
Document de synthèse présenté pour l'obtention d'une

Habilitation à Diriger des Recherches

Théorème central limite, inégalités de concentration et principes de grandes déviations: applications à des modèles issus de la combinatoire et à l'analyse de sensibilité. Bornes minimax et distance de Wasserstein en statistique semi-paramétrique.

présenté par

Thierry Klein

au vu des rapports de

Eustasio Del Barrio Tellado	Professeur, Université de Valladolid
Luc Devroye	Professeur, Mc University, Montréal
Josselin Garnier	Professeur, Université Paris Diderot

soutenue le lundi 3 octobre 2016, devant le jury composé de

Fabienne Castell	Professeur, Université d'Aix- Marseille
Patrick Cattiaux	Professeur, Université de Toulouse
Eustasio Del Barrio Tellado	Professeur, Université de Valladolid
Luc Devroye	Professeur, Mc University, Montréal
Fabrice Gamboa	Professeur, Université de Toulouse
Josselin Garnier	Professeur, Université Paris Diderot
Luc Pronzato	Directeur de Recherche, Université de Nice Sophia Antipolis

**Institut Mathématiques de Toulouse
Université Paul Sabatier**

*Je dédie ce manuscrit à mes trois enfants sans lesquels j'aurais sûrement pu soutenir mon
HDR quelques années plus tôt.*

Remerciements

Je tiens particulièrement à remercier Eustasio, Josselin et Luc qui ont eu le courage d'accepter de rapporter ce manuscrit très volumineux.

Quería agradecer especialmente a Tasio el esfuerzo que ha hecho leyendo el manuscrito en francés. Fabienne, Fabrice, Josselin, Luc D., Luc P., Patrick et Tasio un grand merci d'être présent pour ma soutenance. Je suis très fier d'avoir un jury de cette qualité.

A mes coauteurs,

sans vous ces pages n'existeraient pas, cette habilitation vous doit beaucoup. Une pensée particulière à ceux qui ont refusé que j'abandonne en cours de route lors de mes moments de doutes, j'ai énormément appris à vos côtés.

Je voudrais particulièrement remercier Fabrice pour toutes ces idées échangées depuis 2004 et pour m'avoir intégré à de nombreux projets (thèse de Nabil, de Vincent, ANR Costa Brava).

Merci à mes trois re-lecteurs anonymes.

Un grand merci à toutes les personnes de l'IMT que j'apprécie beaucoup. Je ne prendrai pas le risque d'en faire une liste de peur d'en oublier. Je n'en citerai donc qu'une seule Françoise qui a la lourde tâche de s'occuper des problèmes administratifs de l'équipe.

Pour finir, je tiens à remercier un lieu :

Saint Jean de Luz

où je me suis isolé pendant deux longs week-ends en décembre 2015 et en février 2016 pendant lesquels j'ai rédigé les pages qui suivent bercé par la tempête et le bruit d'une mer déchainée. J'en garde un excellent souvenir...

Table des matières

1	Introduction	11
2	Synthèse générale	15
2.1	Inégalités de concentrations - structures discrètes et PGD	15
2.1.1	Autour des inégalités de concentration	15
2.1.2	Autour des structures discrètes	20
2.2	Moyennes de Fréchet - barycentres sur l'espace de Wasserstein	27
2.2.1	Caractérisation des moyennes de Fréchet	27
2.2.2	A.C.P. suivant une géodésique dans l'espace de Wasserstein	31
2.3	Deux exemples de bornes de risques minimax	33
2.3.1	Algorithme des plus proches voisins en dimension finie	33
2.3.2	Cadre statistique. Le classifieur des plus proches voisins	35
2.3.3	Cas des densités uniformément minorées sur leur support	38
2.3.4	Cas général pour les espaces de dimension finie	38
2.4	Analyse de sensibilité et quantification des incertitudes	41
2.4.1	La problématique de la quantification des incertitudes	41
2.4.2	Détection de variables importantes et indices de Sobol	41
2.4.3	Cadre mathématique	42
2.4.4	Estimateur Pick-Freeze en dimension 1	43
2.4.5	Indices de Sobol en dimension supérieure et leur estimateur Pick-Freeze	47
2.4.6	Indices basés sur la distance de Cramér-von Mises	50
2.4.7	Une méthode générale pour construire des indices bien adaptés	53
2.5	Les chantiers à venir....	55
2.5.1	A partir du travail de Janson	55
2.5.2	A partir du travail de Agueh et Carlier	56
3	Inégalités de concentration - structures discrètes et PGD	57
3.1	Autour des inégalités de concentration	57
3.1.1	Inégalités de concentration pour le supremum de processus empiriques	57
3.1.2	Inégalités de concentration convexe	59
3.2	Etude de structures aléatoires discrètes	66
3.2.1	L'arbre binaire de recherche	66
3.2.2	Théorème de Berry-Esseen et principe de grandes déviations pour des variables discrètes conditionnées	72
4	Moyennes de Fréchet - Barycentres sur l'espace de Wasserstein	81
4.1	Caractérisation des moyennes de Fréchet	81
4.1.1	Introduction	81
4.1.2	Existence et unicité du barycentre théorique	84
4.1.3	Barycentre pour des mesures de probabilités sur \mathbb{R}	86

4.1.4	Formulation duale	87
4.1.5	Une caractérisation explicite du barycentre théorique	88
4.1.6	Une application aux modèles de déformation en statistique	89
4.1.7	Convergence presque sûre du barycentre empirique vers le barycentre théorique	91
4.1.8	Pour dépasser l'hypothèse de compacité	92
4.2	A.C.P. suivant une géodésique dans l'espace de Wasserstein	92
4.2.1	Introduction	92
4.2.2	A une isométrie près l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$ est un sous-ensemble convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$	96
4.2.3	Analyse en composantes principales convexes CPCA	98
4.2.4	L'analyse en composantes principales géodésiques (GPCA)	100
4.2.5	Exemples de GPCA dans $W_2(\mathbb{R})$	101
4.2.6	Etude de la convergence	104
4.2.7	A propos de la GPCA dans $W_2(\Omega)$ et de la PCA dans les sous variétés Riemanniennes	106
4.2.8	Appendice	107
5	Deux exemples de bornes de risques minimax	109
5.1	Algorithme des plus proches voisins en dimension finie	109
5.1.1	Introduction	109
5.1.2	Cadre statistique et le classifieur des plus proches voisins	111
5.1.3	Cas des densités uniformément minorées	115
5.1.4	Cas général pour les espaces de dimension finie	116
5.2	Estimation de l'intensité de Processus non homogènes de Poissons	121
5.2.1	Introduction	121
5.2.2	Un problème de déconvolution	122
5.2.3	Borne inférieure pour le risque minimax sur des boules de Besov	124
5.2.4	Estimation adaptative dans les espaces de Besov	126
5.2.5	Simulations numériques	128
5.2.6	Discussion	129
6	Analyse de sensibilité et quantification des incertitudes	133
6.1	La problématique de la quantification des incertitudes	133
6.2	Détection de variables importantes et indices de Sobol	134
6.3	Estimation d'un indice de Sobol, l'estimateur Pick-Freeze	135
6.3.1	Les estimateurs Pick-Freeze	135
6.3.2	Propriétés asymptotiques des estimateurs	136
6.3.3	Efficacité asymptotique	137
6.3.4	Propriétés non asymptotiques	137
6.4	Estimation jointe de plusieurs indices de Sobol et tests statistiques	140
6.5	Sorties vectorielles et fonctionnelles	144
6.5.1	Introduction	144
6.5.2	Motivation	145
6.5.3	Indices de Sobol généralisés	146
6.5.4	Où il est montré qu'on ne peut pas avoir unicité d'un indice vectoriel	148
6.5.5	Estimation de $S^u(f)$	150
6.5.6	Cas des sorties fonctionnelles	151
6.6	Où il est parfois possible de faire mieux que la méthode Pick-Freeze	152
6.6.1	Introduction	152
6.6.2	Le modèle	153
6.6.3	Le cas $p = 1$ pour comprendre ce qui se passe	153
6.6.4	Cas général	155
6.6.5	Comparaison des estimateurs Karhunen-Loève et des estimateurs Pick-Freeze	157

6.7	Une première généralisation des indices de Sobol	159
6.7.1	Introduction	159
6.7.2	Méthode Pick-Freeze d'ordre p	160
6.7.3	Indices basés sur la distance de Cramér-von Mises	161
6.7.4	Quelques illustrations numériques	162
6.8	Une méthode générale pour construire des indices bien adaptés	164
6.8.1	Généralisation des indices de Sobol	164
6.8.2	La remarque clé	164
6.8.3	La notion de fonction de contraste	165
6.8.4	Une liste non exhaustive de contrastes	165
6.8.5	Sensitivité par rapport à un contraste	166
6.8.6	Exemples jouets	166
6.8.7	Estimation des indices.	168

Chapitre 1

Introduction

En théorie, l'habilitation à diriger des recherches est censée présenter une synthèse et une unification des travaux de recherche effectués. On est donc obligé de trouver un rapport intelligent entre

- les inégalités de concentration,
- les principes de grandes déviations,
- l'arbre binaire de recherche,
- les propriétés statistiques des estimateurs des indices de Sobol,
- l'existence de barycentres dans l'espace de Wasserstein,
- l'estimation de l'intensité de processus de Poisson,
- l'optimalité de l'algorithme des k -plus proches voisins,
- des problèmes de M -estimation lorsque l'on dispose de deux sources différentes de données,
- des problèmes d'estimation de probabilités de défaillance sous des hypothèses de monotonie.

Il est assez facile de mettre dans une même boîte inégalités de concentration et principes de grandes déviations puisque les unes comme les autres ont pour objectif de quantifier la vitesse de convergence dans la loi forte des grands nombres. Le lien entre les principes de grandes déviations et l'arbre binaire réside dans les objets étudiés, il s'agit de structures combinatoires discrètes venant du monde de l'informatique théorique et de la combinatoire.

Le type de résultats obtenus et les techniques de preuves permettent de relier (pas trop artificiellement) mes travaux sur les processus de Poisson et sur l'algorithme des k plus proches voisins.

Ce sont des motivations industrielles qui permettent d'unifier la partie autour des indices de Sobol, celle autour de la M -estimation et celle de l'estimation de probabilités de défaillance.

Finalement, on se trouve face à quatre blocs sans lien apparent (même si la partie sur l'espace de Wasserstein devrait fournir de nombreuses applications à des problèmes industriels) :

- les inégalités de concentration - les principes de grandes déviations - l'arbre binaire de recherche.
- l'existence de barycentres dans l'espace de Wasserstein - la notion d'analyse en composantes principales
- l'estimation de l'intensité de processus de Poisson - l'optimalité de l'algorithme des k -plus proches voisins.
- les propriétés statistiques des estimateurs des indices de Sobol - des problèmes de M -estimation lorsque l'on dispose de deux sources différentes de données et des problèmes d'estimation de probabilités de défaillances sous certaines contraintes de monotonie.

Mis à part que l'on trouve des variables aléatoires dans chacun de mes travaux, il n'y a pas réellement de lien mathématique entre ces blocs. Le lien est tout autre. Il est à l'image de ma façon de faire de la recherche, je ne travaille jamais seul. Le choix de mes sujets de recherche est un choix humain commençant la plupart du temps devant une tasse de café. Il est donc à ce stade essentiel de préciser que ce document n'existerait pas sans le formidable travail de mes coauteurs. Nous allons donc expliquer comment ils sont apparus dans mon paysage mathématique.

La vie de chercheur commence généralement par une thèse et par un directeur de thèse qui influe sur les premières thématiques choisies. Emmanuel Rio (mon directeur de thèse) m'a mis le pied à l'étrier et m'a

fait travailler sur l'un de ces thèmes de recherche - les inégalités de concentration. Nous avons travaillé d'une part sur l'amélioration des constantes dans les inégalités dites de Talagrand et d'autres part sur des inégalités de concentrations convexes [147, 151]. Ces inégalités de concentrations convexes n'étaient qu'au stade de genèse dans mes travaux de thèse et ont intéressées Nicolas Privault. Ce dernier ma gentiment proposé de continuer de travailler avec lui et son étudiante en thèse Yutao Ma sur cette thématique, ce qui nous a permis de concrétiser certaines idées présentes dans la thèse. Avant de rentrer, dans de sordides détails mathématiques, il me semble important ici de rendre hommage à Nicolas. On entend souvent parler de résultats et d'idées volés, en ce qui concerne [150] c'est tout le contraire. Début 2004, je reçois un mail de Nicolas qui me dit qu'il a lu mes travaux de thèse et me propose de travailler avec lui et Yutao sur certaines extensions de mes résultats. J'accepte, on discute deux jours ensemble à La Rochelle et quelques jours plus tard ils m'envoient une première version de [150]. A la lecture de cette première version, il est évident que Nicolas et Yutao auraient pu écrire cet article sans moi, ils ne l'ont pas fait

Ma thèse se déroulait au laboratoire de mathématiques de l'université de Versailles-Saint-Quentin, dont l'équipe de probabilité était déjà à l'époque experte dans l'étude probabiliste d'objets combinatoires. Mon intérêt pour le travail des autres (et une entorse à la cheville) m'ont conduit à travailler avec Brigitte Chauvin, Jean-François Marckert et Alain Rouault sur certaines propriétés des arbres binaires de recherche [70].

Une fois la thèse terminée, je n'ai jamais regretté d'avoir suivi le conseil d'Alain : "une fois à Toulouse essaie de travailler avec Fabrice Gamboa, c'est quelqu'un de très vif". Restait à trouver un sujet à proposer à Fabrice. Etant toujours intéressé par les structures combinatoires et ayant toujours été attiré par les principes de grandes déviations, un très joli sujet m'a été suggéré par Jean-François, il s'agissait de poursuivre les travaux de Svante Janson qui avait établi un théorème central limite pour des lois conditionnelles du type $\mathcal{L}(\sum_{i=1}^n Y_i | \sum_{i=1}^n X_i = m)$, ce type de loi apparaissant dans de nombreuses structures combinatoires où il est classique de conditionner par la taille de la structure. Cette étude s'est concrétisée par deux travaux l'un en collaboration avec Fabrice Gamboa et Clémentine Prieur, l'autre en collaboration avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [111, 149].

Fabrice Gamboa a joué un rôle central dans mon évolution après la thèse. C'est d'une part avec lui que j'ai écrit mon premier article post thèse (j'enlève celui avec Nicolas et Yutao qui était un travail dans la continuité de ceux de ma thèse). D'autre part, il est responsable de tous les travaux issus de problématiques plus ou moins industrielles et donc d'une grande partie de mes travaux en statistique. Il m'a proposé d'une part de coencadrer la thèse de Nabil Rachdi avec Jean-Claude Fort et celle de Vincent Moutoussamy et d'autre part de participer à l'ANR Costa Brava. Cet encadrement et ce projet ANR ont débouché d'une part sur une série de travaux autour des indices de Sobol - travaux menés en collaboration avec Jean-Claude Fort, Fabrice Gamboa, Alexandre Janon, Agnès Lagnoux, Béatrice Laurent, Maëlle Nodet, Clémentine Prieur et Nabil Rachdi [136, 101, 102, 110, 109, 108], d'autre part des travaux autour de la M -estimation lorsque l'on dispose de différentes sources de données - travaux menés en collaboration avec Jean-Claude Fort et Nabil Rachdi [205, 204] et ceux de l'estimation de probabilités de défaillance sous contraintes de monotonie en collaboration avec Nicolas Bousquet et Vincent Moutoussamy [49].

Toujours autour de cafés, j'ai eu la chance de rencontrer des personnes formidables qui m'ont proposé de travailler avec elles. En particulier Jérémie Bigot et Sébastien Gadat m'ont invité à regarder avec eux et Clément Marteau, le problème de l'estimation de l'intensité de processus de Poisson aléatoirement shiftés [34]. Par la suite Sébastien m'a aussi permis de m'intéresser à l'algorithme de classification des plus proches voisins [105]. Un matin, Jérémie arrive dans mon bureau et pose sur celui-ci l'article de Agueh et Carlier [2] et il me dit : " je crois qu'il y a plein de choses à faire en partant de leur travail". En effet, cela nous a permis de travailler autour de problèmes d'existence de barycentre (ou moyenne de Fréchet) dans l'espace de Wasserstein. Il s'agit d'une part de donner des conditions assurant l'existence et l'unicité d'un barycentre pour une famille de mesures aléatoires puis d'étudier certaines propriétés statistiques de ces barycentres [37]. Par la suite, avec Jérémie Bigot, Raúl Gouet et Alfredo López, nous avons défini une notion d'analyse en composantes principales dans l'espace de Wasserstein [36].

J'ai présenté ici, toutes les personnes avec qui j'ai eu l'honneur d'écrire au moins un papier (avec certaines beaucoup plus qu'un). Il y a au moins trois personnes avec qui j'ai failli écrire quelque chose Jean-Marc Azaïs, Mireille Bousquet-Mélou et Charles Bordenave malheureusement à chaque fois, nous avons été précédés par d'autres chercheurs qui ont montré les résultats cherchés avant nous. Toute personne se rendant sur ma page web se rendra compte d'une absence de publications entre 2005 et 2012 qui est le reflet d'un passage à vide dans ma vie de chercheur. Pendant cette période, Patrick Cattiaux (alors responsable de l'équipe) est venu me voir et m'a dit qu'il était temps que je me remette sérieusement à la recherche. Il me semble qu'il a bien fait de venir me voir et que les pages qui suivent sont la preuve que la reprise a été relativement fructueuse.

J'ai décidé de présenter dans ce manuscrit presque tous mes résultats à quelques exceptions près. J'ai omis les travaux issus des thèses de Nabil et de Vincent. Il s'agit des articles [204, 205] et de la prépublication [49]. Evidemment, ce choix conduit à un manuscrit bien trop long et j'imagine que peu de lecteurs auront le courage de le lire en entier. Le prochain chapitre propose une synthèse des chapitres qui suivent, c'est peut-être finalement l'unique chapitre à lire. Le reste du manuscrit est organisé comme suit.

- Le Chapitre 2 propose une synthèse générale de ce document ; il se veut concis non exhaustif et mettra en avant les résultats les plus intéressants.
- Le Chapitre 3 rassemble d'une part une partie des résultats obtenus pendant ma thèse (inégalités de concentration, étude de l'arbre binaire de recherche) et d'autre part les travaux effectués (et en cours) sur des problèmes de grandes déviations pour certaines lois conditionnelles apparaissant naturellement dans de nombreux modèles combinatoires.
- Le Chapitre 4 traite des problèmes d'existence de moyennes et d'analyse en composantes principales dans les espaces de Wasserstein.
- Dans le Chapitre 5, nous présentons deux situations statistiques différentes dans lesquelles nous avons obtenu des bornes minimax pour les risques associés
- Le Chapitre 6 présente tous les résultats obtenus autour des indices de Sobol.

Chapitre 2

Synthèse générale

Nous présentons ici une synthèse générale des résultats obtenus depuis le début de ma thèse en 2000, chaque section correspond à un des quatre chapitres ayant le même titre.

2.1 Inégalités de concentration - structures discrètes et principe de grandes déviations

2.1.1 Autour des inégalités de concentration

Ce chapitre rassemble d'une part les travaux effectués durant ma thèse à Versailles sous la direction d'Emmanuel, ainsi que ceux plus récents effectués à Toulouse autour des principes de grandes déviations (PGD). Les premiers résultats obtenus [147, 151] sont des inégalités de concentration pour des suprema de processus empiriques. Ces inégalités sont des généralisations des inégalités de Hoeffding, Bernstein, Bennett. Elles ont été bien comprises par Talagrand qui les a introduites dans le théorème qui suit.

Théorème 2.1.1 (Talagrand [237]). *Soient X_1, \dots, X_n des variables aléatoires indépendantes à valeurs dans \mathbb{R} et \mathcal{F} un ensemble de fonctions mesurables de \mathbb{R} dans $[-1, 1]$. Alors si $Z = \sup\{f \in \mathcal{F}, S_n(f)\}$, il existe deux constantes positives a et b telles que pour tout $t > 0$, on ait*

$$\log \mathbb{E} \exp(tZ) \leq t\mathbb{E}(Z) + Vab^{-2}(e^{bt} - bt - 1), \quad (2.1)$$

où $S_n(f) = \sum_{j=1}^n f(X_j)$ et $V = \mathbb{E}\left(\sup_{s \in \mathcal{F}} \sum_{k=1}^n (s^k(X_k))^2\right)$.

Les résultats de Talagrand proposaient deux challenges. Le premier était de trouver les constantes optimales a et b et le second de remplacer le facteur de variance $V = \mathbb{E}\left(\sup_{s \in \mathcal{F}} \sum_{k=1}^n (s^k(X_k))^2\right)$ par le facteur de variance naturel $V_n = \sup_{s \in \mathcal{F}} \text{Var} S_n(s)$. En appliquant les inégalités de comparaisons dues à Ledoux et Talagrand [166] on peut montrer que $V_n \leq V \leq V_n + 16\mathbb{E}(Z)$ (Massart [176], p. 882). Ainsi le terme de Variance V dans le résultat de Talagrand est souvent proche de la variance maximale V_n .

La conjecture concernant les constantes est $a = b = 1$. En 1997, Ledoux [164] a utilisé une méthode à la log-Sobolev ainsi qu'un joli argument de tensorisation de l'entropie pour réobtenir les inégalités de Talagrand. En appliquant la méthode de Ledoux, Massart [176] a montré que les inégalités de Talagrand étaient valides avec $a = 8$ et V comme facteur variance ou $a = 4$ et $V_n + 16\mathbb{E}(Z)$ comme facteur variance. En 2002, Rio [213] a prouvé les inégalités pour des variables aléatoires i.i.d. avec $a = 1$, $b = 3/2$ et le facteur variance $v = V_n + 2\mathbb{E}(Z)$. Puis, toujours pour des variables aléatoires i.i.d. Bousquet [50] a obtenu (2.1) avec $a = b = 1$ et le facteur variance v .

Si l'on regarde attentivement, le résultat de Talagrand le contrôle de la transformée de Laplace n'est obtenu que pour des valeurs de t positives. Cependant, si l'on désire avoir des inégalités de déviation à gauche, il est nécessaire d'avoir des contrôles pour des valeurs négatives de t .

Un de mes résultats a consisté à obtenir des inégalités de type ‘‘Talagrand pour les déviations à gauche’’. En effet, le contrôle de la transformée de Laplace obtenu dans le Théorème 2.1.2 montre que l’on peut obtenir ces inégalités avec $a = 1$, $b = 4$ et le même facteur v .

Théorème 2.1.2 (Klein [147]). *Soient \mathcal{X} un espace polonais muni de sa tribu borélienne et $(X_i)_{i=1,\dots,n}$ une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi P à valeurs dans \mathcal{X} . Soit \mathcal{F} une classe dénombrable de fonctions mesurables de \mathcal{X} dans $]-\infty, 1]$ telle que $\forall f \in \mathcal{F}, \mathbb{E}(f(X)) = 0$ et $\sup_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}(f(X)^2) \leq \sigma^2 < \infty$. Soit*

$$Z = \sup_{f \in \mathcal{F}} \{S_n(f) = f(X_1) + \dots + f(X_n)\}$$

1. *Si les fonctions sont à valeurs dans $[-1, 1]$, alors pour tout $x > 0$*

$$\mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{v_n}{16} h\left(\frac{4x}{v_n}\right)\right), \quad (2.2)$$

avec $v_n = n\sigma^2 + 2\mathbb{E}(Z)$ et $h(x) = (1+x)\log(1+x) - x$

2. *Si pour tout $f \in \mathcal{F}$ et tout $p \geq 2$, $|\mathbb{E}(f^p(X_i))| \leq \frac{\sigma^2 p!}{2}$ alors*

$$\forall t \in [0, 1], L(t) \leq -te^{-t}\mathbb{E}(Z) + \frac{n\sigma^2}{2} \frac{t^2(1+2t)}{1-t}, \quad (2.3)$$

et donc

$$\mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{v}{u^2} (u-v)^2 \left(1 - 2\frac{v(u-v)}{u^2}\right)\right), \quad (2.4)$$

où $L(t)$ est la log-Laplace de $-Z$, $u = \sqrt{x + v_n/2}$ et $v = \sqrt{v_n/2}$.

Par la suite, nous avons obtenu avec Emmanuel des inégalités de déviations à gauche et à droite avec des constantes quasi-optimales dans le cas où les variables sont seulement supposées indépendantes.

