Statistique II

M2 Radiophysique médicale, INSTN, 2023

Clément GAUCHY (clement.gauchy@cea.fr) Blog: clgch.github.io
CEA Saclay

Sommaire

Introduction

- Méthode EM (Expectation-Maximization) (proposée par Dempster en 1977) dans le cas où la mise en oeuvre du maximum de vraisemblance peut être complexe
- Exemple : données issues d'un mélange de gaussiennes
  - Soit un n-échantillon $(x_i)_{1\leq i\leq n}$ où chaque x_i est issu d'une loi $\mathcal{N}(\mu_j,\sigma_j^2)$ parmi m avec la probabilité α_j telle que $\sum_{j=1}^m \alpha_j = 1$ et pour tout j , $0\leq \alpha_j \leq 1$. En notant $\Theta = (\alpha_j,\mu_j,\sigma_j^2)_{1\leq j\leq m}$ les $3m$ paramètres inconnus, la densité de probabilité s'écrit :

$$p(x|\Theta) = \sum_{j=1}^{m} \frac{\alpha_j}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp -\frac{(x-\mu_j)^2}{2\sigma_j^2}$$

  - la log-vraisemblance à partir d'un n-échantillon $\mathcal{D}_n = (x_i)_{1\leq i\leq n}$

$$\ell(\Theta|\mathcal{D}_n) = \ln \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\Theta) = \sum_{i=1}^{n} \ln \left[\sum_{j=1}^{m} \frac{\alpha_j}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp -\frac{(x_i-\mu_j)^2}{2\sigma_j^2} \right]$$

  - Information manquante : on ne connait pas la loi (j parmi m) qui a généré la réalisation x_i
- L'estimation des paramètres Θ par maximum de vraisemblance est un problème complexe notamment dans le cas de la grande dimension (nombre m de lois, dimension des $x\in\mathbb{R}^d$).

Algorithme EM pour un mélange de lois (1)

- Variable aléatoire X distribuée selon un mélange (combinaison convexe) de lois :

$$p_\Theta(X) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j p_j(X;\theta_j) \text{ où } \Theta = (\alpha_j,\theta_j)_{1\le j\le m}, \sum_{j=1}^{m} \alpha_j = 1, \forall j \in \{1,\dots,m\}, 0 \le \alpha_j \le 1.$$

- Log vraisemblance d'un n-échantillon $\mathcal{D}_n = (x_i)_{1\le i\le n}$ (tirages i.i.d.)

$$\begin{aligned} \ell(\Theta|\mathcal{D}_n) &= \ln \prod_{i=1}^{n} p_\Theta(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \ln \sum_{j=1}^{m} \alpha_j p_j(x_i;\theta_j) \texttt{ difficile à optimiser} \end{aligned}$$

Algorithme EM pour un mélange de lois (1)

- Variable aléatoire X distribuée selon un mélange (combinaison convexe) de lois :

$$p_\Theta(X) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j p_j(X;\theta_j) \text{ où } \Theta = (\alpha_j, \theta_j)_{1\leq j\leq m}, \sum_{j=1}^{m} \alpha_j = 1, \forall j \in \{1,\dots,m\}, 0 \leq \alpha_j \leq 1.$$

- Log vraisemblance d'un n-échantillon $\mathcal{D}_n = (x_i)_{1\leq i\leq n}$ (tirages i.i.d.)

$$\begin{aligned} \ell(\Theta|\mathcal{D}_n) &= \ln \prod_{i=1}^{n} p_\Theta(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \ln \sum_{j=1}^{m} \alpha_j p_j(x_i;\theta_j) \ \texttt{difficile à optimiser} \end{aligned}$$

- Introduisons Z variable aléatoire discrète (*variable latente*) à valeurs dans $\{1,2,\dots,m\}$, définissant le rang de la loi qui a généré x :

$$\underbrace{p_\Theta(X, Z = j)}_{\texttt{loi jointe}} = \alpha_j p_j(X;\theta_j)$$

- Log-vraisemblance du n-échantillon $(x_i, z_i)_{1\leq i\leq n}$ (tirages i.i.d.)

$$\ell(\Theta|(x_i,z_i)_{1\leq i\leq n}) = \ln \prod_{i=1}^{n} p_\Theta(X = x_i, Z = z_i) = \sum_i \ln \alpha_{z_i} p_{z_i}(x_i;\theta_{z_i})$$

- La log-vraisemblance ne peut pas être évaluée (on ne connait pas z_i !).

Algorithme EM pour un mélange de lois (2)

- Dans l'EM, la log-vraisemblance $\ell(\Theta|(x_i, z_i)_{1\leq i\leq n})$ est remplacée par son espérance conditionnelle aux observations x_i.
- Espérance de la log-vraisemblance est calculée par rapport à la variable aléatoire Z de probabilité $q_\Theta(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})$ conditonnelle à l'observation x et à la valeur courante des paramètres Θ

$$\ell(\Theta|(x_i, z_i)_{1\leq i\leq n}) \to \ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) := \mathbb{E}_{Z\sim q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})}[\ell(\Theta|Z, (x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k)]$$

- Algorithme itératif : Θ_0 (initialisation) puis calcul des $\Theta_k = (\alpha_j^{(k)}, \theta_j^{(k)})_{1\leq j\leq m}$ pour $k = 1, 2, \ldots$ par
- Première étape : Espérance

$$\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) = \mathbb{E}_{Z\sim q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})}[\ell(\Theta|Z, (x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k)]$$

