

Exposé de maîtrise

Méthodes combinatoires en statistique

Julien Fageot et Guillaume Royer - Sujet proposé par Patricia Reynaud-Bouret

9 septembre 2008

Table des matières

1	Notations et problème	1
2	Inégalités de concentration	2
2.1	Inégalité de Hoeffding	2
2.2	Généralisation	3
3	Outils combinatoires en statistique	5
3.1	Coefficient de pulvérisation et théorèmes de Vapnik-Chervonenkis	5
3.2	Dimension de Vapnik-Chervonenkis	7
4	Estimation de densité	11
4.1	Cas de deux densités	11
4.2	Généralisation	14

1 Notations et problème

Soit $(X_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires à valeurs dans \mathbb{R}^d , indépendantes et de même loi μ . Dans le cadre de notre travail, μ n'est pas connue et on cherche à en obtenir une estimation. On définit pour cela la mesure empirique par :

$$\mu_n(A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{X_i \in A}$$

On constate qu'il s'agit d'une mesure aléatoire en ce sens que $\mu_n(A)$ dépend des réalisations des variables X_i . Pour comprendre l'intérêt de la mesure empirique, on peut penser aux sondages : on souhaite mesurer un certain paramètre (par exemple l'intention de vote en fonction de l'âge). $\mu(A)$ représente la proportion d'individus dans la population dont le paramètre est dans A . Si on s'intéresse à une population dont la taille N est de l'ordre de la population française, il est hors de question de calculer exactement $\mu(A)$, et on s'intéresse à un échantillon de taille n , petite devant N . $\mu_n(A)$ représente alors la proportion d'individus parmi l'échantillon. On peut alors espérer que, pour n assez grand, $\mu_n(A)$ soit assez proche de $\mu(A)$ pour A dans une certaine classe d'ensembles. Rappelons que ps la mesure empirique converge étroitement vers μ (c'est une conséquence de la loi forte des grands nombres).

Dans le cas où μ a une densité f , une estimation de densité est une densité aléatoire f_n vue comme une approximation de la loi μ (donnée par exemple par un institut de sondage) à travers un modèle de la densité (gaussienne, exponentielle, histogramme etc...) et ne dépendant que de X_1, \dots, X_n .

Les problèmes auxquels on s'intéresse concernent la qualité de l'approximation de μ par des estimations de densités. Connaissant deux estimations de densités f_n et g_n , on va chercher à savoir quelle est la meilleure estimation, c'est à dire celle qui minimise dans L^1 la distance à f . Plus précisément, nous allons essayer de construire une troisième estimation de densité, Φ_n , à partir de l'étalon μ_n , qui sera proche de la meilleure des deux au sens suivant :

$$\int |\Phi_n - f| \approx \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right)$$

En pratique, on n'arrive pas à obtenir exactement ce qu'on voudrait (ce qui se comprend car il faudrait pour cela connaître μ). Il reste notamment un terme d'erreur qu'il nous faudra estimer. La mesure empirique est ici indispensable : on ne connaît pas μ et il faut un point de départ pour convenir si une certaine estimation de densité est un meilleur candidat que l'autre.

La partie 2 présente quelques résultats sur les inégalités de concentration.

Des méthodes combinatoires nous permettront alors d'obtenir des résultats utiles pour contrôler ce terme d'erreur, ces résultats feront l'objet de la partie 3.

La partie 4 concerne la construction d'une meilleure estimation de densité, à partir de deux ou plusieurs estimations de densité.

2 Inégalités de concentration

2.1 Inégalité de Hoeffding

Théorème 2.1 (Inégalité de Hoeffding). *Soit X_1, \dots, X_n n variables aléatoires réelles indépendantes, telles que ps $X_i \in [a_i, b_i]$. On note $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$.*

On a alors :

$$\forall t > 0 \quad \mathbb{P}(|S_n - \mathbb{E}(S_n)| \geq t) \leq 2 \exp(-2t^2 / \sum_{i=1}^n (b_i - a_i)^2)$$

Démonstration. On a, pour toute variable aléatoire X positive et pour tout $s > 0$:

$$\mathbb{P}(X \geq t) = \mathbb{P}(e^{sX} \geq e^{st}) \leq \mathbb{E}(e^{sX}) / e^{st}$$

Puis en utilisant le fait que les variables sont indépendantes on obtient :

$$\mathbb{P}(S_n - \mathbb{E}(S_n) \geq t) \leq e^{-st} \mathbb{E}(e^{s \sum_{i=1}^n (X_i - \mathbb{E}(X_i))}) = e^{-st} \prod_{i=1}^n \mathbb{E}(e^{s(X_i - \mathbb{E}(X_i))})$$

Il s'agit maintenant de montrer que, si X est une variable aléatoire telle que $\mathbb{E}(X) = 0$ et ps $a \leq X \leq b$, alors : $\mathbb{E}(e^{sX}) \leq e^{s^2(b-a)^2/8}$

Ceci provient de l'inégalité de convexité, pour $a \leq x \leq b$: $e^{sx} \leq \frac{x-a}{b-a} e^{sb} + \frac{b-x}{b-a} e^{sa}$

On a donc en posant $p = \frac{-a}{b-a}$

$$\mathbb{E}(e^{sX}) \leq \frac{b}{b-a} e^{sa} - \frac{a}{b-a} e^{sb} = (1-p + pe^{s(b-a)})e^{-ps(b-a)} = e^{\phi(u)}$$

Avec $u = s(b-a)$ et $\phi(u) = -pu + \log(1-p + pe^u)$

On a $\phi(0) = \phi'(0) = 0$ et $\phi''(u) = \frac{p(1-p)e^{-u}}{(p+(1-p)e^{-u})^2} \leq 1/4$