Théorème 2.1.3 (Klein-Rio [151]). *Soient X_1, \dots, X_n une suite de variables aléatoires indépendantes à valeurs dans un espace polonais \mathcal{X} . Soit \mathcal{S} une classe dénombrable de fonctions mesurables de \mathcal{X} à valeurs dans $[-1, 1]^n$. On suppose que $\mathbb{E}(s^k(X_k)) = 0$ pour tout $s = (s^1, \dots, s^n)$ dans \mathcal{S} et tout entier k dans $[1, n]$. On pose $S_n(s) = s^1(X_1) + \dots + s^n(X_n)$ et $Z = \sup\{S_n(s) : s \in \mathcal{S}\}$.*

Soit L le logarithme de la transformée de Laplace de Z . Alors pour tout $t > 0$,

$$(a) \quad L(t) \leq t\mathbb{E}(Z) + \frac{t}{2}(2\mathbb{E}(Z) + V_n)(\exp((e^{2t} - 1)/2) - 1).$$

Par suite si $v = 2\mathbb{E}(Z) + V_n$, et $x > 0$, on a

$$(b) \quad \mathbb{P}(Z \geq \mathbb{E}(Z) + x) \leq \exp\left(-\frac{x}{4} \log\left(1 + 2\log(1 + x/v)\right)\right)$$

et

$$(c) \quad \mathbb{P}(Z \geq \mathbb{E}(Z) + x) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{v + \sqrt{v^2 + 3vx} + (3x/2)}\right) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{2v + 3x}\right).$$

Théorème 2.1.4 (Klein-Rio [151]). *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 2.1.3 pour tout $t > 0$,*

$$(a) \quad L(-t) \leq -t\mathbb{E}(Z) + \frac{v}{9}(e^{3t} - 3t - 1).$$

Par suite, pour $x > 0$,

$$(b) \quad \mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{v}{9} h\left(\frac{3x}{v}\right)\right),$$

où $h(x) = (1+x)\log(1+x) - x$, et

$$(c) \quad \mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{v + \sqrt{v^2 + 2vx} + x}\right) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{2v + 2x}\right).$$

Il y a essentiellement deux points clés dans les démonstrations des inégalités de type Talagrand.

1. D'une part, on utilise l'inégalité de Markov, pour tout $t > 0$,

$$\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq x) \leq \exp\left(\log\left(\mathbb{E}\left(e^{t(Z - \mathbb{E}(Z))}\right)\right)\right) e^{-tx}.$$

Notons $\phi_t(x) = e^{tx}$ alors cette inégalité se réécrit

$$\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq x) \leq \frac{\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))}{\phi_t(x)}.$$

La borne idéale serait alors

$$\inf_{t>0} \left\{ \frac{\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))}{\phi_t(x)} \right\}. \quad (2.5)$$

Il est difficile de trouver la valeur de l'infimum, ainsi afin de poursuivre le calcul on essaie de trouver un majorant sympathique de $\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))$.

2. D'autre part, la majoration de $\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))$ est obtenue à l'aide d'une inégalité de tensorisation de l'entropie due à Ledoux [164].

A la vue des deux éléments clés énoncés, la motivation pour introduire des inégalités de concentration convexe est double. D'une part, comme les applications $x \mapsto \phi_t(x)$ sont convexes, on peut remplacer dans (2.5) l'infimum sur les fonctions $(\phi_t)_{t>0}$ par un infimum sur toutes les fonctions convexes. On espère ainsi, obtenir des inégalités plus précises. D'autre part, comme l'inégalité de tensorisation de Ledoux nécessite l'indépendance des variables $(X_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$, il semble difficile de pouvoir obtenir par cette méthode des inégalités de déviations lorsque les variables ne sont plus indépendantes.

Définition 2.1.1. Soient X et Y deux variables aléatoires, on dira que X est plus concentrée que Y au sens des fonctions convexes si

$$\mathbb{E}(\phi(X)) \leq \mathbb{E}(\phi(Y)), \quad \forall \phi \text{ convexe.} \quad (2.6)$$

Le concept d'inégalités de concentration convexe a été introduite par Hoeffding [128]. Dans cet article, Hoeffding compare $\mathbb{E}(\phi(S_n))$ avec $\mathbb{E}(\phi(S_n^*))$, où $S_n = \sum_{i=1}^n b_i$ est la somme de n variables aléatoires indépendantes de Bernoulli de paramètre p_i et S_n^* est une variable aléatoire de loi binomiale $B(n, \bar{p})$ où \bar{p} est la moyenne arithmétique des p_i . Il a montré le résultat suivant.

Proposition 2.1.1 (Hoeffding [128], Shorack-Wellner [228]). Soient $(b_i)_{1 \leq i \leq n}$ des variables aléatoires indépendantes de loi Bernoulli de paramètre p_i et $S_n = \sum_{i=1}^n b_i$. Soit $\bar{p} = \frac{\sum_{i=1}^n p_i}{n}$ alors pour toute fonction convexe ϕ , on a

$$\mathbb{E}(\phi(S_n)) \leq \mathbb{E}(\phi(B(n, \bar{p}))). \quad (2.7)$$

Remarque 2.1.1. Hoeffding [128] et Bretagnolle [53] ont remarqué qu'à partir de ce type d'inégalité, on peut en déduire des inégalités sur les queues de distributions du type

$$\mathbb{P}(S_n \geq t) \leq c \mathbb{P}(B(n, \bar{p}) \geq t).$$

Le calcul explicite d'une telle inégalité ainsi qu'une explicitation de la constante c se trouvent dans les travaux de Pinelis [196] et [195]. Grâce aux travaux de Pinelis, on se rend compte de la puissance des inégalités de concentration convexe. En effet, si X est plus concentré que Y au sens des fonctions convexes et si l'on sait contrôler finement la queue de distribution de Y , on récupère un bon contrôle de la queue de distribution de X .

J'ai obtenu des résultats de concentration convexe d'une part pour des familles de variables aléatoires dites négativement associées avec application au suprémum de variables aléatoires binomiales et de Poisson et d'autre part pour des familles générales de processus se décomposant en une somme d'une martingale forward et d'une martingale backward. Les premiers résultats n'ont pas été publiés, les preuves se trouvent donc

dans mon manuscrit de thèse, les seconds résultats sont issus d'une collaboration avec Yutao Ma et Nicolas Privault [150]. Je ne présente ici que les résultats obtenus dans [150] (l'intégralité des autres résultats se trouve dans mon manuscrit de thèse). La description complète des processus étudiés avec Nicolas et Yutao est assez fastidieuse; on se contente ici de rester légèrement vague pour permettre une lecture plus fluide. Soit (Ω, \mathcal{F}, P) un espace de probabilité munie d'une filtration croissante $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ ainsi que d'une filtration décroissante $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$. On se donne $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ une \mathcal{F}_t -forward martingale et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ une \mathcal{F}_t^* -backward martingale. On suppose que $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est càd-làg, et que $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est càg-làd. Les deux processus $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ ont pour mesures de sauts

$$\mu(dt, dx) = \sum_{s>0} 1_{\{\Delta M_s \neq 0\}} \delta_{(s, \Delta M_s)}(dt, dx),$$

et

$$\mu^*(dt, dx) = \sum_{s>0} 1_{\{\Delta^* M_s^* \neq 0\}} \delta_{(s, \Delta^* M_s^*)}(dt, dx),$$

où $\delta_{(s,x)}$ est la mesure de Dirac au point $(s, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$. On note $\nu(dt, dx)$ et $\nu^*(dt, dx)$ les $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ -les projections duales prévisibles de $\mu(dt, dx)$ et $\mu^*(dt, dx)$, i.e.

$$\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(s, x)(\mu(ds, dx) - \nu(ds, dx)) \quad \text{et} \quad \int_t^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(s, x)(\mu^*(ds, dx) - \nu^*(ds, dx))$$

sont respectivement des \mathcal{F}_t -forward et \mathcal{F}_t^* -backward martingales locales pour tout processus f , resp. g suffisamment intégrable et \mathcal{F}_t -prévisible, resp. \mathcal{F}_t^* -prévisible. Les couples

$$(\nu(dt, dx), \langle M^c, M^c \rangle) \quad \text{et} \quad (\nu^*(dt, dx), \langle M^{*c}, M^{*c} \rangle)$$

sont appelés les caractéristiques locales de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et de $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$, cf. [135] pour le cas forward. Dans la suite, on supposera que les caractéristiques sont de la forme suivante

$$\nu(du, dx) = \nu_u(dx)du \quad \text{et} \quad \nu^*(du, dx) = \nu_u^*(dx)du, \quad (2.8)$$

et

$$d\langle M^c, M^c \rangle_t = |H_t|^2 dt, \quad \text{et} \quad d\langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_t = |H_t^*|^2 dt, \quad (2.9)$$

où $(H_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(H_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$, sont respectivement prévisibles par rapport à $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et à $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$.

Remarque 2.1.2. Il peut paraître étrange de faire des hypothèses du style (ou de considérer ce genre de modèle)

“ $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est une \mathcal{F}_t^* -adaptée, \mathcal{F}_t -forward martingale, et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est une \mathcal{F}_t -adaptée, \mathcal{F}_t^* -backward martingale”.

Cependant, elle est cruciale pour démontrer les Théorèmes 2.1.5 et 2.1.6. En effet, l'élément clé de la preuve est une formule de type formule d'Itô (voir le Théorème 2.1.7) pour des martingales forward/backward appliquée à $\phi(M_t + M_t^*)$. Cette formule nécessite de pouvoir définir des quantités comme $\int_{s^+}^t \phi'(M_{u^-} + M_u^*) dM_u$ et $\int_s^{t^-} \phi'(M_u + M_{u^+}^*) d^* M_u^*$. Ces processus ne peuvent être rigoureusement définis si l'hypothèse précédente n'est pas vérifiée.

Nous pouvons enfin énoncer les résultats principaux

Théorème 2.1.5 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient*

$$\bar{\nu}_u(dx) = x\nu_u(dx), \quad \text{et} \quad \bar{\nu}_u^*(dx) = x\nu_u^*(dx), \quad u \in \mathbb{R}_+.$$

On suppose que

i) $\bar{\nu}_u([x, \infty)) \leq \bar{\nu}_u^([x, \infty)) < \infty$, $x, u \in \mathbb{R}$, et*

ii) $|H_u| \leq |H_u^*|$, $dPdu - p.p.$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(M_t + M_t^*)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_s + M_s^*)], \quad 0 \leq s \leq t, \quad (2.10)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Sous des hypothèses de type L^2 , on a aussi

Théorème 2.1.6 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient*

$$\tilde{\nu}_u(dx) = |x|^2 \nu_u(dx) + |H_u|^2 \delta_0(dx), \quad \tilde{\nu}_u^*(dx) = |x|^2 \nu_u^*(dx) + |H_u^*|^2 \delta_0(dx),$$

$u \in \mathbb{R}_+$, et supposons que $\tilde{\nu}_u([x, \infty)) \leq \tilde{\nu}_u^*([x, \infty)) < \infty$, $x \in \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}_+$. Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(M_t + M_t^*)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_s + M_s^*)], \quad 0 \leq s \leq t, \quad (2.11)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que ϕ' existe et est aussi convexe.

Remarque 2.1.3. Il est utile de remarquer ici que $(M_t)_{t \geq 0}$ et $(M_t^*)_{t \geq 0}$ n'ont pas besoin d'être indépendants.

Comme annoncé ci-dessus la preuve des Théorèmes 2.1.5 et 2.1.6 est une conséquence d'une formule de type Itô qui est en soit un résultat digne d'intérêt que nous avons obtenu et que nous énonçons maintenant.

Remarque 2.1.4. Des modèles similaires ont été considérés dans de nombreux travaux ([94, 218, 217]).

Théorème 2.1.7 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus \mathcal{F}_t^* -adapté et une \mathcal{F}_t -forward martingale à trajectoire càd-làg, et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus \mathcal{F}_t -adapté, et une \mathcal{F}_t^* -backward martingale à trajectoires càg-làd, dont les caractéristiques vérifient (2.8) et (2.9). Alors pour tout $f \in C^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$ on a*

$$\begin{aligned} & f(M_t, M_t^*) - f(M_0, M_0^*) \\ &= \int_{0+}^t \frac{\partial f}{\partial x_1}(M_{u-}, M_u^*) dM_u + \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(M_u, M_u^*) d\langle M^c, M^c \rangle_u \\ &+ \sum_{0 < u \leq t} \left(f(M_u, M_u^*) - f(M_{u-}, M_u^*) - \Delta M_u \frac{\partial f}{\partial x_1}(M_{u-}, M_u^*) \right) \\ &- \int_0^{t-} \frac{\partial f}{\partial x_2}(M_u, M_{u+}^*) d^* M_u^* - \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(M_u, M_u^*) d\langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_u \\ &- \sum_{0 \leq u < t} \left(f(M_u, M_u^*) - f(M_u, M_{u+}^*) - \Delta M_u^* \frac{\partial f}{\partial x_2}(M_u, M_{u+}^*) \right), \end{aligned}$$

où d^* désigne la différentielle d' Itô backward et $(M_t^c)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(M_t^{*c})_{t \in \mathbb{R}_+}$ dénotent respectivement les parties continues de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et de $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$.

Nous allons maintenant donner un exemple très simple qui est une conséquence des résultats précédents. Pour cela, prenons un mouvement brownien standard $(W_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et un processus ponctuel $(Z_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ d'intensité $(\lambda_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, munissons-les d'une filtration $(\mathcal{F}_t^M)_{t \in \mathbb{R}_+}$. Considérons la variable aléatoire F définie par

$$F = \mathbb{E}[F] + \int_0^{+\infty} H_t dW_t + \int_0^{+\infty} J_t (dZ_t - \lambda_t dt), \quad (2.12)$$

où $(H_u)_{u \in \mathbb{R}_+}$ est un processus prévisible de carré intégrable et $(J_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est quant à lui un processus prévisible qui est soit de carré intégrable, soit positif, soit intégrable.

On note par $\tilde{N}(c)$ une variable aléatoire de Poisson de paramètre $c > 0$ recentrée et par $W(\beta^2)$ une variable aléatoire gaussienne centrée et de variance $\beta^2 \geq 0$. On suppose que $\tilde{N}(c)$ et $W(\beta^2)$ sont indépendantes.

Théorème 2.1.8 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soit F définie par*

$$F = \mathbb{E}[F] + \int_0^{+\infty} H_t dW_t + \int_0^{+\infty} J_t (dZ_t - \lambda_t dt).$$

i) Supposons qu'il existe $k > 0$ pour lequel $0 \leq J_t \leq k$, $dPdt$ -p.p., et posons

$$\beta_1^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt \right\|_{\infty} \quad \text{et} \quad \alpha_1 = \left\| \int_0^{+\infty} J_t \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi \left(W(\beta_1^2) + k\tilde{N}(\alpha_1/k) \right) \right], \quad (2.13)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

ii) Supposons qu'il existe $k > 0$ pour lequel $J_t \leq k$, $dPdt$ -p.p. et soit

$$\beta_2^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt \right\|_{\infty} \quad \text{and} \quad \alpha_2^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |J_t|^2 \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi \left(W(\beta_2^2) + k\tilde{N}(\alpha_2^2/k^2) \right) \right], \quad (2.14)$$

pour toute fonction convexe \mathcal{C}^2 $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que ϕ' est convexe.

iii) Supposons que $J_t \leq 0$, $dPdt$ -p.p., et soit

$$\beta_3^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt + \int_0^{+\infty} |J_t|^2 \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi(W(\beta_3^2)) \right], \quad (2.15)$$

pour toute fonction convexe \mathcal{C}^2 $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telles que ϕ' est convexe.

Ainsi les Théorèmes 2.1.5 et 2.1.6 permettent d'obtenir des contrôles fins de queues de variables aléatoires assez complexes comme

$$F = \mathbb{E}[F] + \int_0^{+\infty} H_t dW_t + \int_0^{+\infty} J_t (dZ_t - \lambda_t dt).$$

2.1.2 Autour des structures discrètes

Dans cette partie, nous allons présenter d'une part le travail effectué avec Brigitte Chauvin, Jean-François Marckert et Alain Rouaut [70] autour des arbres binaires de recherche et d'autre part les deux travaux effectués autour des grandes déviations pour des variables discrètes conditionnées, le premier en collaboration avec Fabrice Gamboa et Clémentine Prieur [111] et le second avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [149].

L'arbre binaire de recherche

Dans ce travail, on s'est intéressé à deux modèles classiques de processus binaires : un processus à temps discret, l'arbre binaire de recherche et un processus à temps continu, le processus de Yule.

- Un arbre binaire de recherche labellisé (ABRL) est une structure utilisée en informatique pour stocker des données ordonnées. Au temps $t = 0$ l'ABRL est réduit à une feuille sans label. A chaque unité de temps, un nouvel objet est inséré sur une feuille de l'arbre. Cette feuille devient alors un nœud interne et donne naissance à deux nouvelles feuilles. On va s'intéresser à la suite des arbres délabélisés $(\mathcal{T}_n)_n$ induits par cette construction. On appellera cette suite le processus d'arbre binaire de recherche (processus ABR).

- Le processus de Yule $(\mathbb{T}_t)_t$ est un processus à temps continu à valeur arbre binaire, dans lequel les feuilles

se comportent indépendamment les unes des autres (au temps $t = 0$ l'arbre est réduit à une feuille). Après un temps aléatoire de loi exponentielle, une feuille a deux enfants.

En fait, ces deux modèles sont fortement connectés si l'on choisit convenablement l'aléa générant l'ABRL. Sous ce modèle, si τ_n est le temps aléatoire auquel la feuille $n + 1$ apparaît alors $(\mathbb{T}_{\tau_n})_n$ et $(\mathcal{T}_n)_n$ ont la même loi.

Cette correspondance forte entre ces deux modèles (on plonge le modèle discret dans un modèle à temps continu) a permis de répondre à certaines questions ouvertes posées par Jabbour [69, 134] sur le comportement asymptotique du profil de l'arbre

$$U_k(n) := \#\{u \in \partial\mathcal{T}_n, |u| = k\} \quad , \quad k \geq 1. \quad (2.16)$$

$U_k(n)$ est le nombre de feuilles de l'arbre \mathcal{T}_n qui sont au niveau k . En particulier, Jabbour a montré comment coder le profil à l'aide d'une martingale

$$\mathcal{M}_n(z) := \frac{1}{C_n(z)} \sum_{k \geq 0} U_k(n) z^k = \frac{1}{C_n(z)} \sum_{u \in \partial\mathcal{T}_n} z^{|u|}, \quad (2.17)$$

où $C_0(z) = 1$ et pour $n \geq 1$,

$$C_n(z) := \prod_{k=0}^{n-1} \frac{k+2z}{k+1} = (-1)^n \binom{-2z}{n}, \quad (2.18)$$

$\mathcal{M}_n(z)$ est une martingale pour la filtration $\mathcal{F}_{(n)}$ engendrée par les événements $\{u \in \mathcal{T}_j\}_{j \leq n, u \in \mathbb{U}}$. Si $z > 0$, la martingale étant positive elle converge donc presque sûrement vers une limite notée $\mathcal{M}_\infty(z)$. Jabbour [134] a montré que la limite est strictement positive si $z \in]z_c^-, z_c^+[$, où

$$z_c^- = c'/2 = 0.186\dots, \quad z_c^+ = c/2 = 2.155\dots \quad (2.19)$$

et que $\mathcal{M}_\infty(z) = 0$ si $z \notin [z_c^-, z_c^+]$. Cette martingale permet aussi de montrer que le profil correctement renormalisé autour de $2 \log n$ a une forme gaussienne (voir Théorème 1 dans [69]).

Le lecteur attentif aura remarqué l'absence de résultat si $z = z_c^-$ ou si z_c^+ . Le plongement du modèle discret de Jabbour dans un modèle à temps continu a permis de caractériser le comportement de la martingale aux points critiques, ainsi que certaines propriétés des martingales dérivées. Les résultats précis se trouvent dans l'article [70].

A la poursuite de Svante Janson

Cette partie présente les travaux réalisés d'une part avec F. Gamboa et C. Prieur [111] et d'autre part avec A. Lagnoux et P. Petit [149].

Comme mentionné dans le Chapitre 1, ces travaux découlent d'une volonté d'une part de continuer à travailler sur des modèles discrets liés à l'informatique théorique et d'autre part d'obtenir des principes de grandes déviations. J.F Marckert m'a alors conseillé la lecture de l'article de S. Janson [138]. Cet article est le point de départ des travaux [111, 149]. Nous allons commencer par le présenter succinctement.

Le travail de Janson

S. Janson part de la constatation suivante : dans de nombreux problèmes combinatoires, la distribution de la quantité d'intérêt est la loi d'une moyenne empirique construite à partir d'un échantillon i.i.d. conditionné par une variable exogène. Cette variable exogène est elle-même (la plupart du temps) une moyenne empirique construite à partir d'un échantillon i.i.d. De façon plus précise, notons \mathbb{N}^* l'ensemble des entiers naturels positifs et $\mathbb{N} = \mathbb{N}^* \cup 0$ et donnons-nous

1. $(k_n)_n$ une suite d'entiers et $(N_n)_n$ une suite d'entiers strictement positifs

2. $\mathbf{X} = (X_j^{(n)})_{n \in \mathbb{N}^*, j=1, \dots, N_n}$ et $\mathbf{Y} = (Y_j^{(n)})_{n \in \mathbb{N}^*, j=1, \dots, N_n}$ deux tableaux triangulaires de variables aléatoires. Les tableaux sont tels que sur chaque ligne les variables sont i.i.d. (les lignes sont indépendantes entre elles). Mais les tableaux ne sont pas forcément indépendants entre eux (si c'est le cas, la loi conditionnelle sera triviale). Le point crucial pour la suite est que les variables du tableau \mathbf{X} sont à valeurs entières.

La quantité étudiée par Janson est la loi de $(N_n)^{-1}T_n := (N_n)^{-1} \sum_{j=1}^{N_n} Y_j^{(n)}$ conditionnée par une valeur précise de $S_n := \sum_{j=1}^{N_n} X_j^{(n)}$. Plus précisément, il a prouvé un théorème central limite pour la loi

$$\mathcal{L}_n := \mathcal{L}((N_n)^{-1}T_n | S_n = k_n). \quad (2.20)$$

De nombreux modèles classiques rentrent dans ce cadre, on peut citer entre autres le modèle d'allocations aléatoires, un modèle de processus de branchement, de forêts aléatoires, de Bose Einstein, de hachage avec essais linéaires.

La preuve de Janson utilise le théorème de Paul Levy. Il s'agit donc de pouvoir décrire le comportement asymptotique de la fonction caractéristique de \mathcal{L}_n . Pour cela, Janson utilise une jolie représentation intégrale de cette fonction caractéristique conditionnée. Cette représentation est une conséquence immédiate d'un lemme dû à Bartlett. Si Z est une variable aléatoire, $\varphi_Z(t) := \mathbb{E}(e^{itZ})$ désignera sa fonction caractéristique.

Lemme 2.1.1 (Formule de Bartlett, Equation (16) [19]). *Soient Z une variable aléatoire à valeurs entières et W une variable aléatoire intégrable. Alors pour tout k entier positif du support de Z ,*

$$\mathbb{E}[W | Z = k] = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \mathbb{E}[W \exp(itZ)] \exp(-ikt) dt}{\int_{-\pi}^{\pi} \varphi_Z(t) \exp(-ikt) dt}.$$

En prenant $W = T_n$ et $Z = S_n$, on obtient une représentation intégrale de la fonction caractéristique sur laquelle on peut faire des développements asymptotiques et en déduire un théorème central limite.

Deux questions naturelles

Une fois un théorème central limite établi, plusieurs questions naturelles se posent, comme par exemple :

1. Peut-on quantifier la vitesse de convergence dans le TCL ?
2. Peut-on regarder le phénomène à d'autres échelles que \sqrt{n} ?

Nous allons répondre à ces deux questions. La vitesse de convergence dans le TCL sera précisée à l'aide d'un théorème de Berry-Esseen (voir Théorème 2.1.9). Un premier Théorème de Berry-Esseen pour ce genre de modèle a été donné par Quine et Robinson [202]. Dans ce travail, les auteurs étudient le cas particulier du problème d'occupation où les variables $X^{(n)}$ sont des variables aléatoires de Poisson et $Y^{(n)} = \mathbf{1}_{\{X^{(n)}=0\}}$. A notre connaissance, c'est le seul résultat existant pour ce type de modèles. Dans ce qui suit, nous établissons un théorème de Berry-Esseen (Théorème 2.1.9) qui couvre tous les exemples présentés ci-dessus. Ensuite, nous regarderons nos modèles à l'échelle des grandes et moyennes déviations (voir Théorèmes 2.1.12 2.1.10 2.1.11). La vitesse classique de grandes déviations pour les sommes de variables aléatoires i.i.d. est donnée par le théorème de Cramér (voir [83]). Elle vaut n . Nous allons obtenir deux sortes de vitesse différentes pour nos modèles conditionnés. D'une part, dans le Théorème 2.1.10 nous retrouvons la vitesse classique n pour les modèles pour lesquels la transformée de Laplace de $(X_j^{(n)}, Y_j^{(n)})$ est bien définie (au moins pour les moyennes déviations dans un voisinage de $(0,0)$). Notre approche consiste à se mettre en situation pour pouvoir appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. L'originalité de l'approche consiste à regarder une transformée double, Fourier en X , Laplace en Y . La partie Fourier permet de réécrire le conditionnement sous forme intégrale et la partie Laplace permet d'appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. L'hypothèse forte d'existence des transformées de Laplace n'est malheureusement pas satisfaite pour le modèle phare du travail de Janson : le hachage avec essais linéaires. Dans cet exemple, la transformée de Laplace de la variable Y n'est pas définie dans un voisinage de 0. Nous développons alors une approche inspirée par les

travaux de Nagaev [184, 185]. Ce dernier établit des résultats de type grandes déviations pour des sommes de variables aléatoires dont les lois sont d'une part absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue et d'autre part dont la transformée de Laplace n'est pas définie dans un voisinage de 0. Nous avons donc établi un résultat de grandes déviations pour le modèle de hachage avec essais linéaires. Lorsque les lois de $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ ne dépendent pas de n , le principe conditionnel de Gibbs ([59, 76, 83]) assure que \mathcal{L}_n converge faiblement vers une loi dégénérée concentrée sur un point χ qui dépend de la valeur conditionnante (voir [111, Corollary 2.2]). Dans le domaine d'attraction du théorème de Gibbs, des théorèmes généraux limites étudient le comportement de la somme conditionnée ([233, 129, 158]) et des développements asymptotiques sont donnés dans [126, 214].

