeantes conduisent au contraire à des graphes réguliers avec de longues excursions évitant zéro. Très empirique, cette méthode fournit un indicateur qualitatif de mélangeance rapide, mais peut échouer lorsque des régions de l'espace des états sont plus lentement mélangeantes que d'autres.

Raftery et Lewis (1992) ont proposé une évaluation quantitative du contrôle de convergence fondée sur une chaîne de Markov $z^{(t)}$ à deux états déduite de la chaîne des $\theta^{(t)}$ par $z^{(t)} = \mathbb{I}_{\theta^{(t)} \leqslant \theta_0}$ où θ_0 est une valeur arbitraire choisie. En supposant que la suite $z^{(t)}$ ait une structure markovienne, ils proposent une évaluation du nombre d'itérations nécessaires t_0 pour atteindre la stationnarité et du nombre total d'itérations T qui assure la convergence, en se basant sur la pseudo-matrice de transition de la chaîne $z^{(t)}$,

$$P = \begin{pmatrix} 1-\eta & \eta \\ \rho & 1-\rho \end{pmatrix}.$$

Ils déterminent ainsi la taille d'initialisation t_0 par

$$t_0 \geqslant \frac{\log(\eta+\rho)\varepsilon}{\sup(\eta,\rho)\log(|1-\eta-\rho|)} \quad ,$$

et suggèrent d'utiliser une taille d'échantillon T au moins égale à

$$T \geqslant \frac{\eta\rho(2-\eta-\rho)}{r^2(\eta+\rho)^3}\Phi^{-1}\left(\frac{1+s}{2}\right)^2,$$

où les 3 paramètres ε, s et r doivent être choisis en fonction du degré de précision voulu. Cette méthode est souvent utilisée en pratique car son implémentation est aisée. Cependant, elle peut aussi conduire à un faux diagnostic de convergence. En particulier, si les éléments de la matrice de transition de la chaîne $z^{(t)}$ ne sont pas préalablement correctement estimés, la méthode perd alors sa validité (voir Robert, 1996).

3. Illustrations

3.1. Simulations

On illustre le comportement de la méthode sur 100 observations simulées issues d'un mélange de 3 lois normales $\mathcal{N}(1,1)$, $\mathcal{N}(\frac{7}{2},1)$ et $\mathcal{N}(6,1)$, avec un paramètre de loi géométrique $\lambda = 0.2$ et une matrice de transition

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0.7 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.8 \\ 0.9 & 0.1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Un histogramme des données simulées est représenté en figure 3.1 avec sa véritable densité marginale.

Dans un premier temps, on effectue 50000 itérations afin d'évaluer la convergence de l'algorithme.

Les lois *a priori* sur ξ_1, ξ_2 et ξ_3 sont des lois normales $\mathcal{N}(1,\frac{1}{2})$, $\mathcal{N}(\frac{7}{2},\frac{1}{2})$, et $\mathcal{N}(6,\frac{1}{2})$ et le paramètre λ suit une loi bêta de paramètres $\beta = 0.2$ et $\gamma = 0.8$ (les hyperparamètres étant choisis afin que la moyenne de la loi bêta soit égale à 0.2).

Les résultats des estimations sont rassemblés dans le tableau 3.1. Dans les deux cas on remarque une bonne adéquation des estimateurs.

Les états étant connus, on peut comparer affectations réelles et modes des affectations simulées. La figure 3.2 illustre cette comparaison en montrant l'efficacité de la méthode puisque seules les 63ième et 92ième observations se trouvent mal affectées. Toutes les observations issues des composantes 1 et 2 sont correctement affectées, et seules 96% des observations de la troisième composante le sont. Le poids de la troisième composante est donc sous estimé.