Puis, avec le théorème de Taylor, il existe $\theta \in [0, u]$ tel que :

$$\phi(u) = \phi(0) + u\phi'(0) + u^2/2\phi''(\theta) \leq u^2/8 = s^2(b-a)^2/8$$

D'où le résultat. Puis, en reprenant les inégalités :

$$\mathbb{P}(S_n - \mathbb{E}(S_n) \geq t) \leq e^{-st} \prod_{i=1}^n (e^{s^2(b_i-a_i)^2/8}) = e^{-st} (e^{s^2 \sum_{i=1}^n (b_i-a_i)^2/8}) = \exp(-2t^2 / \sum_{i=1}^n (b_i-a_i)^2)$$

où on a pris $s = \frac{4t}{\sum_{i=1}^n (b_i-a_i)^2}$ qui minimise $s^2 \sum_{i=1}^n (b_i-a_i)^2/8 - st$.

Par symétrie, on en déduit l'inégalité voulue. \square

2.2 Généralisation

Nous allons maintenant voir une généralisation de ce théorème qui nous sera utile par la suite.

Définition 2.1. On dit que $g : A^n \rightarrow \mathbb{R}$ satisfait la condition de variations bornées si

$$\forall i \quad \sup_{x_1, \dots, x_n, x'_i \in A} |g(x_1, \dots, x_n) - g(x_1, \dots, x_{i-1}, x'_i, x_{i+1}, \dots, x_n)| \leq c_i$$

Théorème 2.2. Soit X_1, \dots, X_n n variables aléatoires indépendantes à valeurs dans A . Soit $g : A^n \rightarrow \mathbb{R}$ satisfaisant la condition de variations bornées. Alors pour tout $t > 0$, on a :

$$\mathbb{P}(|g(X_1, \dots, X_n) - \mathbb{E}(g(X_1, \dots, X_n))| \geq t) \leq 2e^{-2t^2 / \sum_{i=1}^n c_i^2}$$

Pour montrer ce théorème, nous aurons besoin du :

Lemme 2.1. Soit V et Z deux variables aléatoires réelles telles que $\mathbb{E}(V|Z) = 0$ ps, et s'il existe h mesurable et $c \geq 0$ tels que :

$$h(Z) \leq V \leq h(Z) + c$$

Alors,

$$\forall s > 0 \quad \mathbb{E}(e^{sV} | Z) \leq e^{s^2 c^2 / 8}$$

Démonstration. Ce lemme est une généralisation du résultat vu dans la preuve de l'inégalité de Hoeffding, et la démonstration est similaire.

Pour le théorème :

On notera simplement $g = g(X_1, \dots, X_n)$. On pose $V = g - \mathbb{E}(g)$ et $V_i = \mathbb{E}(V | g(X_1, \dots, X_i)) - \mathbb{E}(V | g(X_1, \dots, X_{i-1}))$. On a : $V = \sum_{i=1}^n V_i$. Notre but est de trouver un encadrement

de V_i . Pour ce faire, on introduit la variable aléatoire $H_i(X_1, \dots, X_i) = \mathbb{E}(g|X_1, \dots, X_i)$. On a alors :

$$V_i = H_i(X_1, \dots, X_i) - \int_A H_i(X_1, \dots, X_{i-1}, x) \mathbb{P}_{X_i}(dx)$$

On définit de plus les variables aléatoires :

$$W_i = \sup_{u \in A} (H_i(X_1, \dots, X_{i-1}, u) - \int_A H_i(X_1, \dots, X_{i-1}, x) \mathbb{P}_{X_i}(dx))$$

$$Z_i = \inf_{v \in A} (H_i(X_1, \dots, X_{i-1}, v) - \int_A H_i(X_1, \dots, X_{i-1}, x) \mathbb{P}_{X_i}(dx))$$

On a clairement : $Z_i \leq V_i \leq W_i$ ps, et $W_i - Z_i \leq c_i$ par hypothèse sur g . D'après le lemme, on a pour tout i :

$$\mathbb{E}(e^{sV_i} | X_1, \dots, X_{i-1}) \leq e^{s^2 c_i^2 / 8}$$

On a alors, pour tout $s > 0$, avec l'inégalité de Markov :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(g - \mathbb{E}(g) \geq t) &= \mathbb{P}(e^{s(g - \mathbb{E}(g))} \geq e^{st}) \\ &\leq \mathbb{E}(e^{s \sum_{i=1}^n V_i}) e^{-st} \\ &= \mathbb{E}(e^{s \sum_{i=1}^{n-1} V_i} \mathbb{E}(e^{sV_n} | X_1, \dots, X_{n-1})) e^{-st} \\ &\leq e^{s^2 c_n^2 / 8} \mathbb{E}(e^{s \sum_{i=1}^{n-1} V_i}) e^{-st} \\ &\leq e^{-st} e^{s^2 \sum_{i=1}^n c_i^2 / 8} \end{aligned}$$

En posant $s = \frac{4t}{\sum_{i=1}^n c_i^2}$, le résultat suit. \square

En prenant $g(X_1, \dots, X_n) = \sum_{i=1}^n X_i$, avec X_i à valeurs dans $[a_i, b_i]$ ps, on retrouve l'inégalité de Hoeffding.

On utilise ce résultat dans le cas particulier suivant :

$$g(X_1, \dots, X_n) = \sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|$$

où \mathcal{A} est une certaine classe d'ensembles mesurables. La fonction g ainsi définie satisfait à la condition de variations bornées, avec pour tout i , $c_i = 1/n$.

En effet, si on fixe $A \in \mathcal{A}$, il est alors clair que $\mu_n(A)$ ne peut varier qu'au plus de $1/n$ si on fixe tous les x_i sauf un. Il en va alors de même pour g .