  - la loi $q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})$ est conditionnelle par rapport aux observations $(x_i)_{1\leq i\leq n}$ et en supposant la loi de mélange définie par les paramètres Θ_k

Algorithme EM pour un mélange de lois (2)

- Dans l'EM, la log-vraisemblance $\ell(\Theta|(x_i, z_i)_{1\leq i\leq n})$ est remplacée par son espérance conditionnelle aux observations x_i.
- Espérance de la log-vraisemblance est calculée par rapport à la variable aléatoire Z de probabilité $q_\Theta(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})$ conditonnelle à l'observation x et à la valeur courante des paramètres Θ

$$\ell(\Theta|(x_i, z_i)_{1\leq i\leq n}) \to \ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) := \mathbb{E}_{Z\sim q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})}[\ell(\Theta|Z, (x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k)]$$

- Algorithme itératif : Θ_0 (initialisation) puis calcul des $\Theta_k = (\alpha_j^{(k)}, \theta_j^{(k)})_{1\leq j\leq m}$ pour $k = 1, 2, \ldots$ par
- Première étape : Espérance

$$\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) = \mathbb{E}_{Z\sim q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})}[\ell(\Theta|Z, (x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k)]$$

  - la loi $q_{\Theta_k}(Z|(x_i)_{1\leq i\leq n})$ est conditionnelle par rapport aux observations $(x_i)_{1\leq i\leq n}$ et en supposant la loi de mélange définie par les paramètres Θ_k
- Seconde étape : Maximisation

$$\Theta_{k+1} = \arg\max_{\Theta} \ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}, \Theta_k)$$

  - la valeur des paramètres à l'itération $k+1$ est la valeur de Θ qui maximise $\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}, \Theta_k)$
- Avantage: Propriété théorique $\ell(\Theta_{k+1}|(x_i)_{1\leq i\leq n}) \geq \ell(\Theta_k|(x_i)_{1\leq i\leq n}) \to$ on maximise la log-vraisemblance conditionnellement aux observations $(x_i)_{1\leq i\leq n}$.
- Incovénients: Minima locaux $\to$ solution numérique dépend de la condition initiale Θ_0 des paramètres

Algorithme EM pour le mélange de Gaussiennes (1)

- La probabilité conditionnelle $q_\Theta(Z|X)$ s'obtient par la règle classique de Bayes

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A,B)}{\mathbb{P}(B)} \Rightarrow q_\Theta(Z|X) = \frac{p_\Theta(Z,X)}{p_\Theta(X)}$$

- Cas du mélange de m Gaussiennes de paramètres $\Theta = (\alpha_j, \mu_j, \sigma_j^2)_{1\leq j\leq m}$
- A l'étape k, les paramètres Θ_k sont connus :

$$\begin{aligned}
q_{\Theta_k}(Z=j|X=x) &= \frac{\alpha_j^{(k)} p_j(X=x|\mu_j^{(k)}, (\sigma^2)_j^{(k)})}{\sum_{s=1}^m \alpha_s^{(k)} p_s(X=x|\mu_s^{(k)}, (\sigma^2)_s^{(k)})} \\
\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m q_{\Theta_k}(Z=j|X=x_i) \ln(\alpha_j p_j(x_i|\theta_j)) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m q_{\Theta_k}(Z=j|X=x_i) \ln \frac{\alpha_j}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp[-\frac{(x_i-\mu_j)^2}{2\sigma_j^2}] \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m q_{\Theta_k}(Z=j|X=x_i)[\ln(\alpha_j) - \frac{\ln\sigma_j^2}{2} - \frac{(x_i-\mu_j)^2}{2\sigma_j^2} - \frac{n}{2}\ln(2\pi)]
\end{aligned}$$

- Rappel de EM : à l'itération $k+1$, Θ_{k+1} est obtenu en maximisant $\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}, \Theta_k)$:

$$\texttt{Valeurs qui annulent le gradient} \rightarrow \frac{\partial}{\partial\Theta}\ell_c(\Theta|(x_i)_{1\leq i\leq n}; \Theta_k) = 0 \ \texttt{pour}\ \Theta = \Theta_{k+1}$$

Algorithme EM pour le mélange de Gaussiennes (2)

Solution analytique pour $1 \leq j \leq m$

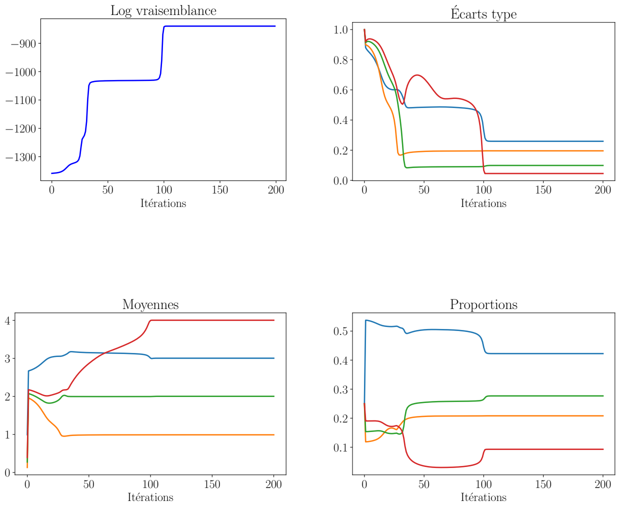
$$
\begin{aligned}
\Theta_k &= (\alpha_j^{(k)}, \mu_j^{(k)}, (\sigma^2)_j^{(k)})_{1 \leq j \leq m} \\
\alpha_j^{(k+1)} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} q_{\Theta_k}(Z = j | X = x_i) \\
\mu_j^{(k+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i q_{\Theta_k}(Z = j | X = x_i)}{\sum_{i=1}^{n} q_{\Theta_k}(Z = j | X = x_i)} \\
(\sigma^2)_j^{(k+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_j^{(k+1)})^2 q_{\Theta_k}(Z = j | X = x_i)}{\sum_{i=1}^{n} q_{\Theta_k}(Z = j | X = x_i)}
\end{aligned}
$$