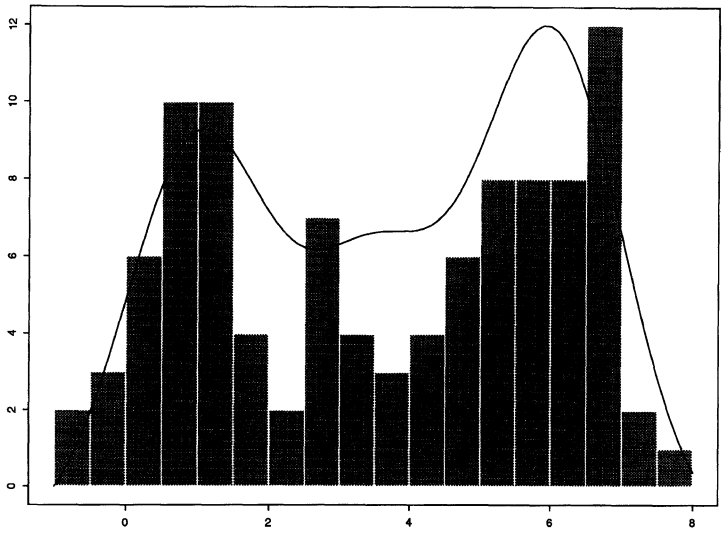

FIGURE 3.1
Échantillon des 100 observations simulées avec la densité marginale correspondante

TABLEAU 3.1
Moyenne empirique (emp) et estimateur de Rao-Blackwell (RB) des paramètres du modèle. Les p_i représentent les probabilités simulées et estimées d'allocation à chaque état

	ξ_1	ξ_2	ξ_3	λ	σ_1	σ_2	σ_3	p_1	p_2	p_3
réelles	1	3.5	6	0.2	1	1	1	0.34	0.23	0.43
emp	0.82	3.33	6.09	0.23	0.83	1.23	0.76	0.33	0.26	0.41
RB	0.82	3.33	6.09	0.23	0.84	1.22	0.76	0.33	0.26	0.41

Un premier contrôle de convergence s'opère par la représentation des moyennes successives des différents paramètres. Comme le montre la figure 3.3, les différentes courbes présentent une forte stabilité, qui indique que les 50000 itérations ne sont pas toutes nécessaires. On notera la petitesse de l'échelle sur ces deux figures.

Ainsi la bonne mélangeance de l'algorithme sur seulement les 10000 premières itérations est illustrée par la figure 3.4, puisque le critère de Yu et Mykland (1994) présente un aspect suffisamment chaotique.

On applique la méthode de Raftery et Lewis (1992) pour le paramètre λ avec les paramètres de précision $\varepsilon = 0.01$, $s = 0.95$, et avec une taille d'échantillon de 50000. Une première évaluation nous donne les valeurs de η, ρ, t_0 et T suivantes : $\eta = 0.009$, $\rho = 0.0004$ et $(t_0; T) = (491; 3767)$. Une réévaluation des paramètres η et ρ après les T itérations donne sensiblement les mêmes résultats. Ces résultats sont satisfaisants pour le modèle complexe considéré et pour le paramètre λ. Sachant