Cette quantité nous intéresse car elle représente l'erreur maximale qu'on peut faire sur $\mu(A)$ à partir de la mesure empirique. \mathcal{A} est en pratique déterminée par la nature de la modélisation proposée dans les estimations de densités. Il est alors très utile de contrôler $\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|$, car ainsi on contrôle l'écart maximum qui peut séparer la mesure empirique de μ . Comme application du théorème 2, on obtient alors le résultat suivant :

Théorème 2.3 (Inégalité de concentration).

$$\mathbb{P} \left(\left| \sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)| - \mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \right| \geq t \right) \leq 2e^{-2nt^2}$$

En posant $x = 2nt^2$ on obtient :

$$\mathbb{P} \left(\left| \sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)| - \mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \right| \geq \sqrt{\frac{x}{2n}} \right) \leq 2e^{-x}$$

On a donc une déviation en $1/\sqrt{n}$.

On constate alors que si $\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|)$ est petit (par exemple de l'ordre de $1/\sqrt{n}$) alors $\mu_n(A)$ est proche de $\mu(A)$ pour tout $A \in \mathcal{A}$.

3 Outils combinatoires en statistique

3.1 Coefficient de pulvérisation et théorèmes de Vapnik-Chervonenkis

Dans toute cette partie, nous nous intéressons à la quantité $\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|)$.

Définition 3.1. Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles de \mathbb{R}^d . On définit le coefficient de pulvérisation de Vapnik-Chervonenkis par :

$$S_{\mathcal{A}}(n) = \max_{x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d} |\{\{x_1, \dots, x_n\} \cap A, A \in \mathcal{A}\}|$$

C'est donc le nombre maximum de sous ensembles qu'on peut former en intersectant les éléments de \mathcal{A} avec une partie à n éléments de \mathbb{R}^d .

On peut maintenant énoncer deux théorèmes de Vapnik-Chervonenkis.

Théorème 3.1. Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles de \mathbb{R}^d . On a alors :

$$\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \leq 2\sqrt{\frac{\log(2S_{\mathcal{A}}(n))}{n}}$$

Pour le prochain théorème, nous avons besoin de définir quelques notions. On munit $\{0, 1\}^n$ de la distance euclidienne renormalisée :

$$\rho(b, c) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{b_i \neq c_i}}$$

Puis pour $B \subset \{0, 1\}^n$ et $r > 0$, on dit que l'ensemble B_r est un recouvrement de rayon r de l'ensemble B si :

$$\forall b \in B \quad \exists c \in B_r \quad \rho(b, c) \leq r$$

On désigne alors par $N(r, B)$ le cardinal du plus petit recouvrement de rayon r de B . On remarque en passant que pour $r \leq 1/\sqrt{n}$ on a $N(r, B) = |B|$.

On définit enfin, pour $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^d$ et $x_1^n = \{x_1, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$, le sous-ensemble de $\{0, 1\}^n$ suivant :

$$\mathcal{A}(x_1^n) = \{b = (b_1, \dots, b_n) \in \{0, 1\}^n, \exists A \in \mathcal{A} \forall i \in \{1, \dots, n\} b_i = \mathbf{1}_{x_i \in A}\}$$

On peut voir $\mathcal{A}(x_1^n)$ comme une copie de l'ensemble des parties que l'on forme en intersectant les éléments de \mathcal{A} par $\{x_1, \dots, x_n\}$. On a alors :

$$S_{\mathcal{A}}(n) = \max_{x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d} |\mathcal{A}(x_1^n)|$$

Théorème 3.2.

$$\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \leq \frac{24}{\sqrt{n}} \max_{x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d} \int_0^1 \sqrt{\log(2N(r, \mathcal{A}(x_1^n)))} dr$$

Les preuves des deux théorèmes reposent essentiellement sur des raisonnements probabilistes.

Le théorème 3.1 ne permet a priori pas de dire que $\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|)$ tend vers 0. En effet, si par exemple $S_{\mathcal{A}}(n) = 2^n$ pour tout n , alors on obtient :

$$\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \leq 2\sqrt{\frac{(n+1)\log 2}{n}} \rightarrow 2\sqrt{\log 2}$$

De même le théorème 3.2 fournit une majoration dont on ne peut a priori rien dire dans le cas général. Dans le cas où $d = 1$ et \mathcal{A} est l'ensemble des intervalles de la forme $A = (-\infty, x]$, ces deux théorèmes offrent cependant des résultats. En effet, on a alors :

$$\mu(A) = F(x) = \mathbb{P}(X \leq x)$$

$$\mu_n(A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{X_i \leq x}$$

C'est avec le théorème 3.2 qu'on a le résultat le plus précis :

Théorème 3.3 (Inégalité de Dvoretzky-Kiefer-Wolfowitz).

$$\mathbb{E}(\sup_{x \in \mathbb{R}} |F_n(x) - F(x)|) \leq \frac{c}{\sqrt{n}}$$

où c est une constante universelle.