Exemple numérique

Exemple d'un mélange de 4 Gaussiennes

$$
\begin{aligned}
X \quad \sim \quad & 0.2 \times \mathcal{N}(1, 0.2^2) \\
+ \quad & 0.3 \times \mathcal{N}(2, 0.1^2) \\
+ \quad & 0.4 \times \mathcal{N}(3, 0.25^2) \\
+ \quad & 0.1 \times \mathcal{N}(4, 0.05^2)
\end{aligned}
$$

Application de l'algorithme EM sur un échantillon de taille 1000, initialisation des moyennes à 0, écarts type à 1 et des poids uniformes $\alpha_j = 0.25$



Sommaire

Algorithme EM pour la Tomographie par Emission de Positons

- Images réalisées à partir de la détection de photons issus de l'annihilation de positons émis par un produit radioactif injecté au patient.
- Sources de photons $1 \leq j \leq m$, loi de Poisson de paramètre λ_j : $X_j \sim \mathcal{P}(\lambda_j)$. X_j est le nombre total de photons émis par la source j.
- Capteurs des photons, $1 \leq i \leq m$ et p_{ij} = probabilité que le capteur i détecte le photon j avec $\sum_{j=1}^{m} p_{ij} = 1$ $\sum_{i=1}^{n} p_{ij} = 1$ si chaque photon est détecté par un et un seul capteur.
- N_{ij} : Nombre de photons émis par la source j puis détectés par le capteur i :

$$(N_{ij}|X_j) \sim \mathcal{B}(X_j, p_{ij})$$

$\hookrightarrow$ Loi conditionelle $N_{ij}|X_j$ binomiale

- Nombre de photons émis par toutes les sources puis détectés par le capteur i

$$Y_i = \sum_{j=1}^{m} N_{ij}$$

Algorithme EM pour la Tomographie par Emission de Positons

- Images réalisées à partir de la détection de photons issus de l'annihilation de positons émis par un produit radioactif injecté au patient.
- Sources de photons $1 \leq j \leq m$, loi de Poisson de paramètre λ_j : $X_j \sim \mathcal{P}(\lambda_j)$. X_j est le nombre total de photons émis par la source j.
- Capteurs des photons, $1 \leq i \leq m$ et p_{ij} = probabilité que le capteur i détecte le photon j avec $\sum_{j=1}^{m} p_{ij} = 1$ $\sum_{i=1}^{n} p_{ij} = 1$ si chaque photon est détecté par un et un seul capteur.
- N_{ij} : Nombre de photons émis par la source j puis détectés par le capteur i :

$$(N_{ij}|X_j) \sim \mathcal{B}(X_j, p_{ij})$$

$\hookrightarrow$ Loi conditionelle $N_{ij}|X_j$ binomiale

- Nombre de photons émis par toutes les sources puis détectés par le capteur i

$$Y_i = \sum_{j=1}^{m} N_{ij}$$

- Objectif : estimer pour chaque source j le nombre moyen d'émission de photon $\lambda_j = \mathbb{E}(X_j)$ à partir des seules mesures Y_i sans connaissance des N_{ij}. Question: quel est le lien avec le problème du modèle de mélange de Gaussiennes ? (Car il y en a un !)
- On suppose les proportions p_{ij} connues $\rightarrow$ algorithme MLEM : Maximum Likelihood Expectation Maximization. Matrice P de taille $(n \times m)$, d'éléments p_{ij} :

`Résolution d'un problème inverse` $Y = PX$ `où` X `est inconnu`

- En TEP, plus d'inconnues que d'équations ($m > n$) et de plus les mesures sont bruitées

Modélisation du problème

- Nombre de photons $\rightarrow$ loi de Poisson indépendantes $X_j \sim \mathcal{P}(\lambda_j)$, $1 \leq j \leq m$
- Capteurs $1 \leq i \leq n$: $N_{ij} \sim \mathcal{P}(p_{ij}\lambda_j)$ (*pas trivial mais cela peut se démontrer*). ⚠Ce n'est pas pareil que $N_{ij} = p_{ij}X_j$!!! (Pourquoi ?)

$$\mathbb{P}(N_{ij} = n) = e^{-p_{ij}\lambda_j} \frac{(\lambda_j p_{ij})^n}{n!}$$

- Données manquantes (n_{ij}). Seules données disponibles $y_i = \sum_j n_{ij}$. La loi de Poisson est stable par sommation: $\sum_j N_{ij} \sim \mathcal{P}\left(\sum_j p_{ij}\lambda_j\right)$. On retombe sur un problème de mélanges de lois, cette fois ci de lois de Poisson.
- En posant $\mathbf{y} := (y_i)_{1 \leq i \leq n}$, la log vraisemblance s'écrit:

$$\ell(\Lambda|\mathbf{y}) = \ln \prod_{i=1}^{n} e^{-\sum_j p_{ij}\lambda_j} \frac{(\sum_j \lambda_j)^{y_i}}{y_i!}$$