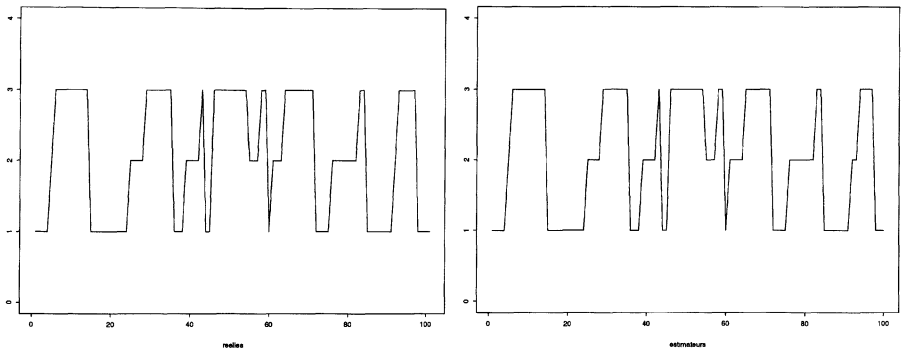

FIGURE 3.2
Chaînes des affectations réelles et estimées

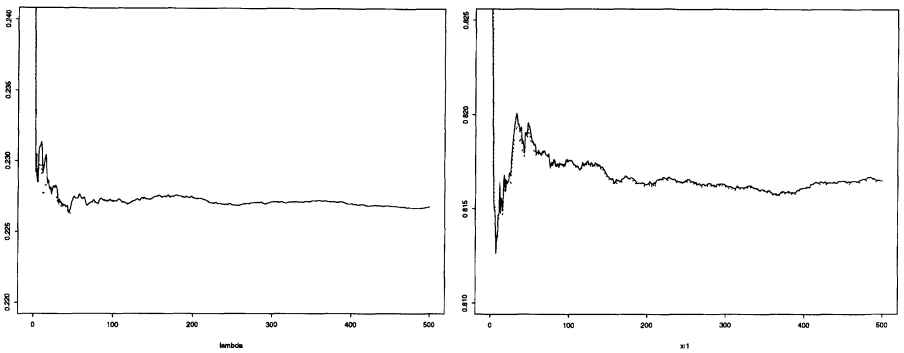

FIGURE 3.3
Sommes cumulées pour deux estimateurs. Les traits pleins représentent les sommes cumulées des estimateurs empiriques, les traits en pointillés, les sommes cumulées des estimateurs de Rao-Blackwell (50000 itérations)

que le T estimé pour le paramètre λ est le maximum des T de chaque paramètre, ces résultats se révèlent être insuffisants dans le cas du contrôle du paramètre ξ_1.

Reprenant brièvement l'étude de ces données simulées pour la reparamétrisation et 50000 itérations de l'algorithme, les résultats sont fournis par le tableau 3.2. Contrairement au cas précédent où les lois *a priori* étaient calées sur les véritables valeurs, la reparamétrisation ne demande pas d'initialisation *a priori*. Bien que plus éloignés des vraies valeurs ces résultats sont néanmoins très satisfaisants.

On voit également sur la figure 3.5 que les affectations sont généralement respectées. Respectivement, 97%, 95% et 93% des observations issues des composantes 1, 2 et 3 sont correctement affectées (ce qui correspond globalement à 5 observations mal allouées). Ici encore, le poids de la troisième composante est sous estimé.

L'effet du choix de ϵ est sans grande importance puisque des simulations avec $\epsilon = 0.5$ ou $\epsilon = 0.1$ donnent sensiblement les mêmes résultats (les graphes de convergences sont identiques à ceux de la figure 3.3 et donc omis dans ce document).

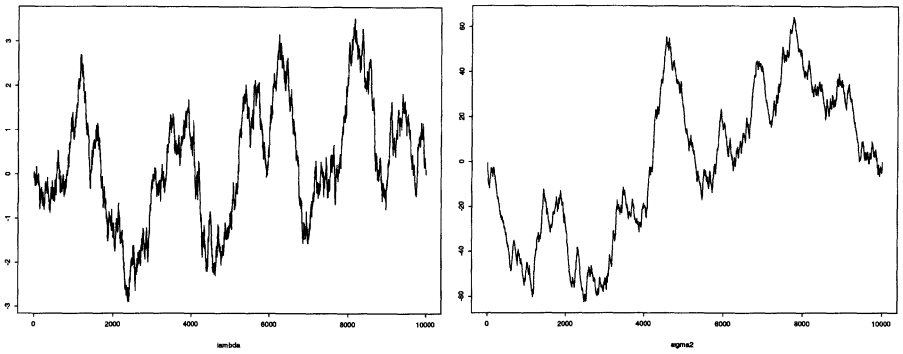

FIGURE 3.4
Contrôle de convergence par la méthode de Yu et Mykland (1994)

TABLEAU 3.2
Moyenne empirique (emp) et estimateur de Rao-Blackwell (RB) des paramètres du modèle pour $\epsilon = 1$

	μ	$\mu + \tau\theta_1$	$\mu + \tau\theta_2$	λ	τ	$\tau\sigma_1$	$\tau\sigma_2$	p_1	p_2	p_3
réel	1	3.5	6	0.2	1	1	1	0.34	0.23	0.43
emp	1.064	3.193	6.479	0.223	1.097	1.437	0.847	0.33	0.26	0.41
RB	1.064	3.199	6.482	0.223	1.098	—	—	0.33	0.26	0.41