Démonstration. Soit $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$. On peut supposer sans nuire à la généralité que $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Compte tenu de la forme des éléments de \mathcal{A} , on sait que $|\mathcal{A}(x_1^n)| \leq n+1$ et qu'un élément de $\mathcal{A}(x_1^n)$ est le forme $(1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$. Ainsi, à $r > 1/\sqrt{n}$ fixé, on obtient une couverture de rayon r en ne considérant que les éléments de \mathcal{A} dont les $i \lfloor nr^2 \rfloor$ premières composantes valent 1, et les suivantes 0, avec $i = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{nr^2} \rfloor$. On a alors :

$$N(r, \mathcal{A}(x_1^n)) \leq \left\lfloor \frac{n}{nr^2} \right\rfloor \leq \frac{n}{nr^2 - 1}$$

Pour $r^2 > 2/n$, on obtient même $2n/(nr^2 - 1) < 4/r^2$. Puis :

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \sqrt{\log(2N(r, \mathcal{A}(x_1^n)))} dr &\leq \int_0^{\sqrt{2/n}} \sqrt{\log 2(n+1)} dr + \int_{\sqrt{2/n}}^1 \sqrt{\log(\frac{4}{r^2})} dr \\
&\leq \sqrt{\frac{2}{n} \log 2(n+1)} + \int_0^1 \sqrt{\log(\frac{4}{r^2})} dr \\
&\leq \sqrt{2\pi} + \sqrt{\frac{2}{n} \log 2(n+1)} \\
&\leq \sqrt{2\pi} + \sqrt{2}
\end{aligned}$$

L'avant dernière inégalité vient du changement de variable : $r = 2e^{-u/2}$, et en utilisant : $\int_0^\infty \sqrt{u}e^{-u} du = \sqrt{\pi/4}$. \square

Un résultat dû à Massart permet de remplacer la constante $c = 24(\sqrt{2\pi} + \sqrt{2})$ par 1. C'est cette constante qu'on utilisera dans la suite, car elle est beaucoup plus efficace en pratique.

3.2 Dimension de Vapnik-Chervonenkis

Les théorèmes précédents amènent donc à chercher des majorations des quantités $S_{\mathcal{A}}(n)$ et $N(r, \mathcal{A}(x_1^n))$, ce que nous allons faire dans un cas particulier. Pour cela, nous devons définir une notion clef : la dimension de Vapnik-Chervonenkis.

Définition 3.2. Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles. On appelle dimension de Vapnik-Chervonenkis de \mathcal{A} le plus grand entier n , que l'on notera V , vérifiant :

$$S_{\mathcal{A}}(n) = 2^n$$

Avec la convention que $V = \infty$ si pour tout n $S_{\mathcal{A}}(n) = 2^n$.

Quelques remarques : tout d'abord, il est clair que $S_{\mathcal{A}}(n) \leq 2^n$ car on ne peut évidemment obtenir qu'au plus 2^n ensembles en intersectant les éléments de \mathcal{A} avec une partie à n éléments.

Puis, en observant que $S_{\mathcal{A}}(n+m) \leq S_{\mathcal{A}}(n)S_{\mathcal{A}}(m)$, on constate que si, pour un certain n , $S_{\mathcal{A}}(n) < 2^n$, alors pour tout $m > n$ on a $S_{\mathcal{A}}(m) < 2^m$.

La définition précédente a donc un sens.

Les théorèmes suivants donnent des majorations intéressantes dans le cas où $V < \infty$.

Théorème 3.4 (Lemme de Sauer). Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles dont la dimension de Vapnik-Chervonenkis V est finie. On a alors :

$$\forall n \quad S_{\mathcal{A}}(n) \leq \sum_{k=0}^V C_n^k$$

Démonstration. On dit que $B \subset \{0, 1\}^n$ pulvérise $S = \{s_1, \dots, s_m\} \subset \{1, 2, \dots, n\}$ si

$$\{(b_{s_1}, \dots, b_{s_m}), (b_1, \dots, b_n) \in B\} = \{0, 1\}^m$$

C'est à dire si la restriction de B aux composantes données par S est $\{0, 1\}^m$ tout entier.

On fixe maintenant x_1, \dots, x_n tels que $|\mathcal{A}(x_1^n)| = S_{\mathcal{A}}(n)$, et on pose $B_0 = \mathcal{A}(x_1^n)$.

Pour montrer le résultat, on constate tout d'abord que B_0 ne peut par définition de V pulvériser aucun ensemble de taille $m > V$. En effet, dans le cas contraire, on aurait $S_{\mathcal{A}}(m) = 2^m$.

On va maintenant effectuer une transformation sur B_0 en conservant le cardinal, qu'on pourra ensuite majorer.

Pour $b = (b_1, \dots, b_n) \in B_0$, on appelle b' l'élément suivant :

Si $b_1 = 1$, on pose $b' = (0, b_2, \dots, b_n)$ si ce vecteur n'est pas déjà dans B_0 et $b' = b$ sinon.

Si $b_1 = 0$, on pose $b' = b$.

On définit ainsi un ensemble B_1 constitué des éléments b' qui est alors clairement de même cardinal que B_0 . On remarque alors que si B_1 pulvérise $S = \{s_1, \dots, s_m\} \subset \{1, \dots, n\}$ alors il en est de même de B_0 .

En effet, c'est clair si $1 \notin S$. Si maintenant $1 \in S$, on suppose que $s_1 = 1$. Alors, quel que soit $v \in \{0, 1\}^{m-1}$, il existe $b \in B_1$ tel que $b_1 = 1$ et $(b_{s_2}, \dots, b_{s_m}) = v$. Par construction de B_1 , on a $b \in B_0$ et $(0, b_2, \dots, b_n) \in B_0$. Donc B_0 pulvérise aussi S .

On recommence cette transformation en agissant maintenant sur les deuxièmes coordonnées des éléments de B_1 . On obtient ainsi B_2 , puis on réitère le procédé pour arriver à B_n . Clairement, si B_n pulvérise un ensemble de taille $m > V$, alors B_0 aussi. Comme on l'a vu pour B_1 , cela revient à dire que si $b \in B_n$ alors les vecteurs de la forme $c = (c_1, \dots, c_n)$, où $c_i = b_i$ ou 0 sont aussi dans B_n , ce qui implique que tout élément de B_n a au plus V coordonnées valant 1 (sinon B_n pulvérise un trop gros ensemble). Ainsi :

$$|B_0| = |B_n| \leq \sum_{k=0}^V C_n^k$$

Ce qui termine la preuve. □

Corollaire 3.1. *Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles de dimension de Vapnik-Chervonenkis finie. Alors pour tout n , on a :*

$$S_{\mathcal{A}}(n) \leq (n+1)^V$$

Et pour tout $n \geq V$:

$$S_{\mathcal{A}}(n) \leq \left(\frac{ne}{V}\right)^V$$

Ces résultats découlent directement du théorème précédent et de la formule du binôme de Newton.