Le MLE $\widehat{\Lambda}_n = (\widehat{\lambda}_{j,n})_{1 \leq j \leq m}$ doit vérifier:

$$\sum_{i=1}^{n} p_{ij} = \sum_{i=1}^{n} \frac{p_{ij} y_i}{\sum_{s=1}^{m} p_{is}\widehat{\lambda}_{s,n}}$$

Algorithme MLEM (1)

- Log-vraisemblance des $\Lambda := (\lambda_j)$ conditionnellement aux réalisations $N := (n_{ij})$:

$$\ell(\Lambda|N) \quad = \quad \ln \prod_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{m} e^{-p_{ij}\lambda_j} \frac{(\lambda_j p_{ij})^{N_{ij}}}{N_{ij}!} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} (-p_{ij}\lambda_j + N_{ij} \ln(p_{ij}\lambda_j) - \ln(N_{ij}!))$$

- On applique le principe EM en calculant l'espérance de la vraisemblance conditionnellement à un jeu de paramètres $\Lambda^{(k)}$ fixé et aux seules mesures disponibles $\mathbf{y}$:

$$\begin{aligned} \ell_c(\Lambda|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)}) &= \mathbb{E}_{N \sim p(N|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)})} \ell(\Lambda|N, \mathbf{y}, \Lambda^{(k)}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \mathbb{E}_{N_{ij}} [-p_{ij}\lambda_j + N_{ij} \ln(p_{ij}\lambda_j) - \ln(N_{ij}!)|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)}] \end{aligned}$$

Algorithme MLEM (2)

- La valeur optimale de λ_j est obtenue en annulant le gradient de la vraisemblance conditionnellement (en simplifiant la notation de l'espérance)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \lambda_j} \ell_c(\Lambda|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)}) &= \frac{\partial}{\partial \lambda_j} \sum_{i=1}^{n} \sum_{s=1}^{m} \mathbb{E}_{N_{ij}} [-p_{is}\lambda_s + N_{is} \ln(p_{is}\lambda_s) - \ln(N_{is}!)|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)}] \\
&= \frac{\partial}{\partial \lambda_j} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{N_{ij}} [-p_{ij}\lambda_j + N_{ij} \ln(p_{ij}\lambda_j) - \ln(N_{ij}!)|\mathbf{y}, \Lambda^{(k)}] \\
&= \sum_{i=1}^{n} -p_{ij} + \mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)}) \frac{\partial \ln(p_{ij}\lambda_j)}{\partial \lambda_j} \\
&= \sum_{i=1}^{n} -p_{ij} + \mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)}) \frac{1}{\lambda_j} \\
&= \sum_{i=1}^{n} -p_{ij} + \frac{1}{\lambda_j} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)})
\end{aligned}
$$

- Le gradient s'annule pour la valeur :

$$
\lambda_j^{(k+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)})}{\sum_{i=1}^{n} p_{ij}}
$$

- Il *suffit* donc de calculer les n moyennes conditionnelles $\mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)})$.

Algorithme MLEM (3)

Lemme (Calcul de la loi $N_{ij}|y_i, \Lambda$)

Soient 2 lois de Poisson X_1, X_2 indépentantes de paramètres respectifs λ_1, λ_2. La loi conditionnelle $X_1|X_1 + X_2$ est la loi binomiale $\mathcal{B}(X_1 + X_2, \lambda_1/(\lambda_1 + \lambda_2))$.

- A partir de Y_i somme de m lois de Poisson N_{ij} de paramètres $p_{ij}\lambda_j$, on en déduit :

$$N_{ij}|y_i, \Lambda \sim \mathcal{B}\left(y_i, \frac{p_{ij}\lambda_j}{\sum_{s=1}^m p_{is}\lambda_s}\right)$$

- La moyenne d'une loi binomiale $\mathcal{B}(n, p)$ étant égale à np, on obtient :

$$\mathbb{E}(N_{ij}|y_i, \Lambda^{(k)}) = \frac{y_i p_{ij}\lambda_j^{(k)}}{\sum_{s=1}^m p_{is}\lambda_s^{(k)}}$$

- D'où l'algorithme itératif MLEM pour le calcul des paramètres λ_j :

$$\boxed{\lambda_j^{(k+1)} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n p_{ij}} \sum_{i=1}^n \frac{y_i p_{ij}\lambda_j^{(k)}}{\sum_{s=1}^m p_{is}\lambda_s^{(k)}} = \frac{\lambda_j^{(k)}}{\sum_{i=1}^n p_{ij}} \sum_{i=1}^n \frac{y_i p_{ij}}{\sum_{s=1}^m p_{is}\lambda_s^{(k)}}}$$

Analyse de l'algorithme MLEM

- Rappel de l'algorithme MLEM

$$\lambda_j^{(k+1)} = \frac{\lambda_j^{(k)}}{\sum_{i=1}^n p_{ij}} \sum_{i=1}^n \frac{y_i p_{ij}}{\sum_{s=1}^m p_{is} \lambda_s^{(k)}}$$

- Vérification des points fixes $\lambda_j^{(k+1)} = \lambda_j^{(k)}$ (hyp. $\lambda_j \neq 0$) :

$$\lambda_j = \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^n p_{ij}} \sum_{i=1}^n \frac{y_i p_{ij}}{\sum_{s=1}^m p_{ij} \lambda_s} \Rightarrow \sum_{i=1}^n p_{ij} = \sum_{i=1}^n p_{ij} \frac{y_i}{\sum_{s=1}^m p_{is} \lambda_s}$$

- Mais on vérifie que toute valeur $\boldsymbol{\lambda}'$ telle que $P\boldsymbol{\lambda}' = P\boldsymbol{\lambda}$ est également solution de MLEM

☹ Non unicité : plusieurs solutions si le nombre lignes m de la matrice P (nombre de capteurs) est inférieur au nombre de ses colonnes (nombre de sources)

☹ Convergence assez lente.