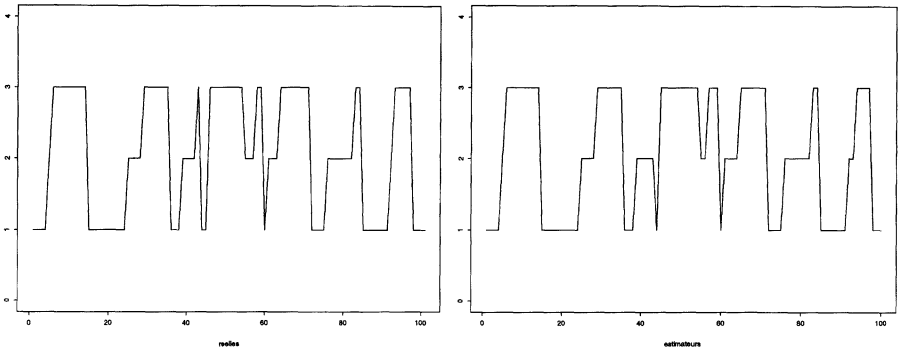

FIGURE 3.5
Chaîne des affectations réelles et simulées

On voit sur la figure 3.6 que la mélangeance est en revanche moins rapide que pour les lois *a priori* informatives.

Le contrôle binaire de Raftery et Lewis (1992) donnent des tailles d'échantillon t_0 et T plus importantes que dans le cas précédent. Ainsi, pour le paramètre λ ($\varepsilon = 0.01, s = 0.95$), on a : $(\eta, \rho, t_0, T) = (0.01; 0.009; 401; 5356)$, et une réévaluation des paramètres η et ρ donne à nouveau sensiblement les mêmes résultats.

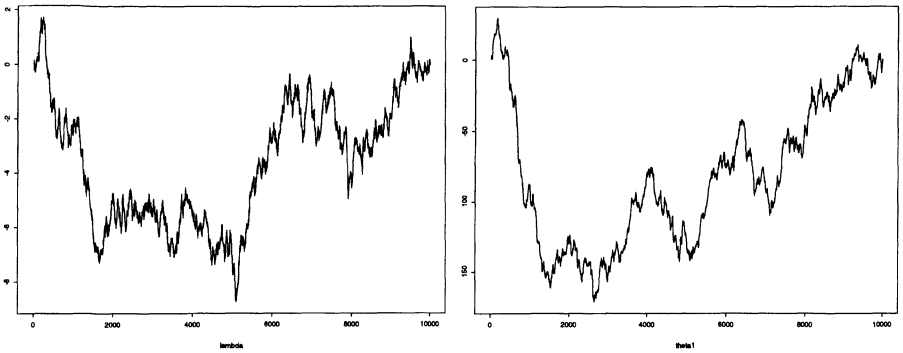

FIGURE 3.6
Contrôle de convergence par la méthode de Yu et Mykland (1994)

Dans un premier temps, nous avions considéré un mélange moins imbriqué, c'est-à-dire un mélange à 3 composantes nettement séparées (les modes des distributions sous-jacentes au mélange se détachant distinctement de l'histogramme des données). La méthode d'échantillonnage n'avait évidemment aucun mal à reconnaître les composantes. Les résultats des estimations étaient alors meilleurs dans le cas informatif, et similaires dans le cas de la reparamétrisation. La méthode reste efficace dans un cas de composantes plus imbriquées, comme peuvent en témoigner les résultats présentés.

Sommeil des nourrissons

On propose une modélisation par semi-chaînes de Markov cachées sur des signaux d'origine biologique. La variabilité du rythme cardiaque est un indicateur de l'état du système nerveux autonome, qui est utilisé en cardiologie (surveillance des sujets à risque de mort subite après un infarctus du myocarde par exemple). Le système nerveux autonome est subdivisé en deux branches, une branche sympathique, cardioaccélératrice c'est-à-dire responsable des fluctuations de basse fréquence du rythme cardiaque, et une branche parasympathique, cardiomodératrice c'est-à-dire à l'origine de la variabilité de haute fréquence. En sommeil calme, l'état du système nerveux autonome est à prédominance parasympathique, et il est à prédominance sympathique en sommeil agité. Les données que l'on considère sont constituées de deux séries d'observations issues d'un même sujet (Celeux et Clairambault, 1992). La première série (MSN1) représente les intervalles entre les battements cardiaques du nourrisson, la seconde série (MSN2) est la variabilité à haute fréquence du signal précédent. La figure 3.7 est la représentation des deux séries brutes normalisées. Ces tracés présentent une période de sommeil calme encadrée par deux périodes de sommeil agité. On cherche à reconnaître les deux stades du sommeil.