En combinant le lemme de Sauer avec le théorème 3.1, on voit alors que, pour \mathcal{A} une classe d'ensembles de dimension de Vapnik-Chervonenkis finie V , on a :

$$\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \leq 2\sqrt{\frac{V \log(n+1) + \log 2}{n}}$$

La dernière quantité tend vers 0 à la vitesse $\mathcal{O}(\sqrt{\log n/n})$. Le résultat suivant permet de donner une amélioration pour cette convergence.

Théorème 3.5 (Théorème de Dudley). *Soit \mathcal{A} une classe d'ensembles dont la dimension de Vapnik-Chervonenkis V est finie. Alors pour $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ et pour $0 \leq r \leq 1$:*

$$N(r, \mathcal{A}(x_1^n)) \leq \left(\frac{4e}{r^2} \right)^{V/(1-1/e)}$$

Démonstration. Soit $B_0 = \mathcal{A}(x_1, \dots, x_n)$ et soit B_r un recouvrement de B_0 de rayon r et de cardinal minimal, c'est-à-dire tel que $|B_r| = N(r, B_0)$.

Il existe alors $C_r \subset B_0$ tel que $|B_r| \leq |C_r|$ et C_r r -séparé, c'est-à-dire vérifiant, pour tout $b, c \in C_r$, $\rho(b, c) > r$. Pour le voir, il suffit de prendre $C_r \subset B_0$, sous-ensemble r -séparé de cardinal maximal. C_r est alors un recouvrement de rayon r de B_0 , sinon il existe $b \in B_0$ tel que pour tout $c \in C_r$ on ait $\rho(b, c) \leq r$, et alors $C_r \cup \{b\}$ est un sous-ensemble de B_0 qui est r -séparé et de cardinal strictement supérieur à celui de C_r , ce qui est absurde.

On pose $C_r = \{c^1, \dots, c^m\}$ et pour tous $i, j \leq m$:

$$A_{i,j} = \{1 \leq k \leq n : c_k^i \neq c_k^j\}$$

On remarque que la condition sur C_r impose que deux éléments de C_r diffèrent par au moins nr^2 composantes. Ainsi $|A_{i,j}| \geq nr^2$.

Soit maintenant K un entier et Y_1, \dots, Y_K des variables aléatoires indépendantes de loi uniforme sur $\{1, \dots, n\}$. Alors, pour tous $i, j \leq m$, $i \neq j$ et tout $k \leq K$,

$$\mathbb{P}(Y_k \in A_{i,j}) \geq r^2$$

Par indépendance, la probabilité qu'aucun des Y_k ne tombe dans l'ensemble $A_{i,j}$ est inférieure à $(1 - r^2)^K$. Or, les $A_{i,j}$ sont moins de m^2 ensembles, donc :

$$\mathbb{P}(\forall i \neq j, \exists k, Y_k \in A_{i,j}) \leq 1 - m^2(1 - r^2)^K \leq 1 - m^2 e^{-Kr^2}$$

En choisissant $K = \lceil 2 \log m / r^2 \rceil + 1$, la probabilité précédente est strictement positive. Ainsi, il existe K indices $y_1, \dots, y_K \in \{1, \dots, n\}$ tels que chaque $A_{i,j}$ compte au moins un y_k . Ceci assure que la restriction des éléments de C_r aux composantes y_1, \dots, y_K donne toujours $|C_r|$ éléments différents. De plus, $C_r \subset B_0$ ne peut pulvériser d'ensemble de taille plus grande que V . Le lemme de Sauer assure donc que pour $K \geq V$:

$$|C_r| = m \leq \left(\frac{eK}{V} \right)^V$$

Pour montrer le résultat, on constate déjà que celui-ci est évident si $\log m < V$. Si maintenant $\log m \geq V$, alors $K \geq V$ et :

$$\begin{aligned} \log m &\leq V \log \left(\frac{e(\lceil 2 \log m / r^2 \rceil + 1)}{V} \right) \\ &\leq V \left(\log \frac{4e}{r^2} + \log \frac{\log m}{V} \right) \\ &\leq V \log \frac{4e}{r^2} + \frac{\log m}{e} \end{aligned}$$

La dernière ligne provient de l'inégalité de convexité, pour $x > 0$: $\log x \leq x/e$.

Ainsi : $\log(N(r, B_0)) \leq \log m \leq \frac{V}{1-1/e} \log \frac{4e}{r^2}$ □

Corollaire 3.2. *En combinant le résultat précédent avec le théorème 3.2, on obtient alors :*

$$\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|) \leq c \sqrt{\frac{V}{n}}$$

où c est une constante universelle.

Ainsi, nous avons montré au cours de cette partie qu'on pouvait contrôler la quantité $\mathbb{E}(\sup_{A \in \mathcal{A}} |\mu_n(A) - \mu(A)|)$ dans deux cas intéressants : d'une part si \mathcal{A} est l'ensemble des intervalles de la forme $(-\infty, x]$, et d'autre part si $S_{\mathcal{A}}(n)$ est fini. Nous allons voir quelques exemples pour lesquels on peut majorer la dimension de Vapnik-Chervonenkis.