Sommaire

Méthodes Bayésiennes

- Thomas Bayes (XVIIIéme siècle), mathématicien britannique, pasteur connu par son théorème

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A) \times \mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)}, \quad \texttt{noter la symétrie}$$

- $\mathbb{P}(A)$ probabilité *a priori* de A
- $\mathbb{P}(B|A)$ la vraisemblance, probabilité conditionnelle de B sachant A
- $\mathbb{P}(B)$ probabilité *a priori* de B, loi marginale de B
- $\mathbb{P}(A|B)$ probabilité *a posteriori* car postérieure à la connaissance de B, probabilité conditionnelle de A sachant B

"Oubli de la fréquence de base"

- Dans une population, 1 personne sur 1000 est malade.
- Si la personne est malade, le test de dépistage est positif dans 99 cas sur 100 et si elle ne l'est pas il est positif dans 2 cas sur 1000.
- Quelle est la probabilité que la personne soit réellement malade lorsque le test est positif ?

"Oubli de la fréquence de base"

- Dans une population, 1 personne sur 1000 est malade.
- Si la personne est malade, le test de dépistage est positif dans 99 cas sur 100 et si elle ne l'est pas il est positif dans 2 cas sur 1000.
- Quelle est la probabilité que la personne soit réellement malade lorsque le test est positif ?
- Notons P l'évènement "le test positif" et M "la personne est malade"

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(M|P) &= \frac{\mathbb{P}(P|M) \times \mathbb{P}(M)}{\mathbb{P}(P)} \\
&= \frac{\mathbb{P}(P|M) \times \mathbb{P}(M)}{\mathbb{P}(P|M)\mathbb{P}(M) + \mathbb{P}(P|\bar{M})\mathbb{P}(\bar{M})} \\
&= \frac{0.99 \times 0.001}{0.99 \times 0.001 + 0.002 \times 0.999} \simeq \frac{1}{3}
\end{aligned}$$

- Conclusion: les données du problème laissaient supposer un test plus fiable. Biais cognitif appellé "l'oubli de la fréquence de base" ou "négligence de la taille de l'échantillon"

Interprétation des probabilités

- Probabilités objectives
  - pour décrire le hasard physique, la variabilité naturelle de certains phénomènes : jeux de roulettes, atomes radioactifs
  - probabilité vu comme le taux du nombre d'occurences d'un évèmement particulier parmi l'ensemble des évènements
  - modélisation des incertitudes aléatoires : simulation des signaux sismiques
- Probabilités subjectives
  - pour décrire un degré de croyance sur une loi physique ou la valeur particulière d'un paramètre d'un modéle physique : existence du boson de Higgs
  - probabilité comme quantification du degré de certitude d'une proposition
  - modélisation des incertitudes épistémiques : en neutronique, représentation de la valeur de la section efficace d'une interaction entre neutron/noyau
- Méthodes Bayésiennes sont fondées sur l'interprétation subjective
  - dans l'exemple sur le test de dépistage, la personne est soit malade ou non
  - la probabilité $\mathbb{P}(M|P)$ quantifie le degré de croyance sur la proposition "la personne est malade lorsque le test est positif"

En statistique fréquentiste...

- Le paramètre θ est une grandeur à estimer à partir des données observées X
- Seul les données X sont aléatoires
- Les principaux objectifs sont:
-
  - Proposer un estimateur ponctuel $\widehat{\theta}$ de θ;
  - Construire un intervalle de confiance pour quantifier l'incertitude sur θ
  - Faire des test d'hypothèse sur θ (Rendez vous le 30 Novembre !)

Notations et définitions

- Soit X une variable aléatoire dont la distribution de probabilités dépend de paramètre(s) θ
- Notre a priori sur ce paramètre est représentée par une variable aléatoire θ de densité $\pi(\theta)$ ⚠ θ désigne à la fois le paramètre à estimer et la variable aléatoire le représentant !
- La loi *a priori* $\pi(\theta)$ traduit le degré de méconnaissance sur la valeur réelle du coefficient θ et non pas sa variabilité
- On se donne une loi conditionnelle de X sachant θ de densité de probabilité $p(X|\theta)$
- Á partir de la règle de Bayes, on obtient la loi *a posteriori* sur θ noté $\pi(\theta|X)$

$$\pi(\theta|X) = \frac{p(X|\theta) \times \pi(\theta)}{p(X)}$$

- Le terme $p(X)$ (loi marginale (ou évidence) de X) est un facteur de normalisation qui ne dépend pas du paramètre θ

$$p(x) = \int p(X = x|\theta)\pi(\theta)d\theta$$

Et en statistique bayésienne

- Le paramètre θ est empreint d'incertitudes
- Le paramètre θ est une variable aléatoire
- Une distribution de probabilité sur θ, la loi *a priori*, est assignée à θ **avant d'observer les données** X.
-
  - La loi a priori décrit notre état des connaissances sur θ $\implies$ Vision subjective de la probabilité
  - Définition conditionelle à un état des connaissances ! $\implies$ calcul de la loi *a posteriori*

Régle de Bayes en statistique

Soit un *n*-échantillon $(X_i = x_i)_{1 \leq i \leq n}$ i.i.d tel que $X_1 \sim p(\cdot|\theta)$.