Cadre et notations

Pour tout $n \geq 1$, on considère un couple de variables aléatoires $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ telles que $X^{(n)}$ est à valeurs entières et $Y^{(n)}$ à valeurs dans \mathbb{R} . Soit N_n une suite d'entiers tels que $N_n \rightarrow +\infty$ lorsque n tend vers l'infini. Soit $(X_i^{(n)}, Y_i^{(n)})$ ($i = 1, 2, \dots, N_n$) un échantillon i.i.d. distribué comme $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ et posons

$$S_n := \sum_{i=1}^{N_n} X_i^{(n)} \quad \text{et} \quad T_n := \sum_{i=1}^{N_n} Y_i^{(n)}.$$

Soit $k_n \in \mathbb{Z}$ tel que $\mathbb{P}(S_n = k_n) > 0$ et soit U_n une variable aléatoire de même loi que la loi conditionnelle T_n sachant $S_n = k_n$. Dans la suite, nous présentons une borne de Berry-Esseen et des résultats de grandes déviations pour $(U_n)_{n \geq 1}$.

Borne de Berry-Esseen

Théorème 2.1.9 (Klein, Lagnoux, Petit [149]). *Supposons qu'il existe des constantes strictement positives $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5$, et c_6 telles que*

1. $\tilde{c}_1 \leq \sigma_{X^{(n)}} := \text{Var}(X^{(n)})^{1/2} \leq c_1$;
2. $\rho_{X^{(n)}} := \mathbb{E} \left[|X^{(n)} - \mathbb{E}[X^{(n)}]|^3 \right] \leq c_2^3 \sigma_{X^{(n)}}^3$;
3. soit $Y'^{(n)} := Y^{(n)} - X^{(n)} \text{Cov}(X^{(n)}, Y^{(n)}) / \sigma_{X^{(n)}}^2$, il existe $\eta_0 > 0$ tel que, pour tout $s \in [-\pi, \pi]$ et $t \in [0, \eta_0]$,

$$\left| \mathbb{E} \left[e^{i(sX^{(n)} + tY'^{(n)})} \right] \right| \leq 1 - c_5 (\sigma_{X^{(n)}}^2 s^2 + \sigma_{Y'^{(n)}}^2 t^2);$$

4. $k_n = N_n \mathbb{E}[X^{(n)}] + O(\sigma_{X^{(n)}} N_n^{1/2})$ (rappelons que $k_n \in \mathbb{Z}$ et $\mathbb{P}(S_n = k_n) > 0$);
5. $\tilde{c}_3 \leq \sigma_{Y^{(n)}} := \text{Var}(Y^{(n)})^{1/2} \leq c_3$;
6. $\rho_{Y^{(n)}} := \mathbb{E} \left[|Y^{(n)} - \mathbb{E}[Y^{(n)}]|^3 \right] \leq c_4^3 \sigma_{Y^{(n)}}^3$;
7. le coefficient de corrélation $r_n := \text{Cov}(X^{(n)}, Y^{(n)}) \sigma_{X^{(n)}}^{-1} \sigma_{Y^{(n)}}^{-1}$ vérifie $|r_n| \leq c_6 < 1$, si bien que

$$\tau_n^2 := \sigma_{Y^{(n)}}^2 (1 - r_n^2) \geq \tilde{c}_2^2 (1 - c_6^2) > 0.$$

Alors les points suivants sont vérifiés.

1. Il existe $\tilde{c}_5 > 0$ tel que

$$\mathbb{P}(S_n = k_n) \geq \frac{\tilde{c}_5}{2\pi \sigma_{X^{(n)}} N_n^{1/2}}.$$

2. Pour $N_n \geq N_0 := \max(3, c_2^6, c_4^6)$, la loi conditionnelle de

$$N_n^{-1/2} \tau_n^{-1} (T_n - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \frac{\sigma_{Y^{(n)}}}{\sigma_{X^{(n)}}} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}]))$$

sachant $S_n = k_n$ vérifie

$$\sup_x \left| \mathbb{P} \left(\frac{U_n - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \sigma_{Y^{(n)}} \sigma_{X^{(n)}}^{-1} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}])}{N_n^{1/2} \tau_n} \leq x \right) - \Phi(x) \right| \leq \frac{C}{N_n^{1/2}}, \quad (2.21)$$

où Φ est la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite et C est une constante strictement positive dépendant de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$, et c_6 .

3. De plus, il existe des constantes strictement positives c_7 et c_8 dépendant uniquement de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$, et c_6 telle que

$$|\mathbb{E}[U_n] - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \frac{\sigma_{Y^{(n)}}}{\sigma_{X^{(n)}}} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}])| \leq c_7 \quad (2.22)$$

et

$$|\text{Var}(U_n) - N_n \tau_n^2| \leq c_8 N_n^{1/2} \quad (2.23)$$

Si $N_n \geq \tilde{N}_0 := \max(N_0, 4c_8^2/\tilde{c}_3^2)$, on a aussi

$$\sup_x \left| \mathbb{P} \left(\frac{U_n - \mathbb{E}[U_n]}{\text{Var}(U_n)^{1/2}} \leq x \right) - \Phi(x) \right| \leq \frac{\tilde{C}}{N_n^{1/2}}, \quad (2.24)$$

où \tilde{C} est une constante dépendant de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$, et c_6 .

Remarque 2.1.5.

1. L'hypothèse $N_n \rightarrow +\infty$ n'est là que pour assurer l'existence de la constante \tilde{c}_5 qui repose sur le théorème de convergence dominée de Lebesgue.
2. Les hypothèses du Théorème 2.1.9 impliquent celles du théorème central limite dans [138, Theorem 2.1] (pas vraiment surprenant !!). Remarquons, que dans l'hypothèse 4, le conditionnement est à peu près égal à la valeur moyenne, exactement comme pour le théorème central limite dans [138, Theorem 2.3].
3. L'hypothèse 7 n'est pas très restrictive, elle est aisément vérifiée par tous les exemples considérés.

Comme cela a déjà été remarqué dans [138], le résultat devient bien plus simple lorsque les lois se stabilisent

Corollaire 2.1.1. *Supposons que $(X^{(n)}, Y^{(n)}) \xrightarrow{(d)} (X, Y)$ lorsque $n \rightarrow \infty$ et que pour tout $r > 0$ fixé,*

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left[|X^{(n)}|^r \right] < \infty \quad \text{et} \quad \limsup_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left[|Y^{(n)}|^r \right] < \infty.$$

Supposons de plus que X est de spam 1 (le spam d'une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{N} est le plus grand commun diviseur des points de son support) et que Y n'est pas presque sûrement une fonction affine $c + dX$ de X , que k_n et N_n sont des entiers tels que $\mathbb{E}[X^{(n)}] = k_n/N_n$ et $N_n \rightarrow +\infty$. Alors, toutes les hypothèses du Théorème 3.2.3 sont vérifiées.

Ce corollaire s'applique aux exemples présentés au début de ce paragraphe (allocation aléatoire, processus de branchement, forêts aléatoires et hachage, statistique de Bose-Einstein).

Principe de grandes déviations sous hypothèse d'existence de transformées de Laplace

Le théorème de Gärtner-Ellis [83] permet d'obtenir des principes de grandes déviations lorsque la transformée de Laplace existe. Ainsi, une première idée est de remplacer la transformée de Fourier double intervenant dans les preuves de Janson par une transformée mixte Laplace-Fourier. La partie Fourier permet d'exprimer le conditionnement sous forme intégrale et la partie Laplace permet d'appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. Nous avons alors obtenu avec F. Gamboa et C. Prieur le Théorème 2.1.10 et le Théorème 2.1.11 (voir [111]).

On appelle domaine de la transformée de Laplace d'une variable aléatoire Z l'ensemble $\text{dom } \psi_Z := \{\tau \in \mathbb{R} : [\exp(\tau Z)] < +\infty\}$. Si $\tau \in \text{dom } \psi_Z$ on peut alors définir $\psi_Z(\tau) := \ln [\exp(\tau Z)]$ comme le logarithme de la transformée de Laplace de Z . On notera R_Z l'ensemble des valeurs prises par ψ'_Z . Finalement, ψ_Z^* sera la transformée de Fenchel-Legendre de ψ_Z [83, Définition 2.2.2 p. 26].

On suppose que $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ converge en loi vers (X, Y) , où la limite X est une variable aléatoire à valeurs entières non essentiellement constante. On pourra remarquer que cette dernière hypothèse implique que ψ_X est strictement convexe et par suite si n est suffisamment grand $X^{(n)}$ n'est pas essentiellement constante et $\psi_{X^{(n)}}$ est aussi strictement convexe.

Théorème 2.1.10 (Gamboa, Klein, Prieur [111]). *Soit $k_n \in \mathbb{Z}, N_n \in \mathbb{N}^*, \lambda \in \mathbb{R}$ tels que $k_n/N_n \in R_{X^{(n)}} \rightarrow \lambda \in R_X$. Supposons que*

1. les fonctions $\psi_{X,Y}$ et ψ_{X_n, Y_n} sont essentiellement lisses et soit τ l'unique nombre réel tel que $\psi'_X(\tau) = \lambda$;
2. $\text{dom } \psi_Y = \text{dom } \psi_{Y^{(n)}} = \mathbb{R}$, et $\forall u \in \mathbb{R} \left| \mathbb{E} \left[e^{uY^{(n)}} - e^{uY} \right] \right| \rightarrow 0$;
3. il existe $r > 0$, tel que $I_\tau := [\tau - r, \tau + r] \subset (\text{dom } \psi_X) \cap (\bigcap_{n \geq 1} \text{dom } \psi_{X^{(n)}})$ et

$$\forall u \in \mathbb{R}, \forall s \in I_\tau, \sup_{t \in \mathbb{R}} \left| \mathbb{E} \left[e^{(it+s)X^{(n)} + uY^{(n)}} - e^{(it+s)X + uY} \right] \right| \rightarrow 0. \quad (2.25)$$

Alors la distribution de (T_n/N_n) conditionnée par l'événement $\{S_n = k_n\}$ vérifie un principe de grandes déviations de bonne fonction de taux $\psi_{X,Y}^*(\lambda, \cdot) - \psi_X^*(\lambda)$ à la vitesse $(N_n)^{-1}$.

Déviations modérées La fonction de taux intervenant dans le principe de moyennes déviations du Théorème 2.1.11 fait intervenir un terme de variance résiduel α_ξ^2 . Afin de définir rigoureusement ce terme de variance, nous avons besoin de considérer, comme souvent lorsque l'on s'intéresse à des principes de grandes déviations, un (subtil) changement de loi. Pour cela prenons ξ dans l'intérieur de $\text{dom } \psi_X$ et considérons le vecteur aléatoire $(\tilde{X}_\xi, \tilde{Y}_\xi)$ dont la loi est donnée pour $k \in \mathbb{N}$ et tout borélien A de \mathbb{R} par

$$\mathbb{P}(\tilde{X}_\xi = k, \tilde{Y}_\xi \in A) = \exp[-\psi_X(\xi) + k\xi] \mathbb{P}(X = k, Y \in A). \quad (2.26)$$

Soit α_ξ^2 la variance du résidu $\tilde{\epsilon}_\xi$ pour la régression linéaire de \tilde{Y}_ξ sur \tilde{X}_ξ

$$\tilde{\epsilon}_\xi := (\tilde{Y}_\xi - \mathbb{E}(\tilde{Y}_\xi)) - \frac{\text{cov}(\tilde{X}_\xi, \tilde{Y}_\xi)}{\text{var}(\tilde{X}_\xi)} (\tilde{X}_\xi - \mathbb{E}(\tilde{X}_\xi)). \quad (2.27)$$

On pourra noter que cette variance est la variance limite dans le théorème central limite démontré par Janson (Theorem 2.1 dans [138]). Sa forme explicite est alors

$$\alpha_\xi^2 = \text{var}(\tilde{Y}_\xi) - \text{Cov}(\tilde{X}_\xi, \tilde{Y}_\xi)^2 / \text{var}(\tilde{X}_\xi).$$

On peut alors obtenir le théorème suivant de déviations modérées.

Théorème 2.1.11 (Gamboa, Klein, Prieur [111]). *Soient $\lambda \in \mathbb{R}$ et $k_n \in \mathbb{Z}, N_n \in \mathbb{N}^*, \lambda \in \mathbb{R}$ tels que λ (resp. k_n/N_n) appartienne à R_X (resp. $R_{X^{(n)}}$) et $k_n/N_n \rightarrow \lambda$. Supposons que*

1. les fonctions $\psi_{X,Y}$ et ψ_{X_n, Y_n} sont essentiellement lisses;

2. il existe $r_0 > 0$ tel que

$$B_0 :=] - r_0, r_0[\subset (\text{dom} \psi_Y) \cap (\cap_{n \geq 1} \text{dom} \psi_{Y^{(n)}})$$

et soit τ (resp. τ_n) l'unique réel tel que $\psi'_X(\tau) = \lambda$ (resp. $\psi'_{X^{(n)}}(\tau_n) = k_n/N_n$);

3. il existe $r > 0$ tel que $I_\tau := [\tau - r, \tau + r] \subset (\text{dom} \psi_X) \cap (\cap_{n \geq 1} \text{dom} \psi_{X^{(n)}})$ et

$$\forall s \in I_\tau, \sup_{t \in \mathbb{R}} \left| \mathbb{E} \left[e^{(it+s)X^{(n)}} - e^{(it+s)X} \right] \right| \rightarrow 0, \quad (2.28)$$

$$\sup_n \sup_{(s,v) \in I_\tau \times B_0} \mathbb{E} \left(e^{sX^{(n)} + v(Y^{(n)} - \mathbb{E}(\check{Y}_{\tau_n}^{(n)}))} \right) < \infty, \quad (2.29)$$

4. (a_n) vérifie $a_n N_n \rightarrow +\infty$.

Alors la distribution de $\left(\sqrt{\frac{a_n}{N_n}} \left(T_n - N_n \mathbb{E}(\check{Y}_{\tau_n}^{(n)}) \right) \right)$ conditionnée par l'événement $\{S_n = k_n\}$ satisfait un principe de déviations modérées de bonne fonction de taux $J(\cdot) = \frac{(\cdot)^2}{2\alpha_\tau^2}$ à la vitesse a_n .

Principe de grandes déviations lorsque la transformée de Laplace n'est pas définie

Les théorèmes précédents reposent sur l'hypothèse forte d'existence de la transformée de Laplace sur \mathbb{R} (ou au minimum sur un voisinage de 0) pour la variable aléatoire Y (voir par exemple l'hypothèse $\text{dom} \psi_Y = \text{dom} \psi_{Y^{(n)}} = \mathbb{R}$ du Théorème 2.1.10). Ce genre d'hypothèse apparaît par exemple dans le théorème de Gärtner-Ellis, mais cela ne permet pas de traiter le cas des variables aléatoires ayant des queues de distributions dites lourdes. La motivation de ces travaux provenant de l'étude de certaines structures combinatoires, les Théorèmes 2.1.10 et 2.1.11 seraient satisfaisants s'ils permettaient de traiter tous les exemples présentés. Malheureusement, l'exemple le plus intéressant, le hachage avec essais linéaires, ne vérifie pas les hypothèses des théorèmes. En effet, dans cet exemple la transformée de Laplace de la variable Y est seulement définie sur $] - \infty, 0]$ et donc pas dans un voisinage de 0.

Les résultats qui suivent permettent de traiter le cas du hachage, ils ont fait l'objet d'une collaboration avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [149].

De façon intuitive, on peut distinguer plusieurs régimes pour les principes de grandes déviations.

1. Lorsque la transformée de Laplace est définie (régime décrit par le théorème de Gärtner-Ellis). Dans ce cas toutes les variables jouent plus ou moins le même rôle et c'est la somme (ou la moyenne) des variables qui gouverne les grandes déviations. C'est-à-dire que pour avoir un événement rare (par exemple que S_n soit très grand), il faut que toutes les variables soient très grandes.
2. Lorsque les variables sont à queues très lourdes, les grandes déviations sont gouvernées par la plus grande des variables. C'est-à-dire que pour avoir un événement rare (par exemple que S_n soit très grand), il faut que $\max(X_i, i = 1, \dots, n)$ soit très grand (voir par exemple [181]).
3. Lorsque les variables sont à queues lourdes mais pas trop (par exemple existence de tous les moments mais pas de la transformée de Laplace), nous sommes dans un régime intermédiaire entre les deux premiers. Le hachage rentre dans ce cadre.

Avec Agnès et Pierre, toujours dans le cadre de sommes conditionnées, nous avons donc étudié le cas 3. Tout repose sur d'anciens travaux de Nagaev [184, 185] dans lesquels l'auteur décrit le comportement asymptotique précis de $\mathbb{P}(X_1 + \dots + X_n \geq x)$ en fonction du comportement asymptotique de $\mathbb{P}(X_1 \geq x)$ lorsque les variables $(X_i)_{1 \leq i \leq n}$ sont i.i.d. à valeurs réelles. Nous nous sommes donc fortement inspirés de ces travaux et avons obtenu des résultats de grandes déviations pour le modèle du hachage avec essais linéaires. Le hachage avec essais linéaires est un modèle classique en informatique théorique, il apparaît dans [153], il a été étudié par de nombreux auteurs, par exemple [98, 138, 137, 140, 68, 175]. Ce modèle décrit la situation suivante. On lance n boules dans m urnes de façon aléatoire. Les urnes sont disposées en cercle et numérotées de 1 à m . Une boule atterrissant dans une urne déjà occupée est déplacée jusqu'à la première urne vide rencontrée, les déplacements s'effectuant toujours suivant la même direction fixée. On s'intéresse alors à la somme de tous les déplacements qui est une variable aléatoire notée $d_{m,n}$. On suppose $n < m$ et on définit

$N = m - n$. Après avoir lancé les boules, il y a N urnes vides. Cela divise l'ensemble des urnes occupées en blocs. On considère que la première urne vide suivant un bloc fait partie de ce bloc et clos ce bloc. Janson [138] a montré que la longueur des blocs et la somme des déplacements à l'intérieur de chaque bloc sont distribuées comme $(X_1, Y_1), \dots, (X_N, Y_N)$ conditionnés par $\sum_{i=1}^N X_i = m$, où (X_i, Y_i) sont des copies i.i.d. de (X, Y) , X étant distribuée suivant la loi de Borel de paramètre μ arbitraire dans $]0, 1[$, défini par

$$\mathbb{P}(X = n) = e^{-\mu n} \frac{(\mu n)^{n-1}}{n!},$$

et Y sachant $X = l$ est distribuée comme $d_{l, l-1}$. Ainsi, $d_{m, n}$ est distribué comme $\sum_{i=1}^N Y_i$ conditionnée par $\sum_{i=1}^N X_i = m$. Prenons maintenant $m = m_n \rightarrow \infty$ et $N = N_n \rightarrow \infty$ de telle sorte que $\mu_n := n/m_n \in]0, 1[\rightarrow \mu \in]0, 1[$ et $n < m_n$.

Théorème 2.1.12 (Klein, Lagnoux, Petit [149]. Grandes déviations pour le hachage avec essais linéaires). *Si $n/m_n \rightarrow \mu \in]0, 1[$, alors il existe $\alpha(\mu) > 0$ et $\beta(\mu) > 0$ tel que pour tout $y > 0$,*

$$\begin{aligned} -\beta(\mu)\sqrt{y} &\leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \log \mathbb{P}(d_{m_n, n} - \mathbb{E}[d_{m_n, n}] \geq ny) \\ &\leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \log \mathbb{P}(d_{m_n, n} - \mathbb{E}[d_{m_n, n}] \geq ny) \leq -\alpha(\mu)\sqrt{y}. \end{aligned}$$

2.2 Moyennes de Fréchet - barycentres sur l'espace de Wasserstein

Ce chapitre regroupe les travaux effectués d'une part autour de l'existence et de la caractérisation des moyennes de Fréchet dans l'espace de Wasserstein [37] et d'autre part sur la construction d'une analyse en composantes principales dans l'espace de Wasserstein en dimension un [36]. Nous démontrons l'existence et l'unicité et caractérisons une moyenne de Fréchet pour un modèle très particulier de variables aléatoires à valeurs dans l'espace de Wasserstein. La restriction majeure de notre travail et que nous travaillons dans un cadre de compacité. Ce travail utilise les résultats de l'article de Agueh et Carlier [2]. Nous définissons et étudions ensuite une notion d'analyse en composantes principales géométriques dans l'espace de Wasserstein sur \mathbb{R} .

2.2.1 Caractérisation des moyennes de Fréchet dans l'espace de Wasserstein

On s'intéresse au problème de caractérisation du barycentre de mesures de probabilités aléatoires sur \mathbb{R}^d . L'ensemble des mesures de Radon de probabilités muni de la distance 2-Wasserstein n'est pas un espace localement convexe. Par suite, il est naturel d'utiliser la notion de moyenne de Fréchet [103] pour définir une notion de barycentre pour des mesures de probabilités aléatoires. Cette notion de moyenne est une extension de la notion usuelle de Barycentre à des espaces non linéaires munis d'une métrique non-euclidienne. Dans ce travail, nous considérons le cas où $\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu}$ est une mesure de probabilité aléatoire de l'espace 2-Wasserstein sur un ensemble compact Ω de \mathbb{R}^d . On suppose que nos mesures aléatoires appartiennent à un modèle paramétrique de mesures de probabilités que nous décrivons maintenant.

Soit $\mathcal{M}_+(\Omega)$ l'ensemble des mesures de probabilités de Radon sur Ω muni de la distance de Wasserstein d'ordre 2 notée d_{W_2} . Soit $\Phi : (\mathbb{R}^p, \mathcal{B}(\mathbb{R}^p)) \rightarrow (\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ une application mesurable (ici $\mathcal{B}(\mathbb{R}^p)$ est la tribu de Borel de \mathbb{R}^p et $\mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega))$ celle de $\mathcal{M}_+(\Omega)$ pour la topologie induite par d_{W_2}). Soit maintenant Θ un ensemble mesurable de \mathbb{R}^p ($p \geq 1$), et on considère l'ensemble paramétrique de mesures de probabilités $\{\mu_\theta = \Phi(\theta), \theta \in \Theta\}$. Nous supposons de plus que pour tout $\theta \in \Theta$, la mesure $\mu_\theta = \Phi(\theta) \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Il s'ensuit que si $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$ est un vecteur aléatoire de loi \mathbb{P}_Θ admettant une densité $g : \Theta \rightarrow \mathbb{R}_+$, alors $\mu_{\boldsymbol{\theta}} = \Phi(\boldsymbol{\theta})$ est une mesure de probabilité aléatoire de loi \mathbb{P}_g sur $(\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ qui est la mesure image définie par

$$\mathbb{P}_g(B) = \mathbb{P}_\Theta(\Phi^{-1}(B)), \text{ pour tout } B \in \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)). \quad (2.30)$$

Nous proposons d'étudier certaines propriétés du barycentre μ^* de μ_θ défini comme la moyenne de Fréchet suivante

$$\mu^* = \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} J(\nu), \quad (2.31)$$

où

$$(\mathcal{P}) \quad J(\nu) = \int_{\mathcal{M}_+(\Omega)} \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu) d\mathbb{P}_g(\mu) = \mathbb{E} \left(\frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta) \right) = \int_{\Theta} \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta) g(\theta) d\theta, \quad \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega).$$

Si elle existe et est unique, la mesure μ^* sera nommée le barycentre (ou barycentre théorique) de la mesure aléatoire μ_θ de loi \mathbb{P}_g .

La version empirique du barycentre μ^* est le barycentre $\bar{\mu}_n$ défini par

$$\bar{\mu}_n = \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\theta_i}), \quad (2.32)$$

où $\theta_1, \dots, \theta_n$ sont i.i.d. dans Θ de densité g .

Hypothèse 2.2.1. L'ensemble $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est compact.

Hypothèse 2.2.2. L'application $\Phi : (\Theta \subset \mathbb{R}^p, \mathcal{B}(\mathbb{R}^p)) \rightarrow (\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ est mesurable. De plus, pour tout $\theta \in \Theta$, la mesure $\mu_\theta = \Phi(\theta) \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d .

Proposition 2.2.1. *Si les hypothèses 2.2.1 et 2.2.2 sont satisfaites alors le problème d'optimisation (2.31) admet un unique minimiseur.*

La preuve de ce résultat découle d'arguments standard. En particulier l'unicité est une conséquence directe de la stricte convexité de l'application $J : \mathcal{M}_+(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$, sous l'hypothèse 2.2.2 i.e.

$$J(\lambda\mu + (1-\lambda)\nu) < \lambda J(\mu) + (1-\lambda)J(\nu), \quad \text{pour tout } \lambda \in]0, 1[\text{ et } \mu, \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega) \text{ avec } \mu \neq \nu. \quad (2.33)$$

Cette propriété est une conséquence du Theorem 2.9 dans [7] (ou Lemma 3.2.1 de [190]).