Le premier exemple qui nous intéresse est celui où $\mathcal{A} = \{(-\infty, x], x \in \mathbb{R}\}$. Alors pour tout n , $S_{\mathcal{A}}(n) = n + 1$ et donc $V = 1$. Ici, le lemme de Sauer et le théorème de Dudley ne nous sont pas très utiles, car les résultats vus dans la partie 2 sont aussi précis (voir plus, car alors on connaissait la constante universelle).

Si \mathcal{A} est l'ensemble des boréliens, alors $V = \infty$.

Propriété 3.1. *Si \mathcal{A} est l'ensemble des pavés dans \mathbb{R}^d alors $V = 2d$.*

Soit F un sous-espace vectoriel de dimension n de l'ensemble des fonctions définies sur \mathbb{R}^d à valeurs dans \mathbb{R} . Si $\mathcal{A} = \{\{x : f(x) > 0\} : f \in F\}$, alors $V \leq n$.

Démonstration. Pour le premier exemple, on remarque tout d'abord que $S_{\mathcal{A}}(2d) = 2^{2d}$, en considérant les $2d$ vecteurs dont chaque composante vaut 0 sauf une, valant + ou -1 . En effet, il est clair qu'on peut former tous les ensembles possibles en intersectant l'ensemble de ces vecteurs avec des pavés. Ainsi : $V \geq 2d$.

D'autre part, si on fixe $2d + 1$ points dans \mathbb{R}^d , on peut choisir $2d$ points, possédant la propriété de contenir un point avec la plus grande première coordonnée, un point avec la plus petite première coordonnée, et ainsi de suite pour chaque coordonnée. Alors le dernier point est nécessairement dans le pavé contenant les $2d$ points. On en déduit que : $S_{\mathcal{A}}(2d + 1) < 2^{2d+1}$, i.e $V = 2d$.

Pour le second exemple, il suffit de voir qu'un ensemble de taille $n + 1$ ne peut être pulvérisé par les ensembles de la forme $\{x : f(x) > 0\}$. Soit $x_1, \dots, x_{n+1} \in \mathbb{R}^d$. On définit $\phi : F \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$ par :

$$\phi(f) = (f(x_1), \dots, f(x_{n+1}))$$

L'image de ϕ est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^{n+1} contenu dans un hyperplan, donc il existe un vecteur non nul $a = (a_1, \dots, a_{n+1})$ tel que :

$$\forall f \in F \quad a_1 f(x_1) + \dots + a_{n+1} f(x_{n+1}) = 0$$

Si tous les a_i sont positifs, alors il est clair que les ensembles de la forme $\{x : f(x) > 0\}$ ne peuvent pulvériser $\{x_1, \dots, x_{n+1}\}$, sinon on choisit $f \in F$ telle que $f(x_i) < 0$ pour tout i , et alors $a_1 f(x_1) + \dots + a_{n+1} f(x_{n+1}) < 0$.

On regarde alors :

$$\sum_{i, a_i \geq 0} a_i f(x_i) = \sum_{i, a_i < 0} -a_i f(x_i)$$

Supposons qu'il existe f tel que $\{x : f(x) > 0\}$ contienne exactement les x_i tels que $a_i \geq 0$. Alors, tous les termes de droites sont strictement négatifs, et les termes de droites positifs, d'où la contradiction. \square

On utilisera ce dernier exemple dans une application.

4 Estimation de densité

4.1 Cas de deux densités

Le but de cette partie est le suivant : étant données deux estimations de densité f_n et g_n , on veut savoir quelle est la meilleure des deux. Pour cela, on voudrait construire une troisième estimation de densité Φ_n telle que :

$$\int |\Phi_n - f| \approx \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right)$$

En fait, on ne sait pas quelle est alors la meilleure estimation de densité, mais ce qui importe, c'est que Φ_n se comporte comme la meilleure. En pratique, on ne connaît pas f , c'est pourquoi on utilise la mesure empirique comme étalon.

Définition 4.1. Soit f et g deux densités. On définit l'ensemble de Scheffé par :

$$A = A(f, g) = \{x, f(x) > g(x)\}$$

Lemme 4.1 (Lemme de Scheffé). Soient f et g deux fonctions de densité sur \mathbb{R}^d . Soit \mathcal{B} l'ensemble des boréliens de \mathbb{R}^d . Alors :

$$2 \sup_{B \in \mathcal{B}} \left| \int_B (f - g) \right| = \int_{A(f, g)} f - g = \int |f - g|$$

Définition 4.2. On définit l'estimation de Scheffé par :

$$\begin{aligned} f_n^* &= f_n \text{ si } \left| \int_A f_n - \mu_n(A) \right| < \left| \int_A g_n - \mu_n(A) \right| \\ &= g_n \text{ sinon} \end{aligned}$$

On remarque que cette définition n'est pas symétrique. f_n^* est la meilleure approximation de la mesure empirique entre les deux estimations de densité.

Le résultat essentiel de cette partie, qui sera généralisé par la suite, est le :

Théorème 4.1. Soient f_n et g_n deux estimations de densité.