La vraisemblance s'écrit de la même façon dans le cadre Bayésien:

$$\mathcal{L}(x_1, \ldots, x_n|\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(X = x_i|\theta)$$

La loi *a posteriori* s'écrit:

$$\pi(\theta|X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n) = \frac{\pi(\theta)\mathcal{L}(\theta|x_1, \ldots, x_n)}{p(X)} = \frac{\pi(\theta)\prod_{i=1}^{n} p(X = x_i|\theta)}{p(X)}$$

<u>Exercice</u>: Que se passe t'il quand on observe une nouvelle donnée X_{n+1} et qu'on utilise comme loi a priori $\pi(\theta|X_1, \ldots, X_n)$?

Loi a posteriori non normalisée

- En général, compte tenu de la difficulté du calcul de la densité marginale $p(x)$, la loi *a posteriori* est traitée à partir de la forme non normalisée :

$$\boxed{\underbrace{\pi(\theta|X)}_{\texttt{densité } a\ posteriori} \propto \underbrace{p(X|\theta)}_{\texttt{vraisemblance}} \times \underbrace{\pi(\theta)}_{\texttt{densité } a\ priori}}$$

  - On étudiera l'algorithme de Métropolis-Hasting (méthode MCMC : Markov Chain Monte Carlo) permettant de simuler (échantillonner) la loi *a posteriori* à partir de sa forme non normalisée

- A partir de la loi *a posteriori*, estimation Bayésienne du paramètre θ par
  - la moyenne *a posteriori* $\mathbb{E}[\theta|X] = \int \theta \times \pi(\theta|X)d\theta$
  - le maximum *a posteriori* (MAP) $\arg\max_\theta \pi(\theta|X)$ (valeur de θ qui maximise la densité *a posteriori*)

- Estimation par domaine (intervalle si θ est scalaire) de niveau de confiance α

$$\mathbb{P}(\theta \in I|X) = \int_I \pi(\theta|X)d\theta = \alpha$$

- Lorsqu'on retient un intervalle centré sur la médiane (cas où θ est scalaire)

$$I_{\texttt{centré}} = [z_{(1-\alpha)/2}, z_{(1+\alpha)/2}]$$

où $z_{(1-\alpha)/2}, z_{(1+\alpha)/2}$ sont les quantiles de la loi *a posteriori* $\pi(\theta|X)$. On parle d'intervalle de crédibilité

- ⚠Ne pas confondre avec les intervalles de confiance !

Estimateurs Bayésien

Qu'est ce qu'un estimateur dans le paradigme Bayésien ? $\Longrightarrow$ il est associé à une fonction de coût.

Estimateurs Bayésien

Qu'est ce qu'un estimateur dans le paradigme Bayésien ? $\Longrightarrow$ il est associé à une fonction de coût.

Un estimateur de θ est une fonction des données $\widehat{\theta}(X)$. Pour quantifier la qualité de l'estimation on associe une fonction de coût $L(\theta, \widehat{\theta}(X))$.

Estimateurs Bayésien

Qu'est ce qu'un estimateur dans le paradigme Bayésien ? $\Longrightarrow$ il est associé à une fonction de coût.

Un estimateur de θ est une fonction des données $\widehat{\theta}(X)$. Pour quantifier la qualité de l'estimation on associe une fonction de coût $L(\theta, \widehat{\theta}(X))$.

Le risque *a posteriori* est la moyenne *a posteriori* de la fonction de coût

$$\rho(\pi, \widehat{\theta}|X) = \mathbb{E}_{\theta \sim \pi(\cdot|X)}[L(\theta, \widehat{\theta}(X))|X]$$

Estimateurs Bayésien

Qu'est ce qu'un estimateur dans le paradigme Bayésien ? $\Longrightarrow$ il est associé à une fonction de coût.

Un estimateur de θ est une fonction des données $\widehat{\theta}(X)$. Pour quantifier la qualité de l'estimation on associe une fonction de coût $L(\theta, \widehat{\theta}(X))$.

Le risque *a posteriori* est la moyenne *a posteriori* de la fonction de coût

$$\rho(\pi, \widehat{\theta}|X) = \mathbb{E}_{\theta \sim \pi(\cdot|X)}[L(\theta, \widehat{\theta}(X))|X]$$

Version "facile": L'estimateur de Bayes associé à la loi a priori π et à la fonction de coût L est l'estimateur minimisant le risque a posteriori:

$$\forall x \in \mathcal{X},\ \widehat{\theta}_{\mathrm{Bayes}}(X) = \underset{\widehat{\theta}(x)}{\operatorname{argmin}}\, \rho(\pi, \widehat{\theta}(x))$$

Lien avec la théorie de la décision.

Estimateurs Bayésien: exemples

L'estimateur de Bayes associé à la loi a priori π et à la fonction de coût quadratique $L(\theta, \widehat{\theta}) = (\theta - \widehat{\theta})^2$ est la moyenne a posteriori:

$$\widehat{\theta}_{\mathrm{Moy}} = \mathbb{E}_{\theta}[\theta | X]$$

L'estimateur de Bayes associé à la loi a priori π et à la fonction de coût L^1 $L(\theta, \widehat{\theta}) = |\theta - \widehat{\theta}|$ est la médiane a posteriori

Pour une fonction de coût quelconque, l'estimateur de Bayes se détermine par simulation Monte-Carlo (cf. le cours du 30 Octobre)

Cas particulier du maximum a posteriori (MAP)

Soit un n-échantillon $\mathcal{D} = (X_i)_{1 \leq i \leq n}$ i.i.d. de loi $p(.|\theta)$ et avec $\theta \sim \pi$.