Lorsque l'espace ambiant est \mathbb{R} , il existe une formule explicite pour calculer la distance de Wasserstein (voir le Théorème 2.18 de [248]), elle est donnée pour tout μ et ν éléments de $\mathcal{M}_+(\Omega)$ par

$$d_{W_2}^2(\nu, \mu) = \int_0^1 |F_\nu^-(x) - F_\mu^-(x)|^2 dx, \quad (2.34)$$

où F_ν^- (resp. F_μ^-) est la fonction quantile de ν (resp. μ). Cette formule explicite pour la distance de Wasserstein permet de caractériser très simplement le barycentre des mesures aléatoires. En particulier, en dimension un, calculer le barycentre dans l'espace de Wasserstein revient à calculer les espérances (au sens usuel) des plans de transports optimaux d'une mesure de référence (non-aléatoire) μ_0 sur μ_θ . Dans la suite si h est une application mesurable et X une variable aléatoire de loi \mathbb{P}_X alors la loi image de X par f sera notée par $f\#\mathbb{P}_X$.

Théorème 2.2.1 (Bigot, Klein [37]). *Soit μ_0 une mesure fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. Supposons que les hypothèses 2.2.1 et 2.2.2 sont satisfaites. Soit $\mu_\theta = \Phi(\theta)$ une mesure aléatoire où θ est un vecteur aléatoire de Θ de densité g . Soit T_θ la carte de transport optimal de μ_0 vers μ_θ définie par $T_\theta(x) = F_{\mu_\theta}^-(F_{\mu_0}(x))$, $x \in \Omega$, où $F_{\mu_\theta}^-$ est la fonction quantile de μ_θ , et F_{μ_0} la fonction de répartition de μ_0 .*

Alors, le barycentre de μ_θ existe et est unique et vérifie

$$\mu^* = \bar{T}\#\mu_0, \quad (2.35)$$

où $\bar{T} : \Omega \rightarrow \Omega$ est le plan de transport optimal de μ_0 sur μ^* définie par

$$\bar{T}(x) = \mathbb{E}(T_{\theta}(x)) = \int_{\Theta} T_{\theta}(x)g(\theta)d\theta, \text{ pour tout } x \in \Omega.$$

De plus, la fonction quantile de μ^* est donnée pour tout $y \in [0, 1]$ par

$$F_{\mu^*}^{-1}(y) = \mathbb{E}\left(F_{\mu_{\theta}}^{-1}(y)\right) = \int_{\Theta} F_{\mu_{\theta}}^{-1}(y)g(\theta)d\theta.$$

Ainsi, le barycentre μ^* ne dépend pas du choix μ_0 , et on a

$$\inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(|\bar{T}_{\theta}(x) - x|^2) d\mu^*(x) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_{\Theta} |\bar{T}_{\theta}(x) - x|^2 g(\theta) d\theta d\mu^*(x), \quad (2.36)$$

où $\bar{T}_{\theta} = T_{\theta} \circ \bar{T}^{-1}$.

Deux difficultés majeures compliquent très fortement une généralisation du Théorème 2.2.1 à la dimension $d \geq 2$.

1. La formule (2.34) donnant une expression explicite de la distance de Wasserstein n'existe qu'en dimension $d = 1$.
2. Le fait que la composition de deux plans de transports optimaux soit encore optimal n'est vrai en toute généralité qu'en dimension $d = 1$.

Cependant, l'analogie du Théorème 2.2.1 peut être obtenu en dimension $d \geq 2$ (on va quand même être obligé de faire quelques hypothèses). Afin, d'obtenir cet analogue, on va utiliser un argument de dualité et regarder un problème dual inspiré des travaux de [2].

Pour cela, considérons

– $X = C(\Omega, \mathbb{R})$, l'espace des fonctions continues $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ munie de la norme sup

$$\|f\|_X = \sup_{x \in \Omega} \{|f(x)|\}.$$

– $X' = \mathcal{M}(\Omega)$ le dual topologique de X .

– $f^{\Theta} = (f_{\theta})_{\theta \in \Theta} \in L^1(\Theta, X)$ désigne une application

$$\begin{cases} f^{\Theta} : \Theta & \rightarrow X \\ \theta & \mapsto f_{\theta} \end{cases}$$

telle que pour tout $x \in \Omega$

$$\int_{\Theta} |f_{\theta}(x)| d\theta < +\infty.$$

Alors, en nous inspirant de [2], on introduit le problème d'optimisation dual

$$(\mathcal{P}^*) \quad J_{\mathcal{P}^*} := \sup \left\{ \int_{\Theta} \int_{\Omega} S_{g(\theta)} f_{\theta}(x) d\mu_{\theta}(x) d\theta; f^{\Theta} \in L^1(\Theta, X) \text{ telle que } \int_{\Theta} f_{\theta}(x) d\theta = 0, \forall x \in \Omega \right\}, \quad (2.37)$$

où

$$S_{g(\theta)} f(x) := \inf_{y \in \Omega} \left\{ \frac{g(\theta)}{2} |x - y|^2 - f(y) \right\}, \forall x \in \Omega \text{ et } f \in X.$$

Les deux problèmes (\mathcal{P}) et (\mathcal{P}^*) sont des problèmes duaux dans le sens où la valeur minimale de $J_{\mathcal{P}}$ pour le problème (\mathcal{P}) est égale à la valeur maximale de $J_{\mathcal{P}^*}$ pour le problème (\mathcal{P}^*) .

Proposition 2.2.2 (Bigot, Klein [37]). *Supposons que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont satisfaites. Alors, $J_{\mathcal{P}} = J_{\mathcal{P}^*}$.*

On est alors en mesure d'étendre les résultats du Théorème 2.2.1 à la dimension $d \geq 2$. Soit $\mu_\theta \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ la mesure aléatoire de densité \mathbb{P}_g définie par l'Equation (2.30). Soit μ_0 une mesure de référence fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . On sait alors qu'il existe pour tout $\theta \in \Theta$, un unique plan de transport optimal $T_\theta : \Omega \rightarrow \Omega$ telle que $\mu_\theta = T_\theta \# \mu_0$, où $T_\theta = \nabla \phi_\theta$ μ_0 -p.p. et $\phi_\theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction convexe semi-continue inférieurement. Dans le théorème qui suit, nous énonçons des conditions suffisantes sur l'espérance de T_θ sous lesquelles le barycentre de μ_θ est donné par $\mu^* = \mathbb{E}(T_\theta) \# \mu_0$. Ainsi calculer le barycentre dans l'espace de Wasserstein revient à calculer l'espérance classique des plans optimaux T_θ transportant μ_0 sur μ_θ . La preuve (que le lecteur pourra trouver dans [37]) repose fortement sur la formulation duale (2.37) du problème d'optimisation (2.31).

Pour tout $\theta \in \Theta$ notons

$$\bar{T}_\theta = T_\theta \circ \bar{T}^{-1}, \quad (2.38)$$

où $\bar{T} : \Omega \rightarrow \Omega$ est l'application définie par $\bar{T}(x) = \mathbb{E}(T_\theta(x)) = \int_\Theta T_\theta(x) g(\theta) d\theta$, $x \in \Omega$. Notons que l'équation (2.38) n'est valide que si \bar{T}^{-1} est bien définie.

Théorème 2.2.2 (Bigot, Klein [37]). *Soient $\theta \in \mathbb{R}^p$ un vecteur aléatoire de densité $g : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ tel que $g(\theta) > 0$ pour tout $\theta \in \Theta$ et $\mu_\theta = \Phi(\theta)$ une mesure aléatoire (paramétrique) de loi \mathbb{P}_g . Soit μ_0 une mesure fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . On suppose les hypothèses 2.2.1 et 2.2.2 satisfaites.*

1. Supposons que pour tout $\theta \in \Theta$,

$$T_\theta \text{ et } \bar{T} \text{ sont des } C^1 \text{ diféomorphismes,} \quad (2.39)$$

2. et de plus, que pour tout $\theta \in \Theta$

$$\bar{T}_\theta = \nabla \bar{\phi}_\theta \text{ où } \bar{\phi}_\theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ est une fonction convexe s.c.i.,} \quad (2.40)$$

telle que pour tout $x \in \Omega$, la fonction $\theta \mapsto \bar{\phi}_\theta(x)$ est intégrable par rapport à la mesure \mathbb{P}_Θ et vérifie l'hypothèse de normalisation

$$\int_\Theta \bar{\phi}_\theta(x) g(\theta) d\theta = \frac{1}{2} |x|^2 \text{ pour tout } x \in \Omega. \quad (2.41)$$

Alors, le barycentre théorique est la mesure $\mu^* \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ donnée par

$$\mu^* = \bar{T} \# \mu_0, \quad (2.42)$$

et le problème d'optimisation (2.31) vérifie

$$\inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu) = \frac{1}{2} \int_\Theta d_{W_2}^2(\mu^*, \mu_\theta) g(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_\Omega \mathbb{E}(|\bar{T}_\theta(x) - x|^2) d\mu^*(x). \quad (2.43)$$

Le Théorème 4.1.2 montre que sous certaines conditions, calculer dans l'espace de Wasserstein le barycentre d'une mesure aléatoire μ_θ revient à transporter la mesure de référence μ_0 par le transport moyen \bar{T} . Une fois caractérisé un barycentre, il est naturel de se poser la question de son estimation et en particulier de la convergence d'un barycentre empirique vers le barycentre théorique. Soient $\theta_1, \dots, \theta_n$ des variables aléatoires i.i.d. à valeurs dans \mathbb{R}^p de loi \mathbb{P}_Θ . Considérons la fonctionnelle

$$J_n(\nu) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\theta_j}), \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega), \quad (2.44)$$

et regardons le problème d'optimisation consistant à trouver un barycentre empirique

$$\bar{\mu}_n \in \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} J_n(\nu), \quad (2.45)$$

Les résultats de [2] permettent d'obtenir l'existence et l'unicité de $\bar{\mu}_n$. De plus, on a montré le résultat suivant.

Théorème 2.2.3 (Bigot, Klein [37]). *Supposons que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont vérifiées. Soient μ^* le barycentre théorique défini par l'Equation (4.2) et μ_n le barycentre empirique défini par l'Equation (4.28). Alors,*

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} d_{W_2}(\bar{\mu}_n, \mu^*) = 0 \text{ p.s.}$$

2.2.2 Analyse en composantes principales suivant une géodésique dans l'espace de Wasserstein

L'objectif maintenant est de définir une notion d'analyse en composantes principales (PCA) d'une famille ν_1, \dots, ν_n de mesures de probabilité sur \mathbb{R} . Lorsque les mesures admettent des densités de carré intégrable f_1, \dots, f_n , l'approche standard consiste à utiliser l'analyse en composantes principales fonctionnelles (FPCA) (voir par exemple [81, 207, 229]) sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ muni de son produit scalaire usuel. Cette méthode a déjà été appliquée dans [82, 152] pour analyser les modes principaux de variabilité d'un ensemble de densités. Notre approche est différente, le point de départ est de voir à l'aide d'une isométrie l'espace de Wasserstein comme un sous-espace convexe fermé d'un espace de Hilbert, puis de définir une notion de PCA spécifique aux sous-espaces convexes fermés d'espace de Hilbert et d'appliquer ensuite cette notion de PCA à l'espace de Wasserstein.

La structure pseudo-Riemannienne de $W_2(\Omega)$

Soient $\Omega = \mathbb{R}$ (ou un intervalle fermé de \mathbb{R}) et $W_2(\Omega)$ l'ensemble des mesures de probabilités sur $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega))$ qui admettent un moment d'ordre 2 ($\mathcal{B}(\Omega)$ est la tribu de Borel de Ω).

Pour une mesure $\nu \in W_2(\Omega)$ et une application $T : \Omega \rightarrow \Omega$ (qui sera toujours supposée mesurable), la mesure image (ou mesure poussée, c'est moins joli que push-forward) $T\#\nu$ est définie pour $A \in \mathcal{B}(\Omega)$ par $(T\#\nu)(A) = \nu\{x \in \Omega | T(x) \in A\}$. On rappelle que la fonction de répartition et la fonction quantile de ν sont respectivement notées F_ν et F_ν^- . Si ν est absolument continue (a.c.) par rapport à la mesure de Lebesgue sa densité sera notée f_ν . L'espace $W_2(\Omega)$ muni de d_{W_2} est un espace métrique, appelé l'espace de Wasserstein. Pour une analyse fine de $W_2(\Omega)$ nous renvoyons à [248]. En particulier, une fois encore la formule (2.34) jouera un rôle fondamentale dans la suite.

L'espace $W_2(\Omega)$ possède une structure Riemannienne formelle décrite par exemple dans [8]. Nous rappelons ici les définitions de base qui ont leur analogue dans le monde des sous-variétés Riemanniennes. A partir de maintenant nous fixons une mesure de référence $\mu \in W_2(\Omega)$ de fonction de répartition F_μ supposée continue. En suivant [8], nous définissons l'espace tangent à μ comme l'espace de Hilbert $L_\mu^2(\Omega)$ des fonctions à valeurs réelles de carré μ -intégrable sur Ω , muni du produit scalaire usuel $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mu$ et de la norme $\|\cdot\|_\mu$. Nous définissons ensuite les cartes exponentielles et logarithmiques au point μ comme suit.

Définition 2.2.1. Soit id l'application identité sur Ω . Les cartes exponentielle $\exp_\mu : L_\mu^2(\Omega) \rightarrow W_2(\Omega)$ et logarithmique $\log_\mu : W_2(\Omega) \rightarrow L_\mu^2(\Omega)$ sont définies respectivement par

$$\exp_\mu(v) = (v + \text{id})\#\mu \quad \text{et} \quad \log_\mu(\nu) = F_\nu^- \circ F_\mu - \text{id}. \quad (2.46)$$

Dans le monde des sous-variétés Riemanniennes, la carte exponentielle en un point est un homéomorphisme local d'un voisinage de l'origine dans l'espace tangent à la sous-variété. Malheureusement, ce n'est pas le cas pour \exp_μ . En effet, il est possible de trouver des fonctions aussi proches que l'on veut de l'origine de $L_\mu^2(\Omega)$ ayant la même exponentielle voir par exemple [8]. Par contre, \exp_μ est une isométrie lorsque l'on restreint l'espace de départ.

Théorème 2.2.4 (Bigot, Gouet, Klein, Lopez [36]). *La carte exponentielle \exp_μ restreinte à $V_\mu(\Omega) := \log_\mu(W_2(\Omega))$ est un homéomorphisme isométrique d'inverse \log_μ .*

Proposition 2.2.3. *L'ensemble $V_\mu(\Omega) := \log_\mu(W_2(\Omega))$ est un convexe fermé de $L_\mu^2(\Omega)$.*

Remarque 2.2.1. L'espace $V_\mu(\Omega)$ peut être caractérisé comme l'ensemble des fonctions $v \in L_\mu^2(\Omega)$ telles que $T := \text{id} + v$ est μ -p.p. croissante (voir Définition 4.2.17) et telles que $T(x) \in \Omega$, pour tout $x \in \Omega$.

Le point remarquable de cette isométrie est que les géodésiques dans l'espace $W_2(\Omega)$ sont les images par \exp_μ des droites de $V_\mu(\Omega)$. En particulier, étant données deux mesures dans $W_2(\Omega)$, il existe une unique géodésique (chemin le plus court) permettant de passer de l'une à l'autre. Cette propriété est formalisée dans le lemme qui suit.

Lemme 2.2.1. *Soient $\gamma : [0, 1] \rightarrow W_2(\Omega)$ un chemin et $v_0 := \log_\mu(\gamma(0))$, $v_1 := \log_\mu(\gamma(1))$. Alors γ est une géodésique si et seulement si pour tout $t \in [0, 1]$, $\gamma(t) = \exp_\mu((1-t)v_0 + tv_1)$.*

Remarque 2.2.2. Grâce au Lemme 2.2.1, l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$ muni de la distance d_{W_2} est un espace géodésique. On peut même caractériser les sous-espaces de $W_2(\Omega)$ qui restent géodésiques.

Corollaire 2.2.1. *Un sous-ensemble $G \subset W_2(\Omega)$ est géodésique si, et seulement si, $\log_\mu(G)$ est convexe.*

Définition 2.2.2. Soit $G \subseteq W_2(\Omega)$ un sous-ensemble géodésique de $W_2(\Omega)$. La dimension de G notée $\dim(G)$, est, la dimension du plus petit sous-espace affine de $L_\mu^2(\Omega)$ contenant $\log_\mu(G)$.

Remarque 2.2.3. La $\dim(G)$ ne dépend pas de la mesure de référence μ .

Analyse en composantes principales convexes CPCA

Nous venons de voir que $W_2(\Omega)$ est isométrique à un sous-ensemble convexe fermé $V_\mu(\Omega)$ de l'espace de Hilbert $L_\mu^2(\Omega)$. Comme nous le verrons un peu plus tard, la notion de GPCA dans $W_2(\Omega)$ est fortement liée à celle de PCA contrainte à rester dans $V_\mu(\Omega)$. Il est donc naturel de développer une stratégie générale de PCA contrainte à rester dans un convexe fermé d'un espace de Hilbert général. Cette méthode que nous appellerons analyse en composantes principales convexe (CPCA) sera alors applicable bien au delà de la GPCA dans $W_2(\Omega)$. Nous utiliserons les notations suivantes :

- H est un espace de Hilbert séparable, muni de son produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de sa norme $\| \cdot \|$.
- $d(x, y) := \|x - y\|$ et $d(x, E) := \inf_{z \in E} d(x, z)$, pour $x, y \in H, E \subset H$.
- X sera un sous-ensemble convexe fermé de H , muni de sa tribu de Borel $\mathcal{B}(X)$.
- \mathbf{x} sera une variable aléatoire de carré intégrable à valeurs dans X , ainsi $\mathbb{E}\|\mathbf{x}\|^2 < +\infty$, et son espérance sera notée $\mathbb{E}\mathbf{x}$.
- $x_0 \in X$ sera un élément de référence et $k \geq 1$ un entier.

Les composants convexes principaux

Définition 2.2.3. Pour $C \subset X$, soit $K_X(C) = \mathbb{E}d^2(\mathbf{x}, C)$.

Définition 2.2.4. Soient

- (a) $\text{CL}(X)$ l'espace métrique des sous-ensembles fermés et non vides de X muni de la distance de Hausdorff ;
- (b) $\text{CC}_k(X)$ la famille des ensembles convexes $C \in \text{CL}(X)$, dont la dimension $\dim(C) \leq k$ (on rappelle que la dimension est ici la dimension du plus petit sous-espace affine contenant C) ;
- (c) $\text{CC}_{x_0, k}(X)$ la famille d'ensembles $C \in \text{CC}_k(X)$ contenant x_0 ($x_0 \in C$).

On définit alors une nouvelle notion de composants convexes principaux (PCC), l'un emboîté (NPCC) et l'autre global (GPCC) et nous prouvons leur existence. Le cas emboîté est défini par récurrence ; il est motivé par la caractérisation usuelle de PCA.

Définition 2.2.5. (a) Un (k, x_0) -GPCC de \mathbf{x} est un ensemble $C_k \in \mathcal{G}_{x_0, k}(X) := \text{Argmin}_{C \in \text{CC}_{x_0, k}(X)} K_X(C)$.

(b) Soient $\mathcal{N}_{x_0, 1}(X) = \mathcal{G}_{x_0, 1}(X)$ et $C_1 \in \mathcal{G}_{x_0, 1}(X)$. Pour $k \geq 2$, un (k, x_0) -NPCC de \mathbf{x} est un ensemble

$$C_k \in \mathcal{N}_{x_0, k}(X) := \underset{C \in \text{CC}_{x_0, k}(X), C \supset C_{k-1} \in \mathcal{N}_{x_0, k-1}(X)}{\text{Argmin}} K_X(C).$$

Théorème 2.2.5 (Bigot, Gouet, Klein, Lopez [36]). *Si X est compact, alors les ensembles $\mathcal{G}_{x_0, k}(X)$ et $\mathcal{N}_{x_0, k}(X)$ ne sont pas vides.*

L'analyse en composantes principales géodésiques (GPCA)

On se place maintenant dans l'espace $W_2(\Omega)$ muni de la tribu de Borel $\mathcal{B}(W)$ pour la distance de Wasserstein. On notera par ν les variables aléatoires à valeurs dans $W_2(\Omega)$ de carré intégrable, c'est-à-dire telles que $\mathbb{E}d_{W_2}^2(\nu, \lambda) < +\infty$, pour un (et donc pour tout) $\lambda \in W_2(\Omega)$. On suppose que la mesure $\mu \in W_2(\Omega)$ n'a pas d'atome.

Même s'il est possible de définir directement la notion de GPCA (ce qui est fait dans la Section 4.2.4), nous nous contentons dans cette partie synthétique de voir la GPCA comme un sous produit de la CPCA dans $V_\mu(\Omega)$ (notons que les deux définitions conduisent aux mêmes objets). Comme les ensembles géodésiques dans $W_2(\Omega)$ sont les images par la carte exponentielle \exp_μ , des ensembles convexes dans $V_\mu(\Omega)$, la GPCA dans $W_2(\Omega)$ peut être formulée comme une CPCA dans $V_\mu(\Omega)$. On applique donc la CPCA à $H = L_\mu^2(\Omega)$, $X = V_\mu(\Omega)$, $x_0 = \log_\mu(\nu_0)$ et $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$. Dans ce contexte, $K_X(C) = \mathbb{E}d_\mu^2(\mathbf{x}, C)$, $C \subset V_\mu(\Omega)$. Les propositions qui suivent montrent que la recherche d'un GPC dans $W_2(\Omega)$ est équivalent à la recherche d'un GPCC dans $V_\mu(\Omega)$.

Proposition 2.2.4 (Bigot, Gouet, Klein, Lopez [36]). *Soient $\mathcal{G}_{\nu_0, k}(W)$ l'ensemble des GPC de ν et $\mathcal{G}_{x_0, k}(V_\mu(\Omega))$ l'ensemble des GPCC de $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$. Alors $\mathcal{G}_{\nu_0, k}(W) = \exp_\mu(\mathcal{G}_{x_0, k}(V_\mu(\Omega)))$.*

Proposition 2.2.5 (Bigot, Gouet, Klein, Lopez [36]). *Soient $\mathcal{N}_{\nu_0, k}(W)$ l'ensemble des NPG de ν et $\mathcal{N}_{x_0, k}(V_\mu(\Omega))$ l'ensemble des NPCC de $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$. Alors $\mathcal{N}_{\nu_0, k}(W) = \exp_\mu(\mathcal{N}_{x_0, k}(V_\mu(\Omega)))$.*

Ensuite, nous avons obtenu (voir Théorème 4.2.4) sous des hypothèses de compacité que les composants principaux empiriques convergent vers les composants principaux théoriques (la notion de convergence étudiée est présentée dans la Définition 4.2.15).

2.3 Deux exemples de bornes de risques minimax en statistique mathématique

Ce chapitre regroupe l'article en collaboration avec Sébastien Gadat et Clément Marteau [105] et celui avec Jérémie Bigot, Sébastien Gadat et Clément Marteau [34]. Même, si les modèles et les problématiques diffèrent, les techniques de preuves et la technicité dans les preuves sont semblables. Afin de ne pas trop surcharger cette synthèse, je me contenterai ici de présenter les résultats obtenus dans [105]. La totalité des résultats se trouvent dans le Chapitre 5.

2.3.1 Etude de la méthode de classification des plus proches voisins dans des espaces de dimension finie

On s'intéresse ici au problème de classification supervisée binaire. Il s'agit de prédire le label $Y \in \{0, 1\}$ d'une variable d'intérêt observée $X \in \mathbb{R}^d$. Afin de prédire le label Y de X , on suppose que l'on dispose d'un échantillon d'apprentissage $\mathcal{S}_n = \{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)\}$, où les couples (X_i, Y_i) sont i.i.d. de loi commune $\mathbb{P}_{X, Y}$. Cet échantillon d'apprentissage permet de mieux comprendre la loi jointe du couple (X, Y) et de donner alors une prédiction pertinente du label. Comme nous le verrons par la suite la fonction de régression η définie par

$$\eta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x], \forall x \in \mathbb{R}^d$$

jouera un rôle central. En effet, étant donné $x \in \mathbb{R}^d$, la valeur $\eta(x)$ est la probabilité de donner au label Y la valeur 1 sachant que $\{X = x\}$. Evidemment, la fonction η est en pratique inconnue, si bien que les règles de prédiction seront basées sur l'échantillon d'apprentissage \mathcal{S}_n .

Il existe de nombreux algorithmes pour répondre à cette question, nous renvoyons aux travaux [47], [87] pour une introduction complète aux problèmes de classification supervisée. On peut diviser les procédures de classification existantes en au moins trois familles.

- *Les approches basées sur des considérations entropiques (Empirical Risk Minimization (ERM)).* Étant donné un classifieur, l'erreur de mauvaise classification peut être estimée empiriquement à l'aide de l'échantillon d'apprentissage. L'algorithme ERM choisit alors (parmi une famille de candidats) le classifieur qui minimise le risque empirique. Il existe plusieurs études comme [186], [20], [17], [172] qui fournissent une description presque complète de leurs performances statistiques. Dans un contexte similaire, des procédures d'agrégation initiées par [104], ont été analysées en profondeur par [163].
- *Approches basées sur des considérations géométriques ou sur la théorie de l'information.* Par exemple, le classifieur communément appelé Support Vector Machine (SVM) a été intensivement étudié. Il présente un coût de calcul faible et d'excellentes performances statistiques (voir entre autres [245], [234] ou [39]). Les méthodes construites à partir des arbres de classification ou de régression sont basées sur une partition dyadique de l'espace. Elles ont été introduites par [52] et fortement améliorées par [9] et par [51]. Ces méthodes ont été théoriquement développées par [28].
- *Les règles plug-in.* L'idée principale est d'essayer de copier le classifieur de Bayes en injectant un estimateur de la fonction η . On renvoie à [120] pour avoir une vision d'ensemble sur ces méthodes et à [29] et [17] pour les résultats théoriques récents.