Pour deux états cachés, la matrice de transition est entièrement connue puisque

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

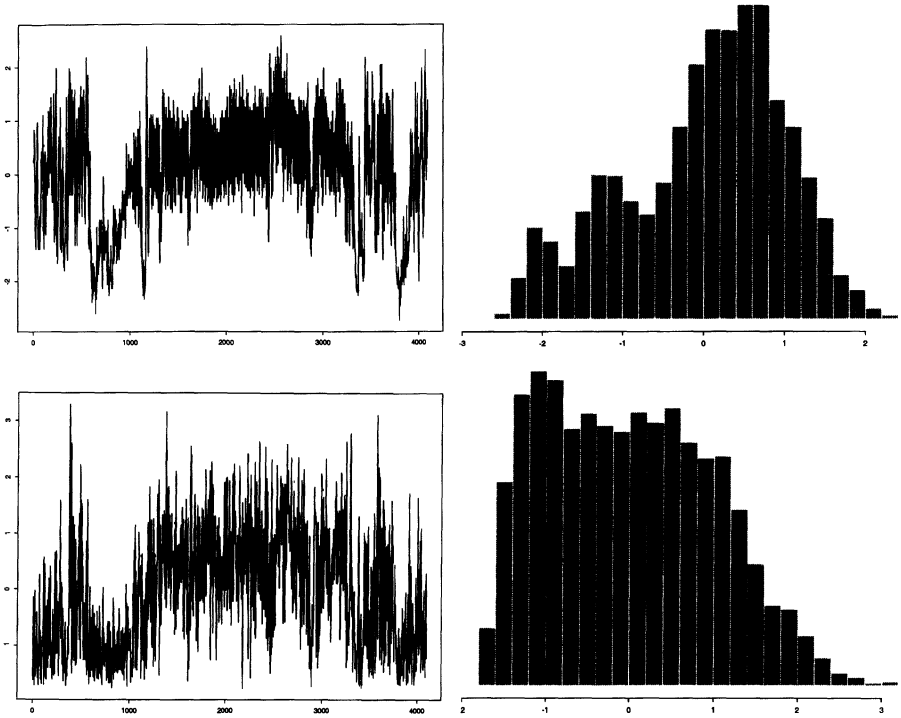

FIGURE 3.7
Représentation des séries et histogrammes du rythme cardiaque MSN1 (en haut), et de la variabilité à haute fréquence MSN2 (en bas)

Ne disposant pas d'information *a priori* sur les divers paramètres du modèle, la seule approche possible est l'estimation après reparamétrisation. Les résultats des estimations, pour 10000 itérations et avec $\epsilon = 1$, sont rassemblés dans les tableaux 3.3 et 3.4.

TABLEAU 3.3
Moyenne empirique (emp) et estimateur de Rao-Blackwell (RB) pour MSN1

	μ	$\mu + \tau\theta_1$	λ	τ	$\tau\sigma_1$
emp	-1.316	0.504	0.022	0.539	0.597
RB	-1.316	0.539	0.022	0.539	—

Les histogrammes des données MSN1 et MSN2 sont représentés en figure 3.8 avec leur densité estimée. Ces graphiques supposent une bonne adéquation du modéle à l'ensemble des données considéré, ainsi que des estimations satisfaisantes des paramètres.