Le MAP est définit par:

$$\widehat{\theta}_{\mathrm{MAP}} = \operatorname{argmax} p(\theta|\mathcal{D}) = \operatorname{argmax} p(\mathcal{D}|\theta)\pi(\theta)$$

Le MAP ne dépend pas de la constante de normalisation !

$$\widehat{\theta}_{\mathrm{MAP}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \log p(X_i|\theta)}_{\texttt{log vraisemblance}} + \log \pi(\theta)$$

Le terme $\log \pi(\theta)$ peut s'interpréter comme une régularisation de la log vraisemblance

Paramètre d'une loi de Bernoulli

- Estimation du paramètre θ d'une loi de Bernoulli (jeu de pile/face)

$$X \in \{0,1\}, \quad \mathbb{P}(X=x) = \theta^x (1-\theta)^{(1-x)}$$

- On dispose d'un n-échantillon $\mathcal{D} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ issu de n tirages indépendants de X

$$p(\mathcal{D}|\theta) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(X_i = x_i|\theta) = \prod_{i=1}^n \theta^{x_i}(1-\theta)^{1-x_i} = \underbrace{\theta^s(1-\theta)^{n-s}}_{\propto \texttt{ loi binomiale}}, \ \text{où } \ s = \sum_{i=1}^n x_i$$

- Modélisation *a priori* sur θ par une loi beta dont la densité s'exprime en fonction de 2 paramètres (a, b) positifs

$$\pi(\theta; a, b) = \frac{1}{B(a,b)} \theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1} \mathbf{1}_{[0,1]}(\theta) \ \text{où } \ B = \int_0^1 u^{a-1}(1-u)^{b-1} du \texttt{(fonction beta)}$$

- D'où la loi *a posteriori*

$$\pi(\theta|\mathcal{D}) \propto p(\mathcal{D}|\theta) \times \pi(\theta) = \theta^{a+s-1}(1-\theta)^{b+n-s-1} \times 1_{[0,1]}(\theta)$$

- La loi *a posteriori* est donc une loi beta de paramètres $a+s$ et $b+n-s$
- a et b peuvent s'interpréter comme un nombre "virtuel" de pile ou face. $\rightarrow$ La loi *a posteriori* appartient à la même famille que la loi *a priori*. On dit que les deux lois sont *conjugués*.

Paramètre d'une loi de Bernoulli (suite)

- La loi *a posteriori* de θ s'exprime donc conditionnellement à $S(X_1, \ldots, X_n) = \sum_{i=1}^n x_i$

$$\underbrace{\pi(\theta|\mathcal{D}) = \pi(\theta|S(X_1, \ldots, X_n) = s)}_{S(X_1,\ldots,X_n)\ \texttt{statistique exhaustive}} = \frac{1}{B(a+s-1, b+n-s-1)}\theta^{a+s-1}(1-\theta)^{b+n-s-1}\mathbf{1}_{[0,1]}(\theta)$$

- La moyenne d'une loi bêta(a, b) est $a/(a+b)$ et son mode est $(a-1)/(a+b-2)$ pour $a > 0, b > 0$
- Estimations Bayésiennes de θ par:

l'espérance *a posteriori* $\hat{\theta}_{\mathrm{EP}} = \frac{a+s}{a+b+n}$. On retrouve l'estimateur de la moyenne empirique pour le cas limite $a = b = 0$!

le mode *a posteriori* : $\hat{\theta}_{\mathrm{MAP}} = \frac{a+s-1}{a+b+n-2}$

Paramètre d'une loi de Poisson

- Loi de Poisson de paramètre $\lambda > 0$ notée $X \sim \mathcal{P}(\lambda)$:

$$\mathbb{P}(X = k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}, \quad k \in \mathbb{N}$$

- Calcul de la vraisemblance à partir d'un n-échantillon $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ (i.i.d.)

$$f(\mathbf{x}|\lambda) = \prod_{i=1}^{n} e^{-\lambda} \frac{\lambda^{x_i}}{x_i!} = e^{-n\lambda} \times \lambda^{\sum_{i=1}^{n} x_i} \times \frac{1}{\prod_{i=1}^{n} x_i!}$$

- La statistique $S = \sum X_i$ est exhaustive: factorisation de $f(\mathbf{x}|\lambda) = g(\lambda, s)h(\mathbf{x})$
- Estimation par maximum de vraisemblance :

$$\hat{\lambda}_{\texttt{MV}}(\mathbf{x}) = \hat{\lambda}_{\texttt{MV}}(s) = \arg\max_{\lambda} f(s|\lambda) = \arg\max_{\lambda} e^{-n\lambda} \lambda^{s} = \frac{s}{n}$$

Paramètre d'une loi de Poisson (suite)

- Estimation Bayésienne en postulant une loi *a priori* de type Gamma $\Gamma(\alpha > 0, \beta > 0)$ de densité

$$f(x;\alpha,\beta) = x^{\alpha-1}e^{-\beta x} \times \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)}, \quad x > 0$$

- Calcul de la loi *a posteriori* avec $s = \sum_{i=1}^n x_i$:

$$\begin{aligned} \pi(\lambda|s) &\propto f(s|\lambda) \times \pi(\lambda) \\ &\propto e^{-n\lambda}\lambda^s \times \lambda^{\alpha-1}e^{-\beta\lambda} \\ &\propto \lambda^{s+\alpha-1}e^{-\lambda(n+\beta)} \\ &\propto \texttt{densité de la loi } \Gamma(\alpha+s, \beta+n) \end{aligned}$$