L'algorithme des plus proches voisins appartient aux deux dernières classes de méthodes présentées ci-dessus. Il correspond à un estimateur plug-in ayant une interprétation géométrique simple. Cet algorithme a été énormément étudié ces dernières années ; il a été introduit dans les travaux de [97] et [74]. On peut également citer [235, 118, 119, 88, 86] pour leurs contributions significatives sur l'étude de cette méthode. Récemment, cet algorithme a été étudié d'un point de vue de la statistique mathématique. Dans [67], le cas des espaces métriques généraux est étudié et l'importance de l'hypothèse dite de Besicovitch est identifiée. Dans [123], les auteurs s'intéressent à l'influence de l'entier k sur l'excès de risque tandis que dans [224] une amélioration de l'algorithme classique est étudiée.

La plupart des résultats obtenus pour les classifieurs de type ERM, SVM ou plug-in, sont basés sur des considérations de complexité (dimension de Vapnik, entropie métrique). Dans ce travail, on utilisera plutôt le comportement asymptotique des probabilités de petites boules (voir [169] et les références citées dans ce travail). Ces probabilités peuvent être vues comme la quantité duale de l'entropie (voir [168]). Nous allons aussi nous intéresser à la situation plus complexe où les densités ne seront plus minorées (cas par exemple des mesures à support non compact). L'étude de ce cas plus complexe nécessitera l'introduction d'hypothèses de *régularité* et de *masse minimale* (voir la Section 5.1.2 pour plus de détails). En particulier, en tenant compte d'hypothèses de régularité de la fonction η , il est possible d'améliorer la prédiction du label Y . En effet, il est bien connu (voir par exemple [119]), que la vitesse de classification associée est comparable à celle obtenue en estimation et est donc supérieure à \sqrt{n}^{-1} . Cependant, il a été prouvé dans [186] que de meilleures vitesses peuvent être obtenues sous une hypothèse supplémentaire dite de *marge*. Cette hypothèse prend en compte le comportement de la loi de (X, Y) au voisinage de la frontière $\{\eta = 1/2\}$.

Dans ce travail, nous allons donc étudier l'algorithme des plus proches voisins sous hypothèses de marge et lorsque la loi marginale de X n'est pas forcément à support compact ou minorée. Nos contributions peuvent se résumer en trois catégories.

Vitesse de convergence pour des densités minorées Le premier résultat concerne, l'optimalité du classifieur des plus proches voisins Φ_n dans le cas où les densités sont à support compact et minorées sur le support. On montre, dans ce cas, que l'algorithme des plus proches voisins atteint la vitesse de convergence minimax pour l'excès de risque (vitesse obtenue par [17], voir le Théorème 2.3.2 ci-dessous). En particulier sous des hypothèses plus ou moins classiques sur la distribution F du couple (X, Y) , on montre que

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq Cn^{-\frac{1+\alpha}{2+d}},$$

α représente ici le paramètre de marge, d la dimension du problème et $\mathcal{R}(\Phi)$ l'erreur de mauvaise classification étant donné un classifieur Φ (Φ^* est le classifieur de Bayes).¹ Nos résultats sont une généralisation de ceux obtenus dans [123]. Ces derniers ne prennent pas en compte la marge α .

Vitesse de convergence pour des densités générales Dans un second temps, on étudie le comportement du classifieur des plus proches voisins lorsque la densité marginale μ de X n'est plus minorée sur son support. Cette classe de modèles est fondamentale car elle contient entre autres les densités à support non compact. Afin de pouvoir traiter ces modèles, on introduit une hypothèse supplémentaire permettant de contrôler la *queue* des distributions et on montre alors que

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq C n^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

On verra dans la suite que pour obtenir de telles majorations, on doit permettre au nombre de voisins k choisi de dépendre de la position de X . Notons que la condition portant sur la *queue* de la distribution de X permet de décrire le comportement de la densité μ dans un voisinage de $\{\mu = 0\}$.

Bornes inférieures Finalement, nous obtenons des bornes inférieures pour le problème de classification supervisée. Ces bornes généralisent (dans un contexte légèrement différent) celles obtenues par [17]. On montre que l'hypothèse faite sur la queue de distribution est fondamentale pour assurer la consistance uniforme dans le cas non-compact. On montre ensuite, comment sont liées les bornes inférieures et supérieures. Nous utiliserons dans la suite les notations suivantes :

- $\mathbb{P}_{X,Y}$ est la loi du couple (X, Y) ;
- \mathbb{P}_X la loi de X que l'on suppose absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue de densité μ ;
- $\mathbb{P}_{\otimes^n} = \otimes^n \mathbb{P}_{(X_i, Y_i)}$ et $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{(X,Y)} \otimes \mathbb{P}_{\otimes^n}$;
- $\mathbb{E}[\cdot]$, $\mathbb{E}_X[\cdot]$ et $\mathbb{E}_{\otimes^n}[\cdot]$ sont les espérances prises respectivement par rapport aux mesures \mathbb{P} , \mathbb{P}_X et \mathbb{P}_{\otimes^n} .
- Pour toutes suites de réels $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(b_n)_{n \in \mathbb{N}}$, on écrira $a_n \lesssim b_n$ (resp. $a_n \sim b_n$) s'il existe une constante $C \geq 1$ telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a $a_n \leq C b_n$ (resp. $b_n/C \leq a_n \leq C b_n$).

2.3.2 Cadre statistique. Le classifieur des plus proches voisins

Le problème de la classification supervisée

On s'intéresse au problème de classification binaire supervisée (on renvoie à [87] pour une introduction complète à ce problème). On suppose que l'on dispose d'un échantillon i.i.d. $\mathcal{S}_n := (X_i, Y_i)_{i=1 \dots n} \in (\Omega \times \{0, 1\})^n$, dont la distribution est \mathbb{P}_{\otimes^n} et où $\Omega = \text{Supp}(\mu)$ est un ouvert de \mathbb{R}^d . Etant donnée, une nouvelle donnée X , notre objectif est de prédire son label Y . Pour ce faire, nous utilisons un classifieur qui fournit une règle de décision. Formellement un classifieur est une application mesurable Φ de \mathbb{R}^d dans $\{0, 1\}$. Etant donné un classifieur Φ , l'erreur de mauvaise classification associée est donnée par

$$\mathcal{R}(\Phi) = \mathbb{P}(\Phi(X) \neq Y).$$

Evidemment, les classifieurs les plus intéressants sont ceux associés à la plus petite erreur possible. Dans ce contexte, on sait que (voir *e.g.*, [47]) le classifieur dit de Bayes noté Φ^* et défini par

$$\Phi^*(X) = \mathbf{1}_{\{\eta(X) > \frac{1}{2}\}}, \quad \text{où } \eta(x) := \mathbb{E}[Y|X = x] \quad \forall x \in \Omega, \quad (2.47)$$

minimise l'erreur de mauvaise classification, *i.e.*,

$$\mathcal{R}(\Phi^*) \leq \mathcal{R}(\Phi), \quad \forall \Phi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \{0, 1\}.$$

Le classifieur Φ^* fournit la meilleure règle de décision possible dans le sens où il conduit à la plus petite erreur de mauvaise classification. Malheureusement, Φ^* dépend de la fonction de régression η qui est inconnue (elle

1. Ce résultat a été parallèlement établi dans le travail récent [224]

dépend de la distribution de (X, Y)). Ainsi Φ^* peut être vu comme un repère (souvent appelé oracle dans la communauté des statisticiens), le jeu consistant maintenant à construire un classifieur Φ qui se rapproche le plus possible (en terme d'erreur de classification) de Φ^* . En particulier, l'excès de risque (parfois nommé *regret*) défini par

$$\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*),$$

joue un rôle crucial. Dans la suite, on va s'intéresser aux propriétés statistiques du classifieur des plus proches voisins (un peu de patience sa définition formelle arrive bientôt) construit à partir de l'échantillon \mathcal{S}_n . On focalisera notre étude sur les propriétés asymptotiques de l'excès de risque au travers du paradigme **minimax**. Etant donné un ensemble \mathcal{F} de distributions possible pour (X, Y) , le risque minimax est défini par

$$\delta_n(\mathcal{F}) := \inf_{\Phi} \sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*)],$$

ici l'infimum est pris sur tous les classifieurs \mathcal{S}_n -mesurables. Un classifieur Φ_n est dit minimax sur l'ensemble \mathcal{F} si il existe une constante C pour laquelle

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq C \delta_n(\mathcal{F}).$$

L'ensemble \mathcal{F} sera précisé un peu plus loin, il dépendra du comportement de (μ, η) sur \mathbb{R}^d . Ce comportement sera précisé au travers d'hypothèses de régularité de marge et de masse minimale.

La règle des plus proches voisins

Dans ce travail, on concentre nos efforts sur le classifieur des plus proches voisins qui est peut-être l'une des procédures qui a été la plus étudiée. On se place dans $(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|)$ où $\|\cdot\|$ est une distance de référence (pas forcément la distance euclidienne). Une fois récupéré notre échantillon \mathcal{S}_n et fixé un point $x \in \mathbb{R}^d$, on commence par réordonner notre échantillon $(X_{(j)}(x), Y_{(j)}(x))_{1 \leq j \leq n}$ en fonction des distances $\|X_i - x\|$, concrètement

$$\|X_{(1)}(x) - x\| \leq \|X_{(2)}(x) - x\| \leq \dots \leq \|X_{(n)}(x) - x\|.$$

Dans ce contexte, $X_{(m)}(x)$ est le m -ième plus proche voisin de x pour la distance $\|\cdot\|$ et $Y_{(m)}(x)$ est son label. Fixons maintenant un nombre de voisins k dans \mathbb{N} , le principe de l'algorithme des plus proches voisins est de construire une règle de décision basée sur les k -plus proches voisins de l'entrée X . Le classifieur \mathcal{S}_n -mesurable $\Phi_{n,k}$ est donné par

$$\Phi_{n,k}(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(X) > \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.48)$$

Pour tout $x \in \Omega$, le terme $\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(x)$ est en fait un estimateur de la fonction de régression $\eta(x)$. En particulier $\Phi_{n,k}$ peut se réécrire de la façon suivante

$$\Phi_{n,k}(X) = \mathbf{1}_{\{\hat{\eta}_n(X) > 1/2\}} \quad \text{où} \quad \hat{\eta}_n(x) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (2.49)$$

Ainsi, cette procédure peut être vue comme une procédure dite *plug-in*. L'entier k joue le rôle de *paramètre de régularisation*. En effet, si k est trop petit, le classifieur $\Phi_{n,k}$ n'utilisera pour prendre sa décision qu'une petite partie des voisins de X ce qui conduira à une variance élevée lors de la procédure de classification. Inversement si k est trop grand, on introduira un biais, dû au fait que l'on prendra une décision basée sur des observations qui sont trop éloignées de X . Le choix de k est crucial, il gouvernera la qualité de notre procédure. En particulier, $k = k_n$ dépendra de n et tendra vers l'infini avec n .

Il est maintenant nécessaire d'introduire les hypothèses permettant de caractériser la valeur optimale pour le choix du paramètre k_n .

Hypothèses

Il est bien connu qu'aucune prédiction valable n'est possible sans hypothèses sur les distributions (voir [87]). Nous allons donc restreindre la classe des distributions de (X, Y) autorisées.

Comme l'algorithme des plus proches voisins est un algorithme de classification plug-in, il est raisonnable de penser que des propriétés de régularité de la fonction η permettront d'améliorer le processus de classification. Lorsque η est régulière, les valeurs respectives de $\eta(x_1)$ et de $\eta(x_2)$ sont comparables dès que x_1, x_2 sont suffisamment proches. Autrement dit, on peut inférer le signe de $\eta(x) - \frac{1}{2}$ à partir de ceux des voisins de x .

hypothèse A1 (Régularité) *La fonction de régression η appartient à l'ensemble des fonctions Hölder de paramètre 1 et de rayon L (autrement dit à l'ensemble des fonctions L -Lipschitz). Cet espace est noté $\mathcal{C}^{1,0}(\Omega, L)$, il correspond à l'ensemble des fonctions vérifiant*

$$\forall (x_1, x_2) \in \Omega^2, \quad |\eta(x_1) - \eta(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|.$$

Nous empruntons notre deuxième hypothèse à [242]. Elle y est introduite dans le cadre de la classification binaire supervisée (cette hypothèse intervient aussi dans le modèle d'analyse discriminante lisse² [186]).

Hypothèse A2 (hypothèse de marge) *Pour tout $\alpha > 0$, il existe une constante $C > 0$ telle que*

$$\mathbb{P}_X \left(0 < \left| \eta(X) - \frac{1}{2} \right| < \epsilon \right) \leq C\epsilon^\alpha, \quad \forall \epsilon > 0.$$

On écrira alors $(\mu, \eta) \in \mathbf{M}_\alpha$.

Le classifieur de Bayes dépend du signe de $\eta(X) - 1/2$. Intuitivement, il semble aisé de deviner le comportement du classifieur lorsque la masse de l'ensemble $\{\eta = 1/2\}$ est petite. Inversement, le processus de décision risque d'être bien plus ardu lorsque $\eta(X)$ est proche de $1/2$ avec grande probabilité. L'hypothèse de marge permet de quantifier la proximité de $\eta(x)$ à $1/2$.

Dans toute la suite, $\mathcal{F}_{L,\alpha}$ désigne l'ensemble des distributions vérifiant à la fois les hypothèses **A1** et **A2**, plus précisément :

$$\mathcal{F}_{L,\alpha} := \left\{ \mathbb{P}_{(X,Y)} : \mathbb{P}_X(dx) = \mu(x)dx \text{ et } \mathcal{L}(Y|X) \sim \mathcal{B}(\eta(X)) \text{ avec } \eta \in \mathcal{C}^{1,0}(\Omega, L) \text{ and } (\mu, \eta) \in \mathbf{M}_\alpha \right\}.$$

Reste maintenant à introduire la dernière hypothèse concernant la distribution marginale de la variable X .

Hypothèse A3 (hypothèse de masse minimale forte) *Il existe $\kappa > 0$ tel que la densité marginale μ de X vérifie $\mu \in \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ où*

$$\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa) := \left\{ \mathbb{P}_X : \mathbb{P}_X(dx) = \mu(x)dx \mid \exists \delta_0 > 0, \forall \delta \leq \delta_0 \forall x \in \Omega : \mathbb{P}_X(X \in B(x, \delta)) \geq \kappa \mu(x) \delta^d \right\}.$$

Cette hypothèse assure que \mathbb{P}_X possède une masse suffisante sur chaque boule $B(x, \delta)$, la borne inférieure est contrebalancée par la valeur de la densité en x . En un certain sens, les distributions de $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ permettent l'obtention de prédictions fiables de la fonction de régression η .

2. smooth discriminant analysis

2.3.3 Cas des densités uniformément minorées sur leur support

consistance minimax de la règle des plus proches voisins

Dans cette partie, on regarde le cas particulier où la densité marginale μ est uniformément minorée sur son support par une constante strictement positive μ_- . On obtient alors la borne supérieure suivante.

Théorème 2.3.1 (Gadat, Klein, Marteau [105]). *Supposons satisfaites les hypothèses **A1-A3**. Soit $k_n = \lfloor n^{\frac{2}{2+d}} \rfloor$, alors le classifieur des plus proches voisins Φ_{n,k_n} vérifie*

$$\sup_{\mathbb{P}_{X,Y} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)^{\mu_-}} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{1+\alpha}{2+d}},$$

où $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)^{\mu_-}$ est l'ensemble des densités de $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)$ qui sont uniformément minorées sur Ω par μ_- .

Le Théorème 2.3.1 établit une vitesse de convergence pour la règle des plus proches voisins. Implicitement, on s'est restreint ici au cas des observations à support compact, cette restriction est présente dans de nombreuses études (voir entre autres [120], [47], [186] ou [123]).

Il est important de noter que notre contexte est compatible avec le cadre considéré dans [17].

Définition 2.3.1 (Hypothèse de densité forte (Strong Density Assumption (SDA)), [17]). La distribution marginale de X vérifie l'hypothèse de densité forte si

- elle admet une densité μ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d ,
- il existe deux constantes $(\mu_-, \mu_+) \in]0, +\infty[^2$ pour lesquelles la densité μ vérifie pour tout $x \in \text{Supp}(\mu)$

$$\mu_- \leq \mu(x) \leq \mu_+,$$

- le support de μ est (c_0, r_0) -régulier c'est-à-dire, s'il existe deux constantes strictement positives c_0 et r_0 telles que pour tout x dans le support de μ

$$\lambda[\text{Supp}(\mu) \cap B(x, r)] \geq c_0 \lambda[B(x, r)], \forall r \leq r_0.$$

Proposition 2.3.1. *Lorsque la densité est uniformément minorée par une constante strictement positive, les hypothèses SDA et (**A3**) sont équivalentes.*

On peut donc utiliser les résultats de vitesse minimax obtenus dans [17] et énoncer le théorème suivant.

Théorème 2.3.2 (Théorème 3.3, [17]). *Si les hypothèses **A1-A3** sont vérifiées et s'il existe $\mu_- > 0$ tel que $\mu(x) > \mu_-$ pour tout $x \in \Omega$, alors la vitesse de classification minimax est minorée et vérifie*

$$\inf_{\Phi} \sup_{\mathbb{P}_{X,Y} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)^{\mu_-}} [\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim n^{-\frac{1+\alpha}{2+d}}.$$

Grâce à ce théorème, on peut donc conclure que la règle des plus proches voisins atteint la vitesse de convergence minimax lorsque μ est uniformément minorée.

2.3.4 Cas général pour les espaces de dimension finie

L'hypothèse de queues

Les résultats précédents ne s'appliquent qu'aux problèmes de classification binaire supervisée pour des entrées à support compact et à densités uniformément minorées sur ce support. Ce cadre n'est pas satisfaisant car il ne recouvre pas de nombreuses distributions classiques (par exemple les distributions Gaussiennes, de Laplace, de Cauchy et de Pareto sont exclues). Ainsi ces contraintes paraissent assez peu réalistes.

On va donc maintenant étudier le cas où la densité marginale μ de X n'est plus minorée. Le jeu est alors le suivant : nous devons maintenant prédire des labels à des endroits où il n'y a "pas" d'observation. Pour pouvoir faire face à ce problème, nous introduisons une nouvelle hypothèse.

hypothèse A4 (hypothèse de queue) Il existe une fonction ψ croissante dans un voisinage de 0 vérifiant $\psi(\epsilon) \rightarrow 0$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0$ et telle que

$$\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} := \left\{ \mathbb{P}_X : \exists \epsilon_0 \in \mathbb{R}_+^* : \forall \epsilon < \epsilon_0, \mathbb{P}_X(\{\mu < \epsilon\}) \leq \psi(\epsilon) \right\},$$

$\mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$ correspond au cas particulier $\psi = Id$.

Résultats de non consistance universelle

Commençons par justifier l'introduction des ensembles $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ et $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$. Nous allons montrer ici qu'il n'est pas possible d'obtenir des résultats de consistance uniforme si une des deux hypothèses **A3** **A4** n'est pas vérifiées.

Théorème 2.3.3 (Gadat, Klein, Marteau [105]). *Supposons que la loi $\mathbb{P}_{X,Y}$ appartienne à l'ensemble $\mathcal{F}_{L,\alpha}$ alors*

*i) Il n'existe pas de règle de classification universellement consistante si les hypothèses **A1-A3** sont satisfaites et **A4** ne l'est pas. En effet, pour tout n , pour toute règle Φ_n et tout $\epsilon < 4^{-\alpha}$, il existe une distribution $\mathbb{P}_{(X,Y)}^n$ dans $\mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ telle que*

$$\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*) \geq \epsilon.$$

*ii) Il n'existe pas de règle de classification universellement consistante si les hypothèses **A1, A2, A4** sont satisfaites et **A3** ne l'est pas. En effet, pour tout n ; pour toute règle Φ_n et tout $\epsilon < 4^{-\alpha}$, il existe une distribution $\mathbb{P}_{(X,Y)}^n$ dans $\mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$ telle que*

$$\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*) \geq \epsilon.$$

- Le premier résultat *i)* nous dit que même si l'hypothèse de masse minimale **A3** est satisfaite par la densité de X , il n'est pas possible d'espérer obtenir un résultat de consistance uniforme sur toute la classe de densités considérées. En un certain sens, le support de la variable X semble être trop grand pour pouvoir obtenir de bonnes prédictions sans conditions supplémentaires. L'hypothèse de queue **A4** permettra de compenser ce problème de support. Ce genre de problème a déjà été observé dans des problèmes d'estimation de densités. On renvoie à [210] et aux références qui y sont citées pour une description plus détaillée de ce problème.
- Le second résultat *ii)* montre que l'hypothèse de masse minimale **A3**, est elle aussi incontournable lorsque les densités ne sont plus à support compact. Cette observation est cohérente avec les études précédentes de [118] et de [86].

Vitesse de convergence minimax

Nous sommes maintenant en mesure de décrire précisément la vitesse de convergence minimax lorsque les hypothèses **A2, A3** et **A4** sont satisfaites.

Borne minimax inférieure

Théorème 2.3.4. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons satisfaites les hypothèses **A1-A3** et que l'hypothèse **A4** l'est pour $\psi = Id$. Alors*

$$\inf_{\Phi_n} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa) \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim n^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

Le cas général pour des fonctions ψ autres que l'identité sera traité dans le Théorème 5.1.7. Il fournira des bornes inférieures pour des distributions ayant des queues différentes. Remarquons que l'on retrouve ici la vitesse obtenue par [17] pour les densités à support compact sous l'hypothèse *Mild Density Assumption* pour le cas particulier $\psi = Id$. Cela implique, que dans le cas non compact même avec l'hypothèse supplémentaire sur la queue, la vitesse ne peut pas être meilleure que celle obtenue dans le cadre des densités à support compact.

Une borne supérieure pour la règle des plus proches voisins

Lorsque la densité n'est plus uniformément minorée sur son support, l'entier k_n sera choisi de manière à contrebalancer la probabilité des petites boules dans la queue de distribution. Par exemple lorsque $\psi = Id$, on montre qu'un bon choix pour k_n est

$$k_n := \lfloor n^{\frac{2}{3+\alpha+d}} \rfloor.$$

On peut remarquer que cette valeur diffère notablement de celle de la section précédente.

Théorème 2.3.5. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons que les hypothèses **A1-A3** sont satisfaites et que l'hypothèse **A4** l'est pour $\psi = Id$, alors, si $k_n := \lfloor n^{\frac{2}{3+\alpha+d}} \rfloor$, on a*

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{(1+\alpha)}{(3+\alpha+d)}}.$$

Ces résultats montrent que le prix à payer pour sortir du cas compact est une dégradation de la vitesse de $n^{-(1+\alpha)/(2+d)}$ à au moins $n^{-(1+\alpha)/(2+\alpha+d)}$ (voir par exemple Théorème 2.3.4 lorsque $\psi(\epsilon) \sim \epsilon$). Remarquons que la borne supérieure obtenue ne colle pas à la borne inférieure qui était $n^{-(1+\alpha)/(2+\alpha+d)}$. A ce stade pour obtenir la bonne majoration, il est nécessaire de changer légèrement la construction de nos plus proches voisins. C'est l'objet du paragraphe suivant.

Borne minimax supérieure pour obtenir une règle des plus proches voisins quasi-optimale

La borne supérieure obtenue au Théorème 2.3.5 peut être améliorée si on change la façon de construire le paramètre de régularisation k_n . Jusqu'à présent le nombre k_n de voisins utilisés pour choisir le label de X était le même quelle que soit la position de X dans l'espace. Nous allons maintenant faire dépendre ce k_n de la position. Cette dépendance reposera fortement sur la valeur de la densité μ au point x . Formellement, pour tout $j \in \mathbb{N}$, on définit

$$\Omega_{n,0} := \left\{ x \in \mathbb{R}^d : \mu(x) \geq n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}} \right\},$$

et

$$\Omega_{n,j} = \left\{ x \in \mathbb{R}^d : \frac{n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}}}{2^j} \leq \mu(x) < \frac{n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}}}{2^{j+1}} \right\}.$$

On pose alors $k_{n,0} = \lfloor n^{\frac{2}{2+\alpha+d}} \log(n) \rfloor$ et pour tout $j \in \mathbb{N}$, on utilisera

$$k_n(x) = \lfloor k_{n,0} 2^{-2j/(2+d)} \rfloor \vee 1 \quad \text{lorsque } x \in \Omega_{n,j}. \quad (2.50)$$

En accord avec l'équation (2.50), le nombre de voisins concernés par le processus de décision dépend de la position spatiale de X . En un certain sens, cette position est liée à la queue de la distribution. Une telle construction par tranches successives peut-être interprétée comme une sélection spatiale adaptative de la fenêtre de lissage. Cette fenêtre est plus petite aux points $x \in \mathbb{R}^d$ pour lesquelles $\mu(x)$ est petite. Cette idée est à rapprocher de celle développée dans [113] pour un problème d'estimation adaptative minimax de densités.