TABLEAU 3.4
Moyenne empirique (emp) et estimateur de Rao-Blackwell (RB) pour MSN2

	μ	$\mu + \tau\theta_1$	λ	τ	$\tau\sigma_1$
emp	−0.918	0.706	0.047	0.424	0.696
RB	−0.918	0.707	0.047	0.424	—

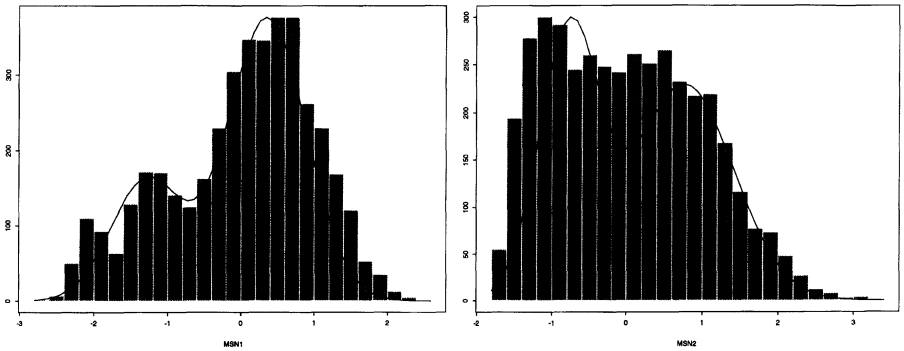

FIGURE 3.8
Échantillons MSN1 et MSN2 avec leur densité marginale correspondante

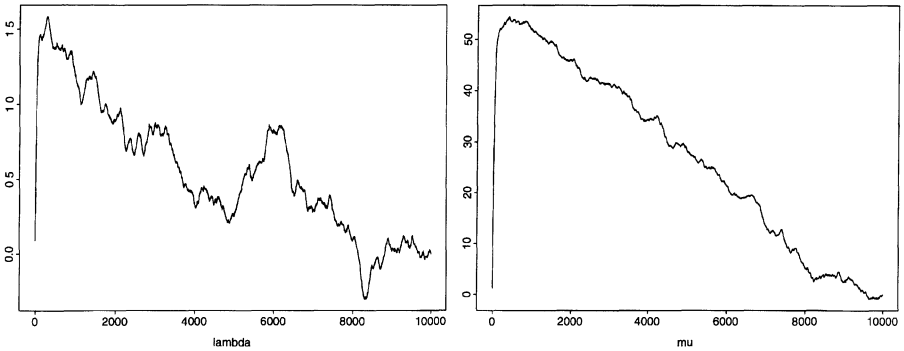

FIGURE 3.9
Contrôle de convergence par la méthode de Yu et Mykland (1994) pour MSN1

Les indicateurs de Yu et Mykland (1994) sont ici plus négatifs qu'en § 3.1 (voir figure 3.9).

La figure 3.10 décrit les affectations les plus fréquentes pour les deux jeux de données. On peut noter des différences à la marge et une relative cohérence sur les plages centrales. Par contre, la différence est notable en ce qui concerne les proportions d'allocation à chaque état, $p = 0.28$ (MSN1) contre $p = 0.43$ (MSN2) pour la première composante, et indique qu'une analyse jointe des deux flux serait souhaitable. Si l'on se réfère aux résultats de G. Celeux et J. Clairambault (1992), la

figure 3.10 montre une forte similitude à leur tentative d'identification par l'algorithme EM à la Gibbs d'une variable cachée contrôlant le rythme cardiaque dans les cas MSN1 et MSN2.