- La moyenne d'une loi $\Gamma(\alpha, \beta)$ est α/β et son mode est $(\alpha-1)/\beta$ pour $\alpha > 1, \beta > 0$.
- Estimations Bayésiennes de λ par
  - l'espérance *a posteriori* $\hat{\lambda}_{\mathtt{EP}}(s) = \frac{\alpha+s}{\beta+n}$
  - ou le mode *a posteriori* : $\hat{\lambda}_{\mathtt{MP}}(s) = \frac{\alpha+s-1}{\beta+n}$
- On remarque que la loi *a posteriori* $\Gamma(\alpha+s, \beta+n)$ est de la même famille que la loi *a priori* $\Gamma(\alpha, \beta)$. $\rightarrow$ Loi a priori $\Gamma(\alpha, \beta)$ est dite conjugué à la distribution de Poisson.

Sommaire

Segmentation d'image TEP

Modèle Bayésien de segmentation d'image TEP pour la localisation de tumeur proposé dans la thèse de Z. Irace, Chapitre 3

On considère une image TEP $(x_1, \ldots, x_n)$ tel que x_i est le nombre de photons reçue par le $i$ème voxel.

On va considérer que l'image TEP est partionné en K tissus biologique distinct, justifiant qu'ils aient chacun leur propre distribution statistique.

Modélisation statistique intra-classe

On a vu dans la section 2 que:

$$X_i \sim \mathcal{P}(\lambda)$$

L'hypothèse Poissonienne est discutable, on modélise λ par une variable aléatoire tel que $\lambda \sim \Gamma(\alpha, \beta)$.

La distribution marginale $p(X_i) = \int_0^{+\infty} p(X_i|\lambda)p(\lambda)d\lambda$ est une binomiale négative

$$P(X_i = x_i|\alpha, \beta) = \binom{x_i + \alpha - 1}{x_i} \left(\frac{1}{1+\beta}\right)^{\alpha} \left(\frac{\beta}{1+\beta}\right)^{x_i} = \frac{\Gamma(x_i + \alpha)}{xi!\Gamma(\alpha)} \left(\frac{1}{1+\beta}\right)^{\alpha} \left(\frac{\beta}{1+\beta}\right)^{x_i}$$

On note $X_i \sim \mathcal{BN}(\mu, \kappa)$ avec la moyenne $\mu = \alpha$ et l'inverse dispersion $\kappa = \alpha\beta$.

$$\mathbb{E}(X_i) = \mu \qquad \mathrm{Var}(X_i) = \mu + \mu^2/\kappa$$

Modélisation inter classes

L'image TEP est partitionnée en classes $(C_1, \ldots, C_k)$, on peut considérer que le nombre de photons suit une loi binomiale négative sur chaque zone C_j.

$$\forall X \in C_j,\ X \sim \mathcal{BN}(\mu_j, \kappa_j)$$

La distribution de probabilité de l'image est donc un modèle de mélange

$$X \sim \sum_{j=1}^{K} \omega_j \mathcal{BN}(\mu_j, \kappa_j)$$

avec $(\omega)_{1 \leq j \leq K}$ une combinaison convexe

Objectif: Estimer $(\mu_j, \kappa_j, \omega_j)_{1 \leq j \leq J}$

Modèle Bayésien

On note $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ l'image TEP, et $\boldsymbol{\theta} = (\mu_j, \kappa_j)_{1 \leq j \leq J}$.

On définit la variable latente Z à valeurs dans $\{1, \dots, K\}$ tel que $z_i = j \iff x_i \in C_j$. On note $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)$

On définit des lois a priori sur $\boldsymbol{\theta}$ et Z pour pouvoir appliquer la règle de Bayes:

$$p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{z} | \mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{z}) \pi(\boldsymbol{\theta}) \pi(\mathbf{z})$$

⚠ L'échantillonage de la loi a posteriori est complexe vu que la constante de normalisation est inconnue ! On verra des techniques d'échantillonage lors du cours sur les méthodes Monte-Carlo.

Lois a priori sur (μ_j, κ_j)

Les lois a priori sur les paramètres $(\mu_j, \kappa_j)_{1 \leq j \leq K}$ sont des lois Gamma:

$$
\begin{aligned}
\mu_j &\sim \Gamma(1 + a_\mu, -1/b_\mu) \\
\kappa_j &\sim \Gamma(1 + a_\kappa, -1/b_\kappa)
\end{aligned}
$$

Loi a priori sur $\mathbf{z}$: le champ de Potts

La loi a priori sur $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)$ est le champ de Potts, lui même une extension du modèle d'Ising:

$$\pi(\mathbf{z}) = \frac{1}{C(\gamma)} \exp\left[\sum_{i=1}^{n} \sum_{i' \in \mathcal{V}(i)} \gamma \mathbf{1}_{z_i = z_{i'}}\right]$$

- $\mathcal{V}(\cdot)$ désigne les points voisins du voxel i
- γ est le paramètre de granularité: plus γ est grand, plus les régions correspondant à chaque classe seront connexes
- $C(\gamma)$ est la constante de normalisation (appellé *fonction de partition* par les physiciens)

Références

- Manuscrit de thèse de Zacharie Irace. *Modélisation statistique et segmentation d'images TEP : application à l'hétérogénéité et au suivi de tumeurs*. INP Toulouse, 2014. (En ligne)
- X. de Scheemaekere, *Les fondements philosophiques du concept de probabilité*, Université Libre de Bruxelles, 2012. (En ligne)