Théorème 2.3.6 (Gadat, Klein, Marteau [105]). *Supposons les hypothèses **A1-A3** satisfaites et que l'hypothèse de queue **A4** est satisfaite pour $\psi = Id$. Alors si k_n est choisi en accord avec l'équation (2.50) le classifieur des plus proches voisins Φ_{n,k_n}^* vérifie*

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}^*) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{(1+\alpha)}{(2+\alpha+d)}} (\log n)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{d}}.$$

Respirons trente secondes et comparons la borne supérieure du Théorème 2.3.6 à la borne inférieure du Théorème 2.3.4. Elles sont égales (enfin presque, il y a un petit logarithme en trop dans la borne supérieure). Il doit être possible de se débarrasser de ce terme logarithme à l'aide d'un nouveau découpage. Ainsi, on peut avancer que le taux minimax exact lorsque l'hypothèse de queue dépend de $\psi = Id$ est

$$\inf_{\Phi} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}^*) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \sim n^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

2.4 Analyse de sensibilité et quantification des incertitudes

2.4.1 La problématique de la quantification des incertitudes

Dans de nombreux problèmes provenant du monde industriel, la quantité d'intérêt, que l'on notera pour l'instant y (puis Y quand elle deviendra aléatoire), est l'image par une application déterministe f d'un certain nombre de variables d'entrée x_1, \dots, x_p . Les variables d'entrée peuvent être des réels, des vecteurs ou même des fonctions. La fonction f , bien que déterministe, n'est pas connue ; c'est généralement un code de calcul dit *boîte noire*. En d'autres termes, si l'on donne à notre calculateur un jeu d'entrées x_1, \dots, x_p , ce dernier nous donne une valeur $f(x_1, \dots, x_p)$. Cependant, on n'a pas un accès direct à la fonction f . L'objectif rêvé serait ici de connaître parfaitement la fonction f . Ce souhait est bien évidemment irréaliste, d'autant plus que dans de nombreuses applications industrielles l'exécution du code numérique pour obtenir une seule valeur de y peut prendre plusieurs heures (parfois quelques jours). En plus de l'aspect temporel, un autre problème vient se rajouter. Dans les applications, les variables d'entrée sont souvent mal connues (les ingénieurs parlent de variables incertaines). Elles sont par la suite modélisées par des variables (vecteurs ou processus) aléatoires. On est essentiellement face à deux problèmes : comment gérer la fonction f inconnue et le coût élevé de calcul ? Comment gérer l'aléatoire sur les variables d'entrée ?

Imaginons que nous n'ayons le droit qu'à une centaine d'appels à notre code numérique. Il est naturel d'essayer de choisir les points d'expérience (un point $x = (x_1, \dots, x_p)$ pour lequel on calcule la valeur $f(x_1, \dots, x_p)$ est appelé point d'expérience) nous permettant d'obtenir un maximum d'information. On parle alors de plan d'expérience. Une fois nos points d'expérience choisis, il peut être judicieux de construire un code approché moins coûteux, on parle de méta-modèle. On peut aussi vouloir essayer de détecter les variables d'entrée importantes afin de pouvoir concentrer notre étude sur ces variables et négliger les autres. Les problématiques de plans d'expériences, de construction de méta-modèles et de détection de variables importantes sont bien évidemment liées. Néanmoins, j'ai focalisé mon attention sur le troisième point.

2.4.2 Détection de variables importantes et indices de Sobol

Notre objectif est donc maintenant d'identifier dans notre modèle de type boîte noire les variables d'entrée les plus importantes ; c'est-à-dire celles qui auront le plus d'influence sur la sortie. Une des approches consiste à considérer que les variables d'entrée sont des variables aléatoires indépendantes dont la loi est fixée par l'utilisateur en fonction de l'idée qu'il a, concernant l'incertitude sur les entrées (nous renvoyons à [187] ainsi qu'à [221] et à leur bibliographie). Ainsi, la sortie du modèle est maintenant une variable aléatoire. Lorsque la sortie est un scalaire, sa variance peut être décomposée grâce à la décomposition dite de Hoeffding [244, 10, 127]. Chaque variance partielle mesure en un certain sens la partie de l'aléa de la sortie due à l'entrée considérée. En considérant alors le rapport entre cette variance partielle et la variance totale, on obtient une mesure de l'importance de chaque variable d'entrée appelée *l'indice de Sobol* [230]. Ainsi les entrées les plus influentes peuvent être identifiées et ordonnées en fonction de la valeur des indices de Sobol correspondants. Une fois ces indices définis, le problème de leur estimation reste entier. En pratique, on cherche à estimer ces indices en utilisant un nombre fini d'évaluations du code numérique ([125]). De nombreuses approches de type Monte-Carlo ou quasi-Monte-Carlo ont été développées par les ingénieurs comme par exemple la méthode FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test, [77], [239]). Une manière très astucieuse d'estimer les indices de Sobol est la méthode appelée Pick-Freeze (voir [230, 231]). Cette méthode, basée sur un plan d'expérience spécifique, est très puissante. Elle ne dépend absolument pas du modèle considéré et transforme le problème initial complexe d'estimation statistique en un simple problème de régression linéaire. Bien que très utilisée en pratique (voir par exemple [222]), cette méthode conduit à un estimateur qui n'avait jamais été étudié d'un point de vue mathématique. Ses propriétés de convergence n'étaient pas connues et il était naturel et même important pour justifier son utilisation de connaître son comportement. Par exemple qu'elle est sa vitesse de convergence (existence de théorèmes central limite, de Berry-Esseen, propriétés de concentration, optimalité en termes d'efficacité asymptotique). Afin de comparer plusieurs indices entre eux, il était aussi important d'être capable d'obtenir une loi limite jointe pour l'estimation simultanée de plusieurs indices (cela permet d'obtenir des régions de confiance et de mettre en place une stratégie rigoureuse de tests

statistiques).

Les premières réponses à ces questions ont été obtenues en collaboration avec Fabrice Gamboa, Alexandre Janon, Agnès Lagnoux, Maëlle Nodet et Clémentine Prieur [136, 109]. Une fois cette première étape effectuée, plusieurs questions restaient en suspens.

- Malgré l'efficacité asymptotique de l'estimateur Pick-Freeze, est-il possible de trouver de meilleurs estimateurs ? L'optimalité en terme d'efficacité asymptotique est un peu trompeuse car ce type d'optimalité est lié au plan d'échantillonnage considéré. Nous avons donc étudié (travail effectué avec Jean-Claude Fort, Agnès Lagnoux et Béatrice Laurent [101]) un modèle de régression linéaire fonctionnelle pour lequel nous avons proposé à partir d'un plan d'échantillonnage différent un estimateur des indices de Sobol concurrent. Nous avons étudié ses propriétés (TCL, efficacité) et l'avons comparé à l'estimateur Pick-Freeze. Le nouvel estimateur considéré est construit en tenant compte de la forme spécifique du modèle. Ainsi lorsque la méthode est bien adaptée aux processus en présence, il est meilleur que l'estimateur Pick-Freeze. Rappelons, que ce dernier ne dépend pas du modèle, ainsi ses performances sont les mêmes quel que soit le modèle.
- Les indices de Sobol n'étaient définis que pour des sorties réelles : il était naturel de se poser la question de comment les généraliser en dimension supérieure (la sortie du code est un vecteur ou même une fonction). C'est ce que nous avons fait avec Fabrice Gamboa, Alexandre Janon et Agnès Lagnoux [108]. Nous avons expliqué comment définir des indices de Sobol pour des sorties qui ne sont pas nécessairement réelles et qui gardent les mêmes propriétés que les indices pour les sorties réelles.
- Il restait alors encore au moins une question fondamentale qui finalement aurait dû être la question de départ (il semble que peu de personnes se la posent...) : les indices sont-ils si bien adaptés que cela pour détecter les variables influentes ? Les indices de Sobol sont construits à partir d'une décomposition de la variance et par suite ils ne peuvent être pertinents que pour détecter les variables influentes pour le comportement moyen de notre modèle mais certainement pas pour d'autres comportements (par exemple des comportements extrêmes). Avec Jean-Claude Fort et Nabil Rachdi [102], nous avons montré que l'importance d'une variable dépendait fortement de la quantité à laquelle on s'intéresse et nous avons proposé une méthodologie permettant de construire un indice en fonction de la quantité d'intérêt. Ensuite avec Fabrice Gamboa et Agnès Lagnoux [110], nous avons proposé un indice qui prend en compte toute la distribution de la sortie et pas seulement sa variance. Cet indice est basé sur la distance de Cramér-von Mises. La bonne surprise de notre approche est qu'il existe encore un estimateur de type Pick-Freeze pour cet indice. Ainsi en terme de coût d'estimation, il n'est pas plus cher de regarder un indice prenant en compte toute la distribution plutôt qu'un indice basé uniquement sur la variance.

2.4.3 Cadre mathématique

Soient $X := (X_1, \dots, X_p)$ le vecteur des variables d'entrée définies sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ à valeur dans un espace mesurable $E = E_1 \times \dots \times E_p$. Pour $f : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ est une fonction mesurable inconnue (p et k sont des entiers strictement positifs) Y désigne la sortie du code

$$Y = f(X_1, \dots, X_p).$$

On suppose que les variables X_1, \dots, X_p sont indépendantes et que Y est de carré intégrable (i.e. $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$). On suppose aussi que la matrice de covariance de Y est définie positive.

Soit \mathbf{u} un sous-ensemble de $\{1, \dots, p\}$ et $\sim \mathbf{u}$ son complémentaire dans $\{1, \dots, p\}$. On note $X_{\mathbf{u}} = (X_i, i \in \mathbf{u})$ et $E_{\mathbf{u}} = \prod_{i \in \mathbf{u}} E_i$.

Grâce à l'indépendance des variables d'entrée X_1, \dots, X_p , on peut décomposer f de la manière suivante

$$f(X) = c + f_{\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}) + f_{\sim \mathbf{u}}(X_{\sim \mathbf{u}}) + f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}, X_{\sim \mathbf{u}}), \quad (2.51)$$

où $c \in \mathbb{R}^k$, $f_{\mathbf{u}} : E_{\mathbf{u}} \rightarrow \mathbb{R}^k$, $f_{\sim \mathbf{u}} : E_{\sim \mathbf{u}} \rightarrow \mathbb{R}^k$ et $f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}} : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ sont données par

$$c = \mathbb{E}(Y), \quad f_{\mathbf{u}} = \mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}) - c, \quad f_{\sim \mathbf{u}} = \mathbb{E}(Y|X_{\sim \mathbf{u}}) - c, \quad f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}} = Y - f_{\mathbf{u}} - f_{\sim \mathbf{u}} - c.$$

Comme les termes apparaissant dans la décomposition sont orthogonaux dans L^2 , on peut calculer de chaque côté de (2.51) les matrices de covariance et obtenir

$$\Sigma = C_{\mathbf{u}} + C_{\sim\mathbf{u}} + C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}. \quad (2.52)$$

Ici Σ , $C_{\mathbf{u}}$, $C_{\sim\mathbf{u}}$ et $C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}$ dénotent respectivement les matrices de covariance de Y , $f_{\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}})$, $f_{\sim\mathbf{u}}(X_{\sim\mathbf{u}})$ et de $f_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}, X_{\sim\mathbf{u}})$.

Cette décomposition s'appelle *la décomposition de Hoeffding* de f [244, 10, 127].

Supposons maintenant que $k = 1$ (i.e. $Y \in \mathbb{R}$) et divisons par $\Sigma = \text{Var}(Y)$ l'égalité (2.52) on obtient

$$1 = \frac{C_{\mathbf{u}}}{\Sigma} + \frac{C_{\sim\mathbf{u}}}{\Sigma} + \frac{C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}}{\Sigma} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)} + \frac{(\text{Var}\mathbb{E}(Y|X_{\sim\mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)} + \frac{C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}}{\Sigma}. \quad (2.53)$$

Définition 2.4.1. Lorsque $Y \in \mathbb{R}$, on appelle indice de Sobol (fermé) par rapport aux entrées $X_{\mathbf{u}} = (X_i, i \in \mathbf{u})$, la quantité $S^{\mathbf{u}} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)}$.

Cette quantité représente la proportion de la variance de Y qui est due à l'action des variables $X_{\mathbf{u}}$ seules.

2.4.4 Estimateur Pick-Freeze en dimension 1

On introduit la variable Pick-Freeze Y^u définie de la manière suivante : soient $X = (X_1, \dots, X_p)$ et $X^u = (X_1^u, \dots, X_p^u)$ où $X_i^u = X_i$ si $i \in \mathbf{u}$ et X_i^u est une copie indépendante de X_i sinon. On note alors

$$Y^u = f(X^u).$$

Lemme 2.4.1. *Supposons que les variables Y et Y^X sont de carré intégrable. Alors*

$$\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}})) = \text{Cov}(Y, Y^u).$$

En particulier,

$$S^{\mathbf{u}} = \frac{\text{Cov}(Y, Y^u)}{\text{Var}(Y)}. \quad (2.54)$$

Soient $(X^i)_{i=1, \dots, N}$ un N -échantillon de X et $(X^{u,i})_{i=1, \dots, N}$ un N -échantillon de X^u , on pose $Y_i = f(X^i)$ et $Y_i^u = f(X^{u,i})$. Il est alors naturel d'estimer $S^{\mathbf{u}}$ par

$$S_N^u = \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^u - \left(\frac{1}{N} \sum Y_i\right) \left(\frac{1}{N} \sum Y_i^u\right)}{\frac{1}{N} \sum Y_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum Y_i\right)^2}. \quad (2.55)$$

On retrouve cet estimateur dans [130], où a été montré son bon comportement en pratique.

Le lecteur attentif aura remarqué que nous disposons ici de deux N -échantillons (non indépendants) mais de même loi que Y et que nous ne nous servons que d'un de ces deux échantillons pour estimer $\mathbb{E}(Y)$ et $\text{Var}(Y)$. Il paraît intuitif qu'en utilisant la totalité des observations nous devrions obtenir un estimateur plus performant. Pour cela, nous considérons

$$T_N^u = \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^u - \left(\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i + Y_i^u}{2}\right]\right)^2}{\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i^2 + (Y_i^u)^2}{2}\right] - \left(\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i + Y_i^u}{2}\right]\right)^2}. \quad (2.56)$$

Cet estimateur concurrent a été introduit dans [182]. Nous allons montrer qu'il est meilleur que S_N^X au sens où il est asymptotiquement efficace.

Consistance, théorème central limite et efficacité asymptotique

Proposition 2.4.1 (Janon, Klein, Lagnoux, Nodet, Prieur [136]). Consistance, TCL, Efficacité).

1. On a

$$(S_N^X, T_N^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{p.s.} (S^X, S^X) \quad (2.57)$$

2. Si de plus $\mathbb{E}(Y^4) < \infty$, alors

$$\sqrt{N} (S_N^X - S^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma_S^2) \quad (2.58)$$

et

$$\sqrt{N} (T_N^X - S^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma_T^2) \quad (2.59)$$

où

$$\sigma_S^2 = \frac{\text{Var}((Y - \mathbb{E}(Y))[(Y^X - \mathbb{E}(Y)) - S^X(Y - \mathbb{E}(Y))])}{(\text{Var}(Y))^2},$$

$$\sigma_T^2 = \frac{\text{Var}((Y - \mathbb{E}(Y))(Y^X - \mathbb{E}(Y)) - S^X/2((Y - \mathbb{E}(Y))^2 + (Y^X - \mathbb{E}(Y))^2))}{(\text{Var}(Y))^2}.$$

3. Soient \mathcal{P} l'ensemble des fonctions de répartition des vecteurs aléatoires échangeables de $L^2(\mathbb{R}^2)$. Soit P la fonction de répartition du couple (Y, Y^X) . Alors $P \in \mathcal{P}$ et $\{T_N^X\}_N$ est asymptotiquement efficace pour estimer S^X .

Afin de savoir si une variable est plus importante qu'une autre, il est important d'être capable d'estimer conjointement plusieurs indices de Sobol et de connaître le comportement limite de ce vecteur d'estimateurs. Soient l un entier naturel, $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_l)$ et l sous-ensembles distincts de $\{1, \dots, p\}$ (on rappelle que p est le nombre d'entrées). On note

$$S^{\mathbf{u}} = (S^{u_1}, \dots, S^{u_l})$$

et

$$S_{N, \text{Cl}}^{\mathbf{u}} = (S_N^{u_1}, \dots, S_N^{u_l}), \quad T_{N, \text{Cl}}^{\mathbf{u}} = (T_N^{u_1}, \dots, T_N^{u_l}).$$

Théorème 2.4.1 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109]). Si $\mathbb{E}(Y^4) < \infty$, alors

1.

$$\sqrt{N} (S_N^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_l(0, \Gamma_{\mathbf{u}, S}) \quad (2.60)$$

où $\Gamma_{\mathbf{u}, S} = ((\Gamma_{\mathbf{u}, S})_{l,j})_{1 \leq l, j \leq k}$ avec

$$(\Gamma_{\mathbf{u}, S})_{l,j} = \frac{\text{Cov}(YY^{u_l}, YY^{u_j}) - S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Cov}(YY^{u_j}, Y^2) - S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Cov}(YY^{u_l}, Y^2) + S_{\text{Cl}}^{u_j} S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Var}(Y^2)}{(\text{Var}(Y))^2}.$$

2.

$$\sqrt{N} (T_{N, \text{Cl}}^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_k(0, \Gamma_{\mathbf{u}, T}) \quad (2.61)$$

où $\Gamma_{\mathbf{u}, T} = ((\Gamma_{\mathbf{u}, T})_{l,j})_{1 \leq l, j \leq k}$ avec

$$(\Gamma_{\mathbf{u}, T})_{l,j} = \frac{\text{Cov}(YY^{u_l}, YY^{u_j}) - S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Cov}(YY^{u_j}, M^{\mathbf{u}}) - S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Cov}(YY^{u_l}, M^{\mathbf{u}}) + S_{\text{Cl}}^{u_j} S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Var}(M^{\mathbf{u}})}{(\text{Var}(Y))^2}.$$

Comme le théorème central limite est un résultat asymptotique, il peut parfois être non informatif à taille d'échantillon fixée, c'est pour cela qu'il est intéressant d'avoir des inégalités de concentration ou des théorèmes de Berry-Esseen pour obtenir des bornes fiables à N fixé.

Inégalités de concentration

Nous avons obtenu des inégalités de concentration à la fois pour l'estimateur $S_{N,C1}^{\mathbf{u}}$ et l'estimateur $T_{N,C1}^{\mathbf{u}}$. Les deux théorèmes étant presque identiques, nous n'en présentons qu'un dans cette synthèse (le lecteur trouvera le second dans la Section 6.3.4).

Inégalités de concentration pour l'estimateur $S_{N,C1}^{\mathbf{u}}$ Nous présentons ici des inégalités de concentration vérifiées par les estimateurs Pick-Freeze des indices de Sobol. Pour cela, on introduit la fonction h définie pour $x > -1$ par $h(x) = (1+x)\ln(1+x) - x$. Considérons les variables aléatoires

$$U_i^{\pm} = Y_i Y_i^{\mathbf{u}} - (S_{C1}^{\mathbf{u}} \pm y)(Y_i)^2 \text{ et } J_i^{\pm} = (S_{C1}^{\mathbf{u}} \pm y)Y_i - Y_i^{\mathbf{u}}$$

et notons V_U^{\pm} (respectivement V_U^-, V_J^+ et V_J^-) les moments d'ordre 2 des variables i.i.d U_i^{\pm} (resp. U_i^-, J_i^+ et J_i^-).

Théorème 2.4.2 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109]). *Soit $b > 0$ et $y > 0$. Si les variables Y_i et $Y_i^{\mathbf{u}}$ sont à valeurs dans $[-b, b]$, alors*

$$\mathbb{P}(S_{N,C1}^{\mathbf{u}} \geq S_{C1}^{\mathbf{u}} + y) \leq M_1 + 2M_2 + 2M_3, \quad (2.62)$$

$$\mathbb{P}(S_{N,C1}^{\mathbf{u}} \leq S_{C1}^{\mathbf{u}} - y) \leq M_4 + 2M_2 + 2M_5, \quad (2.63)$$

où

$$\begin{aligned} M_1 &= \exp \left\{ -\frac{NV_U^+}{b_U^2} h \left(\frac{b_U y V}{V_U^+ 2} \right) \right\}, & M_3 &= \exp \left\{ -\frac{NV_J^+ b^2}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{bV_J^+} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\}, \\ M_2 &= \exp \left\{ -\frac{NV}{b^2} h \left(\frac{b}{V} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\}, & M_4 &= \exp \left\{ -\frac{NV_U^-}{b_U^2} h \left(\frac{b_U y V}{V_U^- 2} \right) \right\}, \\ M_5 &= \exp \left\{ -\frac{NV_J^- b^2}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{bV_J^-} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\} \end{aligned}$$

et $b_U = b^2(1 + S_{C1}^{\mathbf{u}} + y)$.

Théorèmes de Berry-Esseen

Dans ce paragraphe, nous montrons des théorèmes de type Berry-Esseen pour l'estimateur $S_{N,C1}^{\mathbf{u}}$. Le premier théorème est une application d'un résultat général de Pinelis [197]. Ce résultat de Pinelis peut être vu comme l'analogie de la Delta méthode, il permet de transporter un résultat de type Berry-Esseen à l'aide de fonctions régulières. Ce théorème est très général et fait intervenir des constantes difficilement calculables en pratique. C'est pour cela que nous présentons un second théorème valable pour des variables centrées mais pour lequel les constantes sont explicites. Soit Φ la fonction de répartition de la loi Gaussienne centrée réduite.

Le travail de Pinelis Nous rappelons ici un résultat de Pinelis démontré dans [197]. Soient $(V_i)_{i \geq 1}$ une suite de variables aléatoires centrées i.i.d. à valeurs dans \mathbb{R}^d muni de sa norme $\|\dots\|$ et f une fonction mesurable de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R} vérifiant $f(0) = 0$ dérivable au sens de Fréchet en 0 et telle que

$$\exists \varepsilon > 0, \exists M_\varepsilon > 0 \text{ s. t. } |f(x) - L(x)| \leq \frac{M_\varepsilon}{2} \|x\|^2 \quad (2.64)$$

où $L := Df(0)$ est la dérivée de Fréchet de f au point 0.

Remarque 2.4.1. La condition (2.64) est automatiquement satisfaite si f est de classe C^2 dans un voisinage de 0.

Théorème 2.4.3 (Corollary 3.7 dans [197]). *Soit $p \in (2, 3]$. Supposons (2.64) satisfaite, si*

$$\sigma := \sqrt{\mathbb{E}(L(V)^2)} > 0,$$

et si $(\mathbb{E}(\|V\|^p))^{1/p} < \infty$. Alors pour tout $z \in \mathbb{R}$,

$$\left| \mathbb{P} \left(\frac{f(\bar{V}_n)}{\sigma/\sqrt{n}} \leq z \right) - \Phi(z) \right| \leq \frac{\kappa}{n^{p/2-1}}, \quad (2.65)$$

où κ est une constante ne dépendant que de p .

Un théorème de Berry-Esseen général Pour toute variable aléatoire Z , on notera $Z^c = Z - \mathbb{E}(Z)$ sa version recentrée.

Théorème 2.4.4 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109]). *Si Y admet des moments d'ordre 6, alors pour tout $z \in \mathbb{R}$,*

$$\left| \mathbb{P} \left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} [S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}] \leq z \right) - \Phi(z) \right| \leq \frac{\kappa}{\sqrt{N}} \quad (2.66)$$

où

$$\sigma^2 := \text{Var} \left(\frac{1}{V} (Y^c(Y^{\mathbf{u}})^c - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}(Y^c)^2) \right)$$

est la variance asymptotique de $\sqrt{N}S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}}$.

Malheureusement, il semble difficile de calculer explicitement la constante κ et donc en un certain sens ce théorème n'est pas très utile. Cependant, si l'on suppose les variables centrées et en modifiant légèrement nos estimateurs (on n'estime plus l'espérance qui vaut 0), on peut obtenir un théorème de Berry-Esseen avec des constantes explicites.

Un théorème de Berry-Esseen avec constantes explicites Considérons l'estimateur

$$\tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} := \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^{\mathbf{u}}}{\frac{1}{N} \sum Y_i^2}$$

et supposons les variables centrées, Soit $\kappa \approx 0.42$ la meilleure constante connue dans le théorème classique de Berry-Esseen ([156]). Alors on a

Théorème 2.4.5 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109]). *Si la variable Y est centrée et admet un moment d'ordre 6, alors pour tout t dans \mathbb{R} ,*

$$\left| \mathbb{P} \left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} (\tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \leq t \right) - \Phi(t) \right| \leq \frac{\kappa \mu_{3,N}}{\sqrt{N}} + \left| \Phi(t) - \Phi \left(\frac{t}{\sqrt{1 + \frac{t\nu_N}{\sigma\sqrt{NV^2}}}} \right) \right|, \quad (2.67)$$

où

$$\sigma^2 := \text{Var} \left(\frac{1}{V} (Y Y^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} Y^2) \right) \quad (2.68)$$

est la variance asymptotique de $\sqrt{N}\tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}}$ et

$$\begin{aligned} \mu_{3,N} &:= \mathbb{E} \left[\left| \frac{\Delta_n - \mathbb{E}(\Delta_n)}{\sqrt{\text{Var}\Delta_n}} \right|^3 \right], \\ \Delta_N &:= \sigma^{-1} V \left[Y Y^{\mathbf{u}} - \left(S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} + \frac{t\sigma}{\sqrt{N}} \right) Y^2 \right], \\ \nu_N &:= \left(\frac{t\sigma}{\sqrt{N}} + 2S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \right) \text{Var}(Y^2) - 2\text{Cov}(Y Y^{\mathbf{u}}, Y^2). \end{aligned}$$

2.4.5 Indices de Sobol en dimension supérieure et leur estimateur Pick-Freeze

Dans les paragraphes précédents, nous avons défini les indices de Sobol, proposé une méthode d'estimation et étudié les propriétés statistiques de ces estimateurs lorsque la sortie Y est réelle. Bien évidemment, dans de nombreuses applications, la sortie est vectorielle ou fonctionnelle. Il est donc naturel de vouloir généraliser les indices de Sobol pour ce type de sorties. C'est l'objectif de cette partie.