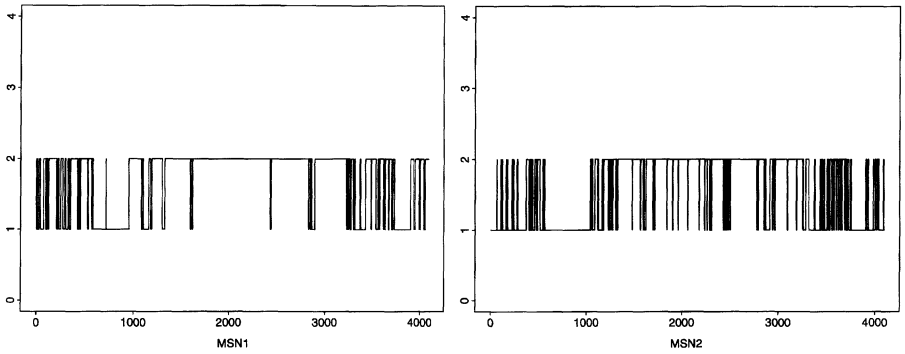

FIGURE 3.10
Chaîne des affectations simulées pour MSN1 et MSN2

Le contrôle binaire de Raftery et Lewis (1992) nous donne dans ce cas, pour le paramètre λ et pour les mêmes valeurs précédentes de ε et s : $(\eta, \rho, t_0, T)_{MSN1} = (0.04; 0.001; 3907; 24457)$, et $(\eta, \rho, t_0, T)_{MSN2} = (0.01; 0.004; 431; 2779)$.

Dans ce dernier exemple, malgré une relative faiblesse de la vitesse de convergence de l'algorithme (car étant dans un cas non informatif), les résultats satisfaisants des estimations des paramètres et des variables cachées, permettant ainsi de reconnaître les deux stades du sommeil chez le nourrisson, appuient l'utilisation de cette méthode d'approximation dans les cas de semi-chaînes de Markov cachées.

Remerciements : Ce travail a pu être effectué grâce au financement d'une bourse MRE. Je remercie sincèrement Christian Robert de m'avoir suggéré l'idée de ce travail, sa disponibilité et ses nombreux conseils ont été de précieux atouts. Les nombreuses discussions menées avec Anne Philippe ont aussi largement contribué à la rédaction de cet article.

Références

Cocozza-Thivent C., Guedon Y. (1990). Explicit state occupancy modelling by hidden semi-Markov models : application of Derin's scheme. *Computer Speech and Language* **4**, 167-192.

Celeux G., Clairambault J. (1992). Estimation des chaînes de Markov cachées : méthodes et problèmes. *Journées thématiques du CNRS (22-23 sept 1992), Approches Markoviennes en signal et images.*

Diebolt J., Robert C.P. (1994). Estimation of finite distributions through Bayesian sampling. *J. Royal Statist. Soc.* (Ser. B) **56**, 363-375.

Gelfand A., Smith A.F.M. (1990). Sampling based approaches to calculating marginal densities. *J. Amer. Statist. Assoc.* **85**, 398-409.

Geyer C.J. (1992). Practical Monte-Carlo Markov chains. *Stat. Science* **7**, 473-511.

Liu J.S., Wong W.H., Kong A. (1994). Covariance structure of the Gibbs sampler with applications to the comparison of estimators and sampling schemes. *Biometrika* **81**, 1, 24-40.

Mengersen K.L., Robert C.P. (1995). Reparametrisation issues in mixture modelling and their bearings on the Gibbs sampler. *Rapport technique CREST 9538*, Insee, Paris

Raftery A.E., Lewis S.M. (1992). How many iterations in the Gibbs sampler? *Bayesian Statistics* **4**, 763-773.

Robert C.P. (1992). *L'Analyse Statistique Bayésienne*. Economica, Paris.

Robert C.P., Celeux G., Diebolt J. (1993). Bayesian estimation of hidden Markov chains : a stochastic implementation. *Statistics and Probability Letters* **16**, 77-83.

Robert C.P. (1996). *Méthodes de Simulation en Statistique*. Economica, Paris (à paraître).

Soubiran C., Celeux G., Diebolt J., Robert C.P. (1991). Analyse de mélanges gaussiens pour de petits échantillons : Application à la cinématique stellaire. *Rev. Stat. Appl.* XXXIX **3**, 17-36.

Tanner M., Wong W. (1987). The calculation of posterior distributions. *J. Amer. Statist. Assoc.* **82**, 528-550.

Tierney L. (1991). Markov chains for exploring posterior distributions. *Computer Sciences : Proc. 23d Symp. Interface*, 563-570.

Tierney L. (1994). Markov chains for exploring posterior distributions. *Ann. of Stat.* **22**, 4, 1701-1762.

Yu B., Mykland P. (1994). Looking at Markov samplers through cusum path plots : a simple diagnostic idea. *Doc. de travail, Univ. de Berkeley, USA.*