On note $\mathcal{A} = \{\{f_n > g_n\}, \{f_n < g_n\}\}$. On a alors le résultat suivant sur l'estimation de Scheffé :

$$\int |f_n^* - f| \leq 3 \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right) + 4 \max_{A \in \mathcal{A}} \left| \int_A f - \mu_n(A) \right|$$

Démonstration. On note ϕ_n la meilleure estimation de densité, définie par :

$$\begin{aligned} \phi_n &= f_n \text{ si } \left| \int f_n - f \right| < \left| \int g_n - f \right| \\ &= g_n \text{ sinon} \end{aligned}$$

ϕ_n est en fait exactement l'estimation recherchée, mais ne connaissant par f , elle est en pratique inaccessible. C'est ce qui a motivé la définition de f_n^* . On a alors :

$$\begin{aligned} \int |f_n^* - f| &\leq \int |\phi_n - f| + \int |\phi_n - f_n^*| \\ &= \int |\phi_n - f| + \int |f_n - g_n| \mathbf{1}_{\phi_n=f_n, f_n^*=g_n} + \int |f_n - g_n| \mathbf{1}_{\phi_n=g_n, f_n^*=f_n} \\ &= I + II + III \end{aligned}$$

Intéressons nous à II. On pose $E = \{\phi_n = f_n, f_n^* = g_n\}$ et A l'ensemble de Scheffé relatif à f_n et g_n . On a alors :

$$\begin{aligned} II &= \int |f_n - g_n| \mathbf{1}_E \\ &= 2 \left(\int_A f_n - g_n \right) \mathbf{1}_E \\ &= 2 \left(\int_A f_n - \mu_n(A) \right) \mathbf{1}_E - 2 \left(\int_A g_n - \mu_n(A) \right) \mathbf{1}_E \\ &\leq 4 \left(\int_A f_n - \mu_n(A) \right) \mathbf{1}_E \end{aligned}$$

Justifions la dernière inégalité. On a, sur E :

$$\left| \int_A g_n - \mu_n(A) \right| \leq \int_A f_n - \mu_n(A)$$

Reprenons :

$$\begin{aligned} II &\leq 4 \left(\int_A \phi_n - f \right) \mathbf{1}_E + 4 \left(\int_A f - \mu_n(A) \right) \mathbf{1}_E \\ &\leq 2 \int |\phi_n - f| + 4 \left| \int_A f - \mu_n(A) \right| \end{aligned}$$

Cette dernière inégalité provient du lemme de Scheffé. On a de même, pour III :

$$III \leq 2 \int |\phi_n - f| + 4 \left| \int_{A(g_n, f_n)} f - \mu_n(A(g_n, f_n)) \right|$$

D'où le résultat. □

On obtient donc un résultat proche de celui qu'on voulait. Deux remarques, tout d'abord le facteur 3 est très gênant dans le cas où la meilleure des deux estimations f_n et g_n reste assez éloignée de f . Si par contre on "sait" qu'au moins l'une des deux estimations est proche de f sans savoir laquelle, ce facteur 3 n'est pas vraiment un problème. L'idéal serait d'obtenir une majoration avec un facteur 1, ce qui n'est pas possible avec nos hypothèses. De plus, on constate qu'il reste un terme d'erreur par rapport à notre objectif initial. On pose :

$$E_n = \max_{A \in \mathcal{A}} \left| \int_A f - \mu_n(A) \right|$$

E_n ne dépend de f_n et g_n que par \mathcal{A} . Nous allons maintenant nous intéresser à des cas particuliers pour pouvoir appliquer les résultats de la partie 3 et majorer le terme d'erreur.

Application 1 :

Si f_n et g_n sont deux densités normales, les éléments de \mathcal{A} sont de la forme (a, b) où $[a, b]^c$. Donc, appelant \mathcal{B}_2 l'ensemble constitué des réunions de deux intervalles, on obtient finalement que :

$$E_n \leq \sup_{A \in \mathcal{B}_\epsilon} \left| \int_A f - \mu_n(A) \right| \leq 4 \sup_x |F(x) - F_n(x)|$$

où F_n est la fonction de répartition de la mesure empirique, et F celle de μ . Ceci provient simplement de l'inégalité triangulaire.

D'après Dvoretzky-Kiefer-Wolfowitz, on a, avec la constante donnée par Massart :

$$\mathbb{E}(\sup_x |F_n(x) - F(x)|) \leq \frac{1}{\sqrt{n}}$$

On en déduit que :

$$\mathbb{E} \left(\int |f_n^* - f| - 3 \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right) \right) \leq \frac{16}{\sqrt{n}}$$

De plus, avec l'inégalité de concentration, on obtient que pour tout ϵ :

$$\mathbb{P} \left(\sup_x |F_n(x) - F(x)| - \mathbb{E}(\sup_x |F_n(x) - F(x)|) \geq \epsilon \right) \leq e^{-2n\epsilon^2}$$

En choisissant $\epsilon = k/\sqrt{n}$ avec k fixé, on aura :

$$\mathbb{P} \left(\sup_x |F_n(x) - F(x)| - \mathbb{E}(\sup_x |F_n(x) - F(x)|) \geq \frac{k}{\sqrt{n}} \right) \leq e^{-2k^2}$$

On a donc, avec probabilité supérieure à $1 - e^{-2k^2}$:

$$\int |f_n^* - f| \leq 3 \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right) + \frac{16 + 8k}{\sqrt{n}}$$

On choisit alors k pour obtenir la précision qu'on veut. Par exemple, pour une probabilité supérieure à 0,95, on choisit $k \approx 1,5$. Puis, on sait que pour " n grand devant k^2 ", avec une forte probabilité, on contrôle bien le terme d'erreur.

Application 2 :

Choisissons maintenant f_n une densité normale, et g_n un histogramme avec k paliers. En pratique, k grandit avec n puisqu'on gagne en précision. Alors $A(f_n, g_n)$ et $A(g_n, f_n)$ sont tous les deux des unions d'au plus $k + 2$ ensembles disjoints. On note, par analogie avec l'application précédente, pour $k \geq 0$, \mathcal{B}_{k+2} la classe constitué des unions d'au plus $k + 2$ intervalles disjoints. Alors, on obtient :

$$\sup_{A \in \mathcal{B}_{k+2}} \left| \int_A f - \mu_n(A) \right| \leq 2(k + 2) \sup_x |F(x) - F_n(x)|$$

Comme précédemment, on a avec l'inégalité de Massart :

$$\mathbb{E} \left(\int |f_n^* - f| - 3 \min \left(\int |f_n - f|, \int |g_n - f| \right) \right) \leq \frac{8(k+2)}{\sqrt{n}}$$

On peut alors poursuivre l'étude de façon similaire à l'application 1. On peut de même traiter d'autres exemples (duel entre densités normales et exponentielles, etc...). Nous n'avons rien sur la croissance de k avec n qui peut poser un problème.