Des généralisations des indices de Sobol pour des sorties vectorielles ou fonctionnelles ont été considérées d'une manière empirique dans [58] et [160]. La généralisation que nous allons proposer se retrouve de façon implicite dans le travail de Lamboni et de ses co-auteurs [160]. Le point de départ de la construction de ces nouveaux indices est une fois encore la décomposition de Hoeffding multidimensionnelle de la sortie vectorielle. Cependant, comme le produit matriciel est non commutatif, plusieurs choix d'indices sont possibles. Afin de réduire les possibilités, nous allons demander à nos indices d'une part d'avoir certaines propriétés naturelles d'invariance et d'autre part d'être facilement estimables (par exemple en utilisant la méthode Pick-Freeze).

Indices de Sobol généralisés

Le point de départ est toujours la décomposition de Hoeffding qui rappelle le conduit à la décomposition suivante de la matrice de covariance

$$\Sigma = C_{\mathbf{u}} + C_{\sim\mathbf{u}} + C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}, \quad (2.69)$$

où Σ , $C_{\mathbf{u}}$, $C_{\sim\mathbf{u}}$ et $C_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}$ correspondent respectivement aux matrices de covariance de Y , $\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}) - \mathbb{E}(Y)$, $\mathbb{E}(Y|X_{\sim\mathbf{u}}) - \mathbb{E}(Y)$ et de $Y - \mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}) - \mathbb{E}(Y|X_{\sim\mathbf{u}}) + \mathbb{E}(Y)$ (voir (2.51) pour plus de détails sur cette décomposition).

Il est bon de noter ici que lorsque la sortie est réelle (i.e. $k = 1$), les matrices de covariance sont des scalaires. Dans le cas général ($k \geq 2$), pour toute matrice M de taille k , l'équation (2.69) peut-être "projetée" dans \mathbb{R} comme suit

$$\text{Tr}(M\Sigma) = \text{Tr}(MC_{\mathbf{u}}) + \text{Tr}(MC_{\sim\mathbf{u}}) + \text{Tr}(MC_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}).$$

Cela permet de définir (dès que $\text{Tr}(M\Sigma) \neq 0$) la mesure de M -sensibilité de Y par rapport à $X_{\mathbf{u}}$ par

$$S^{\mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}.$$

Evidemment, on définit de manière analogue

$$S^{\sim\mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\sim\mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}, \quad S^{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}.$$

Nous avons alors montré qu'avec cette projection, l'unique choix raisonnable de M était de prendre la matrice identité. On notera alors l'indice $S^{\mathbf{u}}(f)$. C'est le seul choix qui permet d'avoir les propriétés suivantes

Proposition 2.4.2 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). *1. La mesure de sensibilité généralisée se somme à 1*

$$S^{\mathbf{u}}(f) + S^{\sim\mathbf{u}}(f) + S^{\mathbf{u},\sim\mathbf{u}}(f) = 1. \quad (2.70)$$

2. $0 \leq S^{\mathbf{u}}(f) \leq 1$.

3. La mesure de sensibilité est inchangée si on compose à gauche f par une application orthogonale O de \mathbb{R}^k ,

$$S^{\mathbf{u}}(Of) = S^{\mathbf{u}}(f). \quad (2.71)$$

4. $S^{\mathbf{u}}(f)$ est invariant par tout changement d'échelle de f i.e.

$$\text{pour tout } \lambda \in \mathbb{R}, \quad S^{\mathbf{u}}(\lambda f) = S^{\mathbf{u}}(f).$$

L'estimateur Pick-Freeze

Nous nous contentons maintenant d'étudier l'indice $S^{\mathbf{u}}(f)$, d'en donner un estimateur par la méthode Pick-Freeze puis d'étudier les propriétés de cet estimateur. Soit $Y^{\mathbf{u}} = f(X_{\mathbf{u}}, X'_{\sim \mathbf{u}})$ où $X'_{\sim \mathbf{u}}$ est une copie indépendante $X_{\sim \mathbf{u}}$ et toujours indépendante de $X_{\mathbf{u}}$. Soit N un entier. On prend N copies indépendantes Y_1, \dots, Y_N (resp. $Y_1^{\mathbf{u}}, \dots, Y_N^{\mathbf{u}}$) de Y (resp. $Y^{\mathbf{u}}$). Pour $l = 1, \dots, k$, et $i = 1, \dots, N$, on note $Y_{i,l}$ (resp. $Y_{i,l}^{\mathbf{u}}$) la $i^{\text{ème}}$ coordonnée de Y_i (resp. $Y_i^{\mathbf{u}}$). On estime alors $S^{\mathbf{u}}(f)$ par

$$S_{\mathbf{u},N} = \frac{\sum_{l=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_{i,l} Y_{i,l}^{\mathbf{u}} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l} + Y_{i,l}^{\mathbf{u}}}{2} \right)^2 \right)}{\sum_{l=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l}^2 + (Y_{i,l}^{\mathbf{u}})^2}{2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l} + Y_{i,l}^{\mathbf{u}}}{2} \right)^2 \right)}. \quad (2.72)$$

Remarque 2.4.2. Cet estimateur n'est autre que

$$S_{\mathbf{u},N} = \frac{\text{Tr}(C_{\mathbf{u},N})}{\text{Tr}(\Sigma_N)} \quad (2.73)$$

où $C_{\mathbf{u},N}$ et Σ_N sont les estimateurs empiriques de $C_{\mathbf{u}} = \text{Cov}(Y, Y^{\mathbf{u}})$ et de $\Sigma = \text{Var}(Y)$ définis par

$$C_{\mathbf{u},N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i^{\mathbf{u}} Y_i^t - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}}{2} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}}{2} \right)^t$$

et

$$\Sigma_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i Y_i^t + Y_i^{\mathbf{u}} (Y_i^{\mathbf{u}})^t}{2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}}{2} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}}{2} \right)^t.$$

Comme dans le cas des sorties réelles, nous avons montré la consistance, la normalité asymptotique ainsi que l'efficacité asymptotique de cet estimateur.

Proposition 2.4.3 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108], Consistance, TCL, Efficacité). *1. $S_{\mathbf{u},N}$ converge presque sûrement vers $S^{\mathbf{u}}(f)$ lorsque $N \rightarrow +\infty$.*

2. Si de plus, pour tout $l = 1, \dots, k$, $\mathbb{E}(Y_l^4) < \infty$ et si

$$U_l = (Y_{1,l} - \mathbb{E}(Y_l))(Y_{1,l}^{\mathbf{u}} - \mathbb{E}(Y_l^{\mathbf{u}})), \quad V_l = (Y_{1,l} - \mathbb{E}(Y_l))^2 + (Y_{1,l}^{\mathbf{u}} - \mathbb{E}(Y_l^{\mathbf{u}}))^2.$$

Alors

$$\sqrt{N} (S_{\mathbf{u},N} - S^{\mathbf{u}}(f)) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma^2) \quad (2.74)$$

où

$$\sigma^2 = a^2 \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(U_l, U_{l'}) + b^2 \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(V_l, V_{l'}) + 2ab \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(U_l, V_{l'}),$$

avec

$$a = \frac{1}{\sum_{l=1}^k \text{Var}(Y_l)}, \quad b = -\frac{a}{2} S^{\mathbf{u}}(f).$$

3. Si $\mathbb{E}(Y_l^4) < \infty$ pour tout $l = 1, \dots, k$, alors $(S_{\mathbf{u},N})_N$ est asymptotiquement efficace pour estimer $S^{\mathbf{u}}(f)$.

Cas des sorties fonctionnelles

Dans de nombreuses applications, la sortie du code Y est une fonction. Nous allons donc étendre nos indices (sous certaines hypothèses) aux cas des sorties fonctionnelles.

Soit \mathbb{H} un espace de Hilbert séparable muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de la norme $\|\cdot\|$. Soit f une fonction à valeurs dans \mathbb{H} , ainsi Y et $Y^{\mathbf{u}}$ sont des variables aléatoires à valeurs dans \mathbb{H} . On suppose que $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$. Nous rappelons que $\mathbb{E}(Y)$ est défini par dualité comme l'unique élément $t \in \mathbb{H}$ vérifiant

$$\mathbb{E}(\langle h, Y \rangle) = \langle h, t \rangle \quad \text{pour tout } h \in \mathbb{H}.$$

Dans toute cette section, on suppose le code centré ($\mathbb{E}(Y) = 0$).

L'opérateur de covariance associé à Y est l'endomorphisme Γ sur \mathbb{H} défini, pour tout $h \in \mathbb{H}$ par $\Gamma(h) = \mathbb{E}(\langle Y, h \rangle Y)$. Comme $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$, Γ est un opérateur à trace. On peut maintenant généraliser au cas des sorties fonctionnelles, la définition de $S^{\mathbf{u}}(f)$ introduite précédemment.

Définition 2.4.2. $S^{\mathbf{u},\infty}(f) = \frac{\text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}})}{\text{Tr}(\Gamma)}$, où $\Gamma_{\mathbf{u}}$ est l'endomorphisme sur \mathbb{H} défini par $\Gamma_{\mathbf{u}}(h) = \mathbb{E}(\langle Y^{\mathbf{u}}, h \rangle Y)$ pour tout $h \in \mathbb{H}$.

La décomposition polaire des traces de Γ et de $\Gamma_{\mathbf{u}}$ va permettre de construire des estimateurs empiriques de $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$.

Lemme 2.4.2 (Décomposition polaire). *On a*

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\Gamma) &= \mathbb{E}(\|Y\|^2) - \|\mathbb{E}(Y)\|^2, \\ \text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}}) &= \frac{1}{4} \left[\mathbb{E}(\|Y + Y^{\mathbf{u}}\|^2) - \mathbb{E}(\|Y - Y^{\mathbf{u}}\|^2) - 4\|\mathbb{E}(Y)\|^2 \right]. \end{aligned}$$

Soit $(\varphi_l)_{1 \leq l}$ une base orthonormée de \mathbb{H} . Alors

$$\|Y\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \langle Y, \varphi_i \rangle^2.$$

Il est classique, lorsque l'on traite de données fonctionnelles de décomposer le processus sur une base. Cependant dans de nombreux cas, la base ne peut pas être choisie librement. Par exemple on considère la base de Karhunen-Loève qui diagonalise l'opérateur de covariance (l'intérêt de la méthode présentée ici réside dans le fait que l'utilisateur peut choisir librement une base, il n'est donc pas obligé d'utiliser une base qu'il ne connaît pas forcément!!).

Maintenant, afin d'estimer $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$ (et donc d'estimer au préalable $\text{Tr}(\Gamma)$ et $\text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}})$), on tronque la somme précédente

$$\|Y\|_m^2 = \sum_{i=1}^m \langle Y, \varphi_i \rangle^2.$$

Estimation de $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$

On considère l'estimateur de $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$:

$$S_{\mathbf{u},m,N} = \frac{\frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N (\|Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2 - \|Y_i - Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2 - \|\bar{Y} + \bar{Y}^{\mathbf{u}}\|_m^2)}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|Y_i\|_m^2 + \|Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2}{2} - \left\| \frac{\bar{Y} + \bar{Y}^{\mathbf{u}}}{2} \right\|_m^2 \right)}.$$

Théorème 2.4.6 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). *Supposons qu'il existe $\delta > 1$ tel que*

$$v_l = \mathbb{E}(\langle Y, \varphi_l \rangle^2) = O(l^{-(\delta+1)}) \quad (2.75)$$

et $\delta' > 1$ tel que

$$\mathbb{E}(\langle Y, \phi_l \rangle^4) = O(l^{-\delta'}), \quad (2.76)$$

alors pour tout $m = m(N)$ vérifiant

$$\frac{m(N)}{N^{\frac{1}{2\delta}}} \rightarrow +\infty, \quad \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \rightarrow 0, \quad (2.77)$$

on a

$$\sqrt{N}(S_{\mathbf{u}, m, N} - S^{\mathbf{u}}(f)) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (2.78)$$

où σ^2 dépend uniquement des moments des variables définissant $S_{\mathbf{u}, m, N}$.

2.4.6 Indices basés sur la distance de Cramér-von Mises

Les indices de Sobol présentés dans les sections précédentes sont basés sur une décomposition de la variance. Ils ne sont donc *a priori* efficaces que pour quantifier l'importance des variables d'entrée par rapport au comportement moyen du modèle.

Afin de motiver la nécessité d'avoir d'autres indices, considérons le modèle suivant. Soient X_1 et X_2 deux variables aléatoires indépendantes ayant les mêmes moments d'ordre 1 et d'ordre 2 mais telles que $\mathbb{E}[X_1^3] \neq \mathbb{E}[X_2^3]$. Supposons que

$$Y = X_1 + X_2 + X_1^2 X_2^2.$$

Alors

$$\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_1]) = \text{Var}(X_1 + X_1^2) = \text{Var}(X_2 + X_2^2) = \text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_2]).$$

Cependant, comme Y est une fonction symétrique en X_1, X_2 et comme X_1 et X_2 n'ont pas la même distribution, les deux variables X_1 et X_2 ne devraient pas avoir la même importance. Il semble donc important de considérer des indices de sensibilité qui prennent en compte non seulement les moments d'ordre 2 mais aussi toute la distribution.

Par ailleurs, de façon intuitive, ce ne sont pas nécessairement les mêmes variables d'entrée qui influent par exemple sur le comportement moyen de la fonction ou sur le comportement d'un quantile extrême. Ainsi, l'indice doit être construit en fonction de la quantité que l'on souhaite étudier.

Il y a plusieurs façons de généraliser les indices de Sobol : on peut par exemple définir de nouveaux indices à l'aide de fonctions de contraste basées sur la quantité d'intérêt, cette approche sera étudiée dans la section suivante qui résume les résultats de [102]. Comme nous le verrons, l'estimation de ces indices est coûteuse. Dans [247], l'auteur présente une manière de définir des indices à l'aide de distances de dissimilarité. Ces mesures unifient dans un même cadre, des indices de sensibilité déjà existant. Malheureusement leurs estimations sont basées sur l'estimation d'un rapport de densités qui peut s'avérer une opération coûteuse. Borgonovo et al. [43, 44, 45] introduisent et étudient des indices basés sur la distance en variation totale. Alors que Owen et al. [188, 189] suggèrent d'utiliser des procédures basées sur des moments d'ordre plus élevé. Nous allons dans cette section suivre ces deux pistes. Nous allons dans un premier temps revisiter les travaux d'Owen et al. afin d'étudier les propriétés asymptotiques des estimateurs Pick-Freeze généralisés qui y sont introduits. Dans un second temps, nous allons proposer un indice naturel basé sur la distance de Cramér-von Mises entre la distribution de la sortie Y et la distribution de la loi conditionnelle de Y lorsque certaines entrées sont fixées. Nous verrons que, chose surprenante ces indices peuvent une fois encore s'estimer par la méthode Pick-Freeze et la taille de l'échantillon requise pour l'estimation est du même ordre de grandeur que pour l'estimation des indices de Sobol.

Méthode Pick-Freeze d'ordre p

En utilisant, la décomposition de Hoeffding pour un singleton $v \in I_d := \{1, \dots, d\}$, le numérateur de l'indice de Sobol par rapport à l'entrée numéro v est donnée par

$$H_v^2 = \mathbb{E} \left[(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^2 \right]. \quad (2.79)$$

Suivant les idées présentées dans [188] et dans [189], on généralise cette quantité en considérant des moments d'ordre supérieur. Pour tout entier $p \geq 2$, on pose

$$H_v^p := \mathbb{E}[(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^p]. \quad (2.80)$$

Soit X^v le vecteur aléatoire tel que $X_v^v = X_v$ et $X_i^v = X_i'$ si $i \neq v$ où X_i' est une copie indépendante X_i . On pose alors

$$Y^v := f(X^v). \quad (2.81)$$

Le lemme qui suit donne la représentation Pick-Freeze de H_v^p pour $p \geq 2$.

Lemme 2.4.3. *Pour tout $v \in I_d$, on a*

$$\mathbb{E}[(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^p] = \mathbb{E}\left[\prod_{i=1}^p (Y^{v,i} - \mathbb{E}[Y])\right]. \quad (2.82)$$

Ici, $Y^{v,1} = Y$ et pour $i = 2, \dots, p$, $Y^{v,i}$ est construit indépendamment comme Y^v défini par l'équation (2.81).

Estimation On commence par développer le produit³ apparaissant dans (2.82). On obtient alors

$$H_v^p = \sum_{l=0}^p \binom{p}{l} (-1)^{p-l} \mathbb{E}[Y]^{p-l} \mathbb{E}\left[\prod_{i=1}^l Y^{v,i}\right].$$

Ensuite, on utilise un schéma d'estimation de Monte-Carlo Pick-Freeze en considérant l'échantillon de taille $p \times N$ suivant

$$\left(Y_j^{v,i}\right)_{(i,j) \in I_p \times I_N}.$$

On définit pour tous $N \in \mathbb{N}^*$, $j \in I_N$ et $l \in I_p$,

$$P_{l,j}^v = \binom{p}{l}^{-1} \sum_{k_1 < \dots < k_l \in I_p} \left(\prod_{i=1}^l Y_j^{v,k_i}\right) \quad \text{et} \quad \bar{P}_l^v = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N P_{l,j}^v.$$

L'estimateur est alors

$$H_{p,N}^v = \sum_{l=0}^p \binom{p}{l} (-1)^{p-l} (\bar{P}_1^v)^{p-l} \bar{P}_l^v. \quad (2.83)$$

Les propriétés asymptotiques de cet estimateur sont résumées dans le théorème qui suit.

Théorème 2.4.7 (Gamboa, Klein, Lagnoux [110]). $H_{p,N}^v$ est fortement consistant et asymptotiquement normal :

$$\sqrt{N} (H_{p,N}^v - H_p^v) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (2.84)$$

où

$$\sigma^2 = p [\text{Var}(Y) + (p-1)\text{Cov}(Y, Y^{v,2})] \left(\sum_{l=1}^p a_l b_l\right)^2, \quad a_l = \frac{l}{p} \mathbb{E}[Y]^{l-1}, \quad l = 1, \dots, p$$

3. $\prod_{i=1}^0 Y^{v,i} = 1$

$$b_1 = (-1)^{p-1} p(p-1) \mathbb{E}[Y]^{p-1} + \sum_{l=2}^{p-1} \binom{p}{l} (-1)^{p-l} (p-l) \mathbb{E}[Y]^{p-l-1} \mathbb{E} \left[\prod_{i=1}^l Y^{v,i} \right]$$

et

$$b_l = \binom{p}{l} (-1)^{p-l} \mathbb{E}[Y]^{p-l}, \quad l = 1, \dots, p.$$

La collection de tous les indices H_v^p fournit beaucoup plus d'information que l'indice de Sobol classique. Néanmoins, elle présente plusieurs désavantages. D'une part, les indices peuvent être négatifs si p est impair. On pourrait contrer ce point en considérant $\mathbb{E} [|\mathbb{E}[Y|X_i, i \in v] - \mathbb{E}[Y]|^p]$, mais dans ce cas, on ne pourrait plus appliquer la méthode Pick-Freeze pour les estimer. D'autre part, la procédure d'estimation requiert $K \times N$ appels au code si l'on veut estimer les K premiers indices.

Indices basés sur la distance de Cramér-von Mises

Dans cette section, nous notons $Z = f(X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^k$ la sortie du code numérique. Soit F la fonction de répartition de Z définie pour tout $t = (t_1, \dots, t_k) \in \mathbb{R}^k$ par

$$F(t) = \mathbb{P}(Z \leq t) = \mathbb{E} [\mathbb{1}_{\{Z \leq t\}}]$$

et $F^v(t)$ la fonction de répartition de la loi conditionnelle de Z sachant X_v :

$$F^v(t) = \mathbb{P}(Z \leq t | X_v) = \mathbb{E} [\mathbb{1}_{\{Z \leq t\}} | X_v].$$

La notation $\{Z \leq t\}$ signifie que $\{Z_1 \leq t_1, \dots, Z_k \leq t_k\}$. On a évidemment $\mathbb{E}[F^v(t)] = F(t)$. Nous appliquons la méthode développée dans le paragraphe précédent avec $Y(t) = \mathbb{1}_{\{Z \leq t\}}$ et $p = 2$. Ainsi, pour un $t \in \mathbb{R}^k$ fixé, nous possédons une procédure d'estimation consistante et asymptotiquement gaussienne pour estimer

$$\mathbb{E} \left[(F(t) - F^v(t))^2 \right].$$

Nous définissons maintenant une distance du type Cramér-von Mises d'ordre 2 entre $\mathcal{L}(Z)$ et $\mathcal{L}(Z|X_v)$ par

$$D_{2,CVM}^v := \int_{\mathbb{R}^k} \mathbb{E} \left[(F(t) - F^v(t))^2 \right] dF(t). \quad (2.85)$$

L'objectif est maintenant d'estimer $D_{2,CVM}^v$ puis d'étudier les propriétés asymptotiques de l'estimateur. Notons que

$$D_{2,CVM}^v = \mathbb{E} \left[\mathbb{E} \left[(F(Z) - F^v(Z))^2 \right] \right]. \quad (2.86)$$

Remarque 2.4.3. Contrairement aux indices de Sobol classiques, nous n'avons pas renormalisé la généralisation. En effet, le terme de renormalisation serait $F(t)(1 - F(t))$ (terme apparaissant par exemple dans la statistique d'Anderson-Darling) qui tend vers 0 pour les petites et les grandes valeurs de t . Cela rendrait numériquement instable la procédure d'estimation.

Proposition 2.4.4 (Gamboa, Klein, Lagnoux [110]). *Les propriétés suivantes sont satisfaites.*

1. $0 \leq D_{2,CVM}^v \leq \frac{1}{4}$, si de plus $k = 1$ et F est continue, on a $0 \leq D_{2,CVM}^v \leq \frac{1}{6}$.
2. $D_{2,CVM}^v$ est invariant par translation et homothétie de Y .

On estime alors notre indice $D_{2,CVM}^v$ par une double procédure de Monte-Carlo, en procédant comme suit. On se donne

1. deux N -échantillons de Z : $(Z_j^{v,1}, Z_j^{v,2})$, $1 \leq j \leq N$;
2. un troisième N -échantillon Z indépendant de $(Z_j^{v,1}, Z_j^{v,2})_{1 \leq j \leq N}$: W_k , $1 \leq k \leq N$.

L'estimateur empirique $D_{2,CVM}^v$ est donné par

$$\widehat{D}_{2,CVM}^v = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,1} \leq W_k\}} \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,2} \leq W_k\}} - \left[\frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N \left(\mathbb{1}_{\{Z_j^{v,1} \leq W_k\}} + \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,2} \leq W_k\}} \right) \right]^2 \right\}.$$

On peut alors montrer que

Corollaire 2.4.1. $\widehat{D}_{2,CVM}^v$ est fortement consistant lorsque N tend vers l'infini.

La normalité asymptotique découle de la Delta méthode fonctionnelle. Afin de montrer le théorème de normalité asymptotique, on commence par établir un théorème de type Donsker pour les mesures empiriques sous-jacentes. Puis on applique la delta méthode fonctionnelle (pour plus de détails sur la delta méthode fonctionnelle, nous renvoyons à l'ouvrage de Van der Vaart [244], plus particulièrement Theorems 20.8 et 20.9, Lemma 20.10 et Exemple 20.11).

Théorème 2.4.8 (Gamboa, Klein, Lagnoux [110]). *La suite d'estimateurs $\widehat{D}_{2,CVM}^v$ est asymptotiquement gaussienne. Plus précisément, $\sqrt{N} \left(\widehat{D}_{2,CVM}^v - D_{2,CVM}^v \right)$ converge faiblement vers une gaussienne centrée de variance ξ^2 (sa valeur explicite est donnée dans la preuve du Theorem 3.5 de [110]).*

2.4.7 Une méthode générale pour construire des indices bien adaptés

Généralisation des indices de Sobol

Nous avons étudié dans les paragraphes précédents les propriétés des estimateurs des indices de Sobol. Nous avons aussi proposé des généralisations de ces indices, d'une part pour des sorties vectorielles et d'autre part en construisant des indices prenant en compte l'ensemble de la distribution de la sortie Y et non plus seulement sa variance.

Comme, nous l'avons déjà mentionné dans la section précédente, les indices de Sobol ne permettent pas de détecter systématiquement les variables importantes. De plus, il est assez intuitif qu'une variable importante pour le comportement moyen de Y ne l'est pas forcément pour ses comportements extrêmes. Il semble donc naturel d'essayer d'introduire des indices de sensibilité qui prennent en compte l'objectif de l'étude (comportement moyen, extrême...).