Application 3 :

On se place cette fois-ci dans \mathbb{R}^2 (dans \mathbb{R}^d , les choses se passeraient de la même manière). Soit $\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2, \mathcal{N}_3$ trois gaussiennes dans \mathbb{R}^2 de covariance Id . On note F le sous-espace engendré par les trois gaussiennes dans l'espace des fonctions continues. Chaque gaussienne correspond à un vecteur gaussien X_i . On construit ainsi f_n et g_n : pour f_n on tire au hasard avec probabilité $1/2$ X_1 ou X_2 , pour g_n on tire au hasard avec probabilité $1/2$ X_2 ou X_3 . Ainsi les ensembles de Scheffé associés à f_n et g_n sont inclus dans $\mathcal{A} = \{\{x : f(x) > 0\} : f \in F\}$ qui est dimension de Vapnik-Chervonenkis inférieure à 3, comme on l'a vu dans la partie précédente. On a donc, en utilisant le corollaire du théorème de Dudley :

$$\mathbb{E}(E_n) \leq \frac{c\sqrt{3}}{\sqrt{n}}$$

Avec l'inégalité de concentration, on a encore des résultats similaires à l'application 1.

4.2 Généralisation

On peut clairement généraliser le théorème 4.1 dans le cas de k densités par récurrence. Mais les coefficients 3 et 4 explosent avec k , ce qui est bien sûr inacceptable. En fait, on peut faire mieux comme on va le voir maintenant, en proposant deux généralisations différentes.

Soit k densités f_{ni} pour $i \in \{1, \dots, k\}$. On note A_{ij} l'ensemble de Scheffé associé à (f_{ni}, f_{nj}) . On dit que f_{ni} gagne sur f_{nj} si :

$$\left| \int_{A_{ij}} f_{ni} - \mu_n(A_{ij}) \right| < \left| \int_{A_{ij}} f_{nj} - \mu_n(A_{ij}) \right|$$

Attention, la notation est à nouveau non symétrique.

On pose $\Delta = \sup_{A \in \{A_{ij}, A_{ji}, 1 \leq i < j \leq k\}} \left| \int_A f - \mu_n(A) \right|$.

On définit le tournoi de Scheffé ainsi : pour $i < j$ on regarde si f_{ni} gagne sur f_{nj} , ce qui nous donne $k(k-1)/2$ matches. On comptabilise le nombre de victoire pour chaque f_{ni} et on choisit pour f_n^* celui qui en compte le plus.

Théorème 4.2. *Avec les définitions précédentes, on obtient :*

$$\int |f_n^* - f| \leq 9 \min_i \int |f_{ni} - f| + 16\Delta$$

Démonstration. Notons $m = \min_i \int |f_{ni} - f|$. On va regrouper les estimations de densités en 4 groupes :

$$G_0 = \{f_{ni}, \int |f_{ni} - f| = m\}$$

$$G_1 = \{f_{ni}, m < \int |f_{ni} - f| \leq 3m + 4\Delta\}$$

$$G_2 = \{f_{ni}, 3m + 4\Delta < \int |f_{ni} - f| \leq 9m + 16\Delta\}$$

$$G_3 = \{f_{ni}, \int |f_{ni} - f| > 9m + 16\Delta\}$$

On note $n_i = |G_i|$. D'après le théorème 4.1, tout élément de G_0 gagne contre n'importe quel élément de G_2 ou G_3 "par construction", donc gagne au moins $n_2 + n_3$ matchs. De même, tout élément de G_3 perd contre n'importe quel élément de G_0 ou G_1 , donc le nombre de victoires associé à un élément de G_3 est inférieur à $n_2 + n_3 - 1$. On en déduit que le vainqueur du tournoi de Scheffé ne peut pas venir du groupe 3, d'où finalement le résultat. □

Ce théorème ressemble au précédent. On remarque qu'on perd en précision (les constantes sont plus grandes que dans le théorème 4.1).

On peut définir un autre tournoi, a fortiori un autre vainqueur, qui - en un sens - améliore le théorème qu'on vient de voir.

On pose : $\Delta_i = \sup_{A \in \{A_{ij}, A_{ji}, 1 \leq i < j \leq k\}} |\int_A f_{ni} - \mu_n(A)|$.

Puis on définit : $\psi_n = f_{ni}$ où i est le plus petit entier minimisant les Δ_j .

Théorème 4.3. *On obtient, pour le vainqueur qu'on vient de définir, le résultat suivant :*

$$\int |\psi_n - f| \leq 3 \min_i \int |f_{ni} - f| + 4\Delta$$

Les constantes sont effectivement plus petites que dans le théorème précédent. Remarquons cependant que le calcul effectif de Δ_i requiert $k(k-1)/2$ opérations, donc celui de ψ_n en requiert $k^2(k-1)/2$. En pratique, pour choisir entre les deux méthodes, il s'agit de faire un compromis entre la précision voulue et le temps de calcul nécessaire pour construire la nouvelle densité d'estimation.

La preuve de ce dernier théorème repose sur des idées similaires à celle du théorème 4.1.

Les exemples sont similaires au cas de deux densités.

Bibliographie :

Luc Devroye et Gabor Lugosi (2000) - *Combinatorial methods in density estimation*