Nous allons repartir des indices de Sobol que nous allons regarder sous un autre angle. Ceci va nous permettre de présenter une stratégie générale de construction d'indices bien adaptés à la quantité d'intérêt. Le cadre reste le même : on se donne un modèle $Y = h(X_1, \dots, X_d)$ et l'indice de Sobol par rapport à la variable numéro i est défini par

$$S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_i])}{\text{Var}(Y)}, \quad (2.87)$$

que nous écrivons sous la forme

$$S_i = \frac{\text{Var}(Y) - \mathbb{E}(\text{Var}[Y|X_i])}{\text{Var}(Y)}. \quad (2.88)$$

La formule (2.87) est la plus populaire. C'est celle utilisée par les personnes travaillant dans le domaine de l'analyse des incertitudes (voir par exemple [231, 220, 221, 223]). Nous allons plutôt tenter d'étendre astucieusement la formule (2.88). Cela va permettre de définir des indices reliés à l'étude (ou à l'estimation) de certaines quantités statistiques. Il est bien connu que la moyenne $\mathbb{E}(Y)$ est le minimiseur de la fonctionnelle quadratique $\theta \mapsto \mathbb{E}(Y - \theta)^2$ (nous appellerons par la suite cette fonction *une fonction de contraste*). De plus la valeur de ce minimum est la variance de Y . Conditionnons maintenant par rapport à la variable X_i : alors $\mathbb{E}(Y|X_i)$ est le minimiseur de la fonction $\mathbb{E}((Y - \theta)^2|X_i)$ et la valeur de ce minimum n'est autre que $\text{Var}[Y|X_i]$. Ainsi S_i compare la valeur optimale de la fonction $\mathbb{E}(Y - \theta)^2$ avec la valeur optimale moyenne de la fonction conditionnelle $\mathbb{E}((Y - \theta)^2|X_i)$. Cette remarque est le point de départ de la définition de nouveaux indices associés à un contraste donné.

La notion de fonction de contraste

Définition 2.4.3. Soit Θ un ensemble et Q une mesure de probabilité sur un espace \mathcal{Y} . Une (Θ, Q) -fonction de contraste ou plus simplement une fonction de contraste est définie comme une application ψ

$$\begin{aligned} \psi : \Theta &\longrightarrow L_1(Q) \\ \theta &\longmapsto \psi(\cdot, \theta) : y \in \mathcal{Y} \longmapsto \Psi(\rho, y), \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$\text{telle que } \theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta) \quad (2.90)$$

est *unique*. La fonction $\Psi : \theta \mapsto \mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta)$ est la *fonction de contraste moyenne*, où par abus de langage la fonction de contraste lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté.

Les fonctions de contraste sont des objets classiques en apprentissage statistique. Elles permettent de construire des estimateurs de $\theta^* \in \Theta$ en considérant $\hat{\theta} = \operatorname{Argmin}_{\theta} \Psi_N(\theta)$ où $\Psi_N := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi(Y_i; \theta)$ est l'analogie empirique de $\mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta)$ lorsque l'on dispose d'un N échantillon (Y_1, \dots, Y_N) distribué comme Y . Considérons pour fixer les idées le contraste $\psi : (y; \theta) \mapsto (y - \theta)^2$, il conduit à la procédure classique d'estimation de la moyenne

$$\hat{\theta} = \operatorname{Argmin}_{\theta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \theta)^2.$$

Ce qui donne

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i.$$

Dans notre contexte, nous n'allons pas utiliser la notion de contraste pour estimer une quantité dépendant de Y (ou de sa loi) mais plutôt pour définir de nouveaux indices.

Une liste non exhaustive de contrastes

Avant d'entrer dans le vif du sujet, nous commençons par donner un petit catalogue de contrastes et des quantités statistiques qui leur sont reliées.

1. Paramètres centraux : la moyenne est naturellement reliée au contraste $\Psi(\theta) = \mathbb{E}|Y - \theta|^2$, quant à la médiane, elle est reliée au contraste $\Psi(\theta) = \frac{1}{2} \mathbb{E}|Y - \theta|$.
2. Le contraste pour l'excès de probabilité est $\Psi(\theta) = \mathbb{E}|\mathbf{1}_{Y \geq t} - \theta|^2$. Celui pour la queue de la distribution est $\Psi(\theta) = \int_{t_0}^{\infty} \mathbb{E}|\mathbf{1}_{Y \geq t} - \theta(t)|^2 dt$.
3. Le quantile d'ordre α : $\Psi(\theta) = \mathbb{E}(Y - \theta)(\alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta})$.
4. La queue quantile : $\Psi(\theta) = \int_{\alpha_0}^1 \mathbb{E}(Y - \theta(\alpha))(\alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta(\alpha)}) d\alpha$.

Sensibilité par rapport à un contraste

On s'intéresse à la sensibilité d'une sortie réelle Y à une entrée X_k . On se donne un contraste Ψ

$$\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$$

associé à un paramètre θ^* , où $\theta^* = \operatorname{Argmin} \Psi(\theta)$.

Définition 2.4.4. Soit $\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$ un contraste. La variation du contraste due à X_k est définie par $V_k = \min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E}(\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k))$. Si $\theta^* = \operatorname{Argmin}_{\theta} \Psi(\theta)$ et $\theta_k(x) = \operatorname{Argmin}_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k = x)$ alors V_k devient

$$V_k = \mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k))). \quad (2.91)$$

V_k est évidemment positif car $\mathbb{E}(\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k)) \leq \min_{\theta} \mathbb{E}(\mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k)) = \Psi(\theta)$. De plus, si Y ne dépend pas de X_k alors $V_k = 0$ et à l'inverse si $Y = h(X_k)$ alors V_k est maximum. Dans toute la suite, on supposera que l'hypothèse suivante est vérifiée.

Hypothèse 2.4.1. $\mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta) \in \mathbb{R}$.

On est maintenant en mesure de définir de nouveaux indices basés sur des contrastes vérifiant l'hypothèse 2.4.1 et généralisant les indices de Sobol.

Définition 2.4.5. ψ -Indices. Supposons que le contraste $\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$ vérifie l'hypothèse 2.4.1. Le ψ -indice de la variable $Y = h(X_1, \dots, X_d)$ par rapport au contraste Ψ et à la variable X_k est défini par

$$S_{\psi}^k = \frac{V_k}{\min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta)} = \frac{\mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k)))}{\Psi(\theta^*) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta)}. \quad (2.92)$$

Quelques remarques sur cet indice

1. Si Y ne dépend pas de X_k , alors $S_{\psi}^k = 0$. De plus si les variables (X_1, \dots, X_d) sont indépendantes (hypothèse classiquement faite lorsque l'on considère les indices de Sobol via la décomposition de Hoeffding) et si $Y = h(X_k)$ alors $S_{\psi}^k = 1$ et les autres indices $S_{\psi}^l, l \neq k$ valent 0. Nous avons toujours $S_{\psi}^k \in [0, 1]$.
2. Comme mentionné précédemment (on a tout fait pour), lorsque l'on considère le contraste de la moyenne $\psi : (y; \theta) \mapsto (y - \theta)^2$, on retrouve exactement les indices de Sobol. En effet, dans ce cas on a

$$\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \Psi(\theta) = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E}(Y - \theta)^2 = \mathbb{E}(Y)$$

et $\theta_k(x) = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k = x) = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E}(Y - \theta)^2 | X_k = x) = \mathbb{E}(Y | X_k = x)$. Ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k))) &= \mathbb{E}_{(X_k, Y)} ((Y - \mathbb{E}Y)^2 - (Y - \mathbb{E}(Y | X_k))^2) \\ &= \operatorname{Var}(Y) - \mathbb{E}_{X_k} \mathbb{E} [(Y - \mathbb{E}(Y | X_k))^2 | X_k] \\ &= \operatorname{Var}(Y) - \mathbb{E}_{X_k} \operatorname{Var}(Y | X_k) = \operatorname{Var}(\mathbb{E}(Y | X_k)) \end{aligned}$$

et $\min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta) = \Psi(\theta^*) - 0 = \operatorname{Var}(Y)$. Le ψ -indice obtenu est $S_{\psi}^k = \frac{\operatorname{Var}(\mathbb{E}(Y | X_k))}{\operatorname{Var}(Y)}$, qui est exactement l'indice de Sobol d'ordre un défini par l'Equation (2.87).

2.5 Les chantiers à venir....

Deux articles ont joué un rôle important dans mes travaux de recherche l'article de Svante Janson [138] et celui de Agueh et Carlier [2], ils ont été tous les deux des points de départ.

2.5.1 A partir du travail de Janson

Le travail de Janson a initié mes travaux sur les grandes déviations. Dans un premier travail avec Clémentine et Fabrice [111], nous avons établi un principe de grandes déviations sous l'hypothèse d'existence d'une transformée de Laplace, puis dans un second avec Agnès et Pierre [149], nous avons établi des résultats de grandes déviations pour le modèle du hachage avec essais linéaires. Nous avons commencé par traiter le modèle du hachage car c'était le seul exemple présenté par Janson pour lequel la transformée de Laplace n'existait pas et donc les résultats obtenus avec Clémentine et Fabrice ne pouvaient pas s'appliquer. Le théorème obtenu avec Agnès et Pierre (Théorème 2.1.12) n'est pas complètement satisfaisant. En effet, d'une part il fait apparaître deux constantes $\alpha(\mu)$ et $\beta(\mu)$ dont on ne connaît pas les valeurs optimales. On connaît une majoration de la valeur optimale pour $\alpha(\mu)$ et une minoration pour $\beta(\mu)$. Il reste donc une question fondamentale

Quelles sont les valeurs optimales et a-t-on $\alpha(\mu) = \beta(\mu)$?

D'autre part, le modèle de hachage n'est qu'un cas très particulier de modèle ne possédant pas de transformées de Laplace. Il est donc naturel de chercher à obtenir un théorème général couvrant un large panel de modèles. La question fondamentale est la suivante

Dans les modèles ne possédant pas de transformées de Laplace, comment la dépendance entre les variables X et Y influe-t-elle sur la vitesse et la fonction de taux dans les résultats de grandes déviations ?

Avec Agnès et Pierre, nous avons comme projet de répondre à ces deux questions. Vu la difficulté mathématique des problèmes, on peut imaginer qu'une réponse complète nous demandera quelques années de travail.

2.5.2 A partir du travail de Agueh et Carlier

Le travail de Agueh et Carlier a initié mes travaux autour de l'espace de Wasserstein. Un premier travail avec Jérémie [37] dans lequel nous nous sommes intéressés à l'existence et à la caractérisation de barycentres dans l'espace de Wasserstein et un second avec Alfredo, Jérémie et Raül [36] dans lequel nous avons défini une notion d'analyse en composantes principales dans l'espace de Wasserstein. Le premier travail soulève de nombreuses questions, comme par exemple comment se passer de l'hypothèse de compacité. Il ouvre aussi certaines perspectives. On peut se demander, comment on peut utiliser la distance de Wasserstein pour construire de nouveaux indices de sensibilité et surtout comment on peut estimer intelligemment ces indices ? L'étape préliminaire est comment estimer efficacement une distance de Wasserstein et comment montrer que cet estimateur est asymptotiquement normal ?

Avec Philippe Berthet et Jean-Claude Fort nous sommes en train de traiter cette étape préliminaire, il restera alors à voir comment s'en servir pour définir de bons indices de sensibilité basés sur la distance de Wasserstein.

Dans le travail avec Alfredo, Jérémie et Raül nous avons supposé que l'on observait des échantillons de densité, une question naturelle est de savoir ce qui se passe lorsqu'on remplace chaque densité observée par un échantillon i.i.d. de variables aléatoires admettant cette densité de probabilité.

Chapitre 3

Inégalités de concentration - Structures discrètes et principe de grandes déviations

3.1 Autour des inégalités de concentration

Cette partie concerne les travaux effectués essentiellement pendant ma thèse dirigée par Emmanuel Rio

3.1.1 Inégalités de concentration pour le supremum de processus empiriques

On se donne une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées $(X_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ ainsi que \mathcal{F} un ensemble de fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} . On considère $Z = \sup\{f \in \mathcal{F}, S_n(f)\}$ où $S_n(f) = \sum_{i=1}^n f(X_i)$. On suppose que le supremum est bien mesurable et que $\mathbb{E}(Z)$ existe. L'objectif est pour $t > 0$ de contrôler le plus précisément possible $\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq t)$ et $\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \leq -t)$. Lorsque la classe de fonctions est réduite à une seule fonction les inégalités de Hoeffding, Bennett et de Bernstein fournissent des contrôles raisonnables. Nous rappelons ci dessous deux de ces inégalités et renvoyons aux ouvrages M. Ledoux [165] et de S. Boucheron, G. Lugosi et P. Massart [48] pour plus de détails sur les inégalités de concentrations.

Théorème 3.1.1 (Inégalité de Bennett). *Soient X_1, \dots, X_n n variables aléatoires indépendantes (non nécessairement de même loi), de variance finie et telles que pour tout indice i , $X_i \leq b$. Soit*

$$S = \sum_{i=1}^n (X_i - \mathbb{E}(X_i)) \quad \text{et} \quad v = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}(X_i^2).$$

Notons pour $u \in \mathbb{R}$, $\phi(u) = e^u - u - 1$ et pour $u \geq -1$, $h(u) = (1+u) \log(1+u) - u$. Alors

1. pour $t > 0$,

$$\psi_S(t) := \log(\mathbb{E}(e^{tS})) \leq n \log\left(1 + \frac{v}{nb^2 \phi(bt)}\right) \leq \frac{v}{b^2} \phi(bt),$$

2. et pour $x > 0$,

$$\mathbb{P}(S \geq x) \leq \exp\left(-\frac{v}{b^2} h\left(\frac{bx}{v}\right)\right).$$

Théorème 3.1.2 (Inégalité de Bernstein). *Soient X_1, \dots, X_n n variables aléatoires indépendantes (non nécessairement de même loi), pour lesquelles il existe des nombres positifs v et c vérifiant $\sum_{i=1}^n \mathbb{E}(X_i^2) \leq v$ et*

$$\sum_{i=1}^n \mathbb{E}[(X_i)_+^q] \leq \frac{q!}{2} v c^{q-2}, \quad \forall q \geq 3,$$

avec $x_+ = \max(x, 0)$. Soit $S = \sum_{i=1}^n (X_i - \mathbb{E}(X_i))$ et notons pour $u > 0$, $h_1(u) = 1 + u - \sqrt{1 + 2u}$. Alors

1. pour $0 < t < 1/c$,

$$\psi_S(t) := \log(\mathbb{E}(e^{tS})) \leq \frac{vt^2}{2(1-ct)},$$

2. et pour $x > 0$,

$$\mathbb{P}(S \geq \sqrt{2vx} + cx) \leq \exp(-x).$$

Ces inégalités découlent d'un contrôle fin de la transformée de Laplace. Dans le cas général, grâce aux inégalités de concentration pour les mesures produits, M. Talagrand [237] a obtenu des bornes exponentielles de type Bennett.

Théorème 3.1.3 (Talagrand [237]). *Soient X_1, \dots, X_n des variables aléatoires indépendantes à valeurs dans \mathbb{R} et \mathcal{F} un ensemble de fonctions de \mathbb{R} dans $[-1, 1]$. Alors si $Z = \sup\{f \in \mathcal{F}, S_n(f)\}$, on a pour tout $t > 0$,*

$$\log \mathbb{E}(\exp(tZ)) \leq t\mathbb{E}(Z) + Vab^{-2}(e^{bt} - bt - 1), \quad (3.1)$$

où $V = \mathbb{E}\left(\sup_{s \in \mathcal{F}} \sum_{k=1}^n (s^k(X_k))^2\right)$.

Ce résultat de Talagrand a soulevé les questions suivantes :

1. Peut-on remplacer V par la variance maximale

$$V_n = \sup_{s \in \mathcal{F}} \text{Var}(S_n(s)) ? \quad (3.2)$$

2. Quelles sont les valeurs optimales pour a et b ?
3. Que se passe-t-il pour des valeurs négatives de t ?

En appliquant les inégalités de comparaison dues à Ledoux et Talagrand [166], on peut montrer que $V_n \leq V \leq V_n + 16\mathbb{E}(Z)$ (Massart [176], p. 882). Ainsi le terme de variance V dans le résultat de Talagrand est souvent proche de la variance maximale V_n .

La conjecture concernant les constantes est $a = b = 1$. En 1997, Ledoux [164] a utilisé une méthode à la log-Sobolev ainsi qu'un joli argument de tensorisation de l'entropie pour réobtenir les inégalités de Talagrand. En appliquant la méthode de Ledoux, Massart [176] a montré que les inégalités de Talagrand étaient valides avec $a = 8$ et V comme facteur variance ou avec $a = 4$ et $V_n + 16\mathbb{E}(Z)$ comme facteur variance. En 2002 Rio (2002) a prouvé les inégalités pour des variables aléatoires i.i.d. avec $a = 1$, $b = 3/2$ et le facteur variance $v = V_n + 2\mathbb{E}(Z)$. Puis, toujours pour des variables aléatoires i.i.d. Bousquet [50] a obtenu (3.1) avec $a = b = 1$ et le facteur v .

Si l'on regarde attentivement le résultat de Talagrand, le contrôle de la transformée de Laplace n'est obtenu que pour des valeurs de t positives. Cependant si l'on désire avoir des inégalités de déviation à gauche, il est nécessaire d'avoir des contrôles pour des valeurs négatives de t .

Un de mes résultats a consisté à obtenir des inégalités de type "Talagrand pour les déviations à gauche". En effet, le contrôle de la transformée de Laplace obtenu dans le Théorème 3.1.4 montre que l'on peut obtenir ces inégalités avec $a = 1$, $b = 4$ et le même facteur v .

Théorème 3.1.4 (Klein [147]). *Soient \mathcal{X} un espace polonais muni de sa tribu borélienne et $(X_i)_{i=1, \dots, n}$ une suite de variables aléatoires i.i.d. de loi P à valeurs dans \mathcal{X} . Soit \mathcal{F} une classe dénombrable de fonctions mesurables de \mathcal{X} dans $]-\infty, 1]$ telle que $\forall f \in \mathcal{F}, \mathbb{E}(f(X)) = 0$ et $\sup_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}(f(X)^2) \leq \sigma^2 < \infty$. Soit*

$$Z = \sup_{f \in \mathcal{F}} \{S_n(f) = f(X_1) + \dots + f(X_n)\}$$

1. Si les fonctions sont à valeurs dans $[-1, 1]$, alors pour tout $x > 0$

$$\mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{v_n}{16} h\left(\frac{4x}{v_n}\right)\right), \quad (3.3)$$

avec $v_n = n\sigma^2 + 2\mathbb{E}(Z)$ et $h(x) = (1+x)\log(1+x) - x$

2. Si pour tout $f \in \mathcal{F}$ et tout $p \geq 2$, $|\mathbb{E}(f^p(X_i))| \leq \frac{\sigma^2 p!}{2}$ alors

$$\forall t \in [0, 1], L(t) \leq -te^{-t}\mathbb{E}(Z) + \frac{n\sigma^2 t^2(1+2t)}{2(1-t)}, \quad (3.4)$$

et donc

$$\mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-x(u-v)^2\left(1 - 2\frac{v(u-v)}{u^2}\right)\right), \quad (3.5)$$

où $L(t)$ est la log-Laplace de $-Z$, $u = \sqrt{x + v_n/2}$ et $v = \sqrt{v_n/2}$.

Par la suite, nous avons obtenu avec Emmanuel des inégalités de déviations à gauche et à droite avec des constantes quasi-optimales dans le cas où les variables sont seulement supposées indépendantes.

Théorème 3.1.5 (Klein, Rio [151]). Soit (X_1, \dots, X_n) une suite de variables aléatoires indépendantes à valeurs dans un espace polonais \mathcal{X} . Soit \mathcal{F} une classe dénombrable de fonctions mesurables de \mathcal{X} à valeurs dans $[-1, 1]^n$. On suppose que $\mathbb{E}(s^k(X_k)) = 0$ pour tout $s = (s^1, \dots, s^n)$ dans \mathcal{S} et tout entier k dans $[1, n]$. On pose $S_n(s) = s^1(X_1) + \dots + s^n(X_n)$ et $Z = \sup\{S_n(s) : s \in \mathcal{S}\}$.

Soit L le logarithme de la transformée de Laplace de Z . Alors pour tout $t > 0$,

$$L(t) \leq t\mathbb{E}(Z) + \frac{t}{2}(2\mathbb{E}(Z) + V_n)(\exp((e^{2t} - 1)/2) - 1).$$

Par suite, si $v = 2\mathbb{E}(Z) + V_n$ et si $x > 0$, on a

$$(b) \quad \mathbb{P}(Z \geq \mathbb{E}(Z) + x) \leq \exp\left(-\frac{x}{4} \log\left(1 + 2 \log(1 + x/v)\right)\right)$$

et

$$(c) \quad \mathbb{P}(Z \geq \mathbb{E}(Z) + x) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{v + \sqrt{v^2 + 3vx} + (3x/2)}\right) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{2v + 3x}\right).$$

Théorème 3.1.6 (Klein, Rio [151]). Sous les mêmes hypothèses que celles du Théorème 3.1.5, pour tout $t > 0$ on a

$$(a) \quad L(-t) \leq -t\mathbb{E}(Z) + \frac{v}{9}(e^{3t} - 3t - 1).$$

Par suite, pour $x > 0$,

$$(b) \quad \mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{v}{9}h\left(\frac{3x}{v}\right)\right),$$

où $h(x) = (1+x)\log(1+x) - x$, et

$$(c) \quad \mathbb{P}(Z \leq \mathbb{E}(Z) - x) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{v + \sqrt{v^2 + 2vx} + x}\right) \leq \exp\left(-\frac{x^2}{2v + 2x}\right).$$

3.1.2 Inégalités de concentration convexe

Il y a essentiellement deux points clés dans les démonstrations des inégalités de type Talagrand.

1. D'une part on utilise l'inégalité de Markov, pour tout $t > 0$

$$\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq x) \leq \exp \mathbb{E}\left(e^{t(Z - \mathbb{E}(Z))}\right) e^{-tx}.$$

Notons $\phi_t(x) = e^{tx}$ alors cette inégalité se réécrit

$$\mathbb{P}(Z - \mathbb{E}(Z) \geq x) \leq \frac{\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))}{\phi_t(x)}.$$

La borne idéale serait alors

$$\inf_{t>0} \left\{ \frac{\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))}{\phi_t(x)} \right\}. \quad (3.6)$$

Il est difficile de trouver la valeur de l'infimum, ainsi afin de poursuivre le calcul on essaie de trouver un majorant sympathique de $\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))$.

2. La majoration de $\mathbb{E}(\phi_t(Z - \mathbb{E}(Z)))$ est obtenue à l'aide d'une inégalité de tensorisation de l'entropie due à Ledoux [164].

A la vue des deux éléments clés énoncés, la motivation pour introduire des inégalités de concentration convexe est double. D'une part comme les applications $x \mapsto \phi_t(x)$ sont convexes, on peut remplacer dans (3.6) l'infimum sur les fonctions $(\phi_t)_{t>0}$ par un infimum sur toutes les fonctions convexes. On espère ainsi, obtenir des inégalités plus précises. D'autre part comme l'inégalité de tensorisation de Ledoux nécessite l'indépendance des variables $(X_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$, il semble difficile de pouvoir obtenir par cette méthode des inégalités de déviation lorsque les variables ne sont plus indépendantes.

Définition 3.1.1. Soient X et Y deux variables aléatoires, on dira que X est plus concentrée que Y au sens des fonctions convexes si

$$\mathbb{E}(\phi(X)) \leq \mathbb{E}(\phi(Y)), \quad \forall \phi \text{ convexe.} \quad (3.7)$$

Le concept d'inégalités de concentration convexe a été introduite par Hoeffding [128]. Dans ce papier Hoeffding compare $\mathbb{E}(\phi(S_n))$ avec $\mathbb{E}(\phi(S_n^*))$, où $S_n = \sum_{i=1}^n b_i$ est la somme de n variables aléatoires indépendantes de Bernoulli de paramètre p_i et S_n^* est une variable aléatoire de loi binomiale $B(n, \bar{p})$ où \bar{p} est la moyenne arithmétique des p_i . Il a montré le résultat suivant.

Proposition 3.1.1 (Hoeffding [128], Shorack-Wellner [228]). Soient $(b_i)_{1 \leq i \leq n}$ des variables aléatoires indépendantes de loi Bernoulli de paramètre p_i et $S_n = \sum_{i=1}^n b_i$. Soit $\bar{p} = \frac{\sum_{i=1}^n p_i}{n}$ alors pour toute fonction convexe ϕ , on a

$$\mathbb{E}(\phi(S_n)) \leq \mathbb{E}(\phi(B(n, \bar{p}))). \quad (3.8)$$

Remarque 3.1.1. Hoeffding [128] et Bretagnolle [53] ont remarqué qu'à partir de ce type d'inégalité, on peut en déduire des inégalités sur les queues de distribution du type

$$\mathbb{P}(S_n \geq t) \leq c \mathbb{P}(B(n, \bar{p}) \geq t).$$

Le calcul explicite d'une telle inégalité ainsi qu'une explicitation de la constante c se trouvent dans les travaux de Pinelis [196] et [195]. Grâce aux travaux de Pinelis, on se rend compte de la puissance des inégalités de concentration convexe. En effet, si X est plus concentrée que Y au sens des fonctions convexes et si l'on sait contrôler finement la queue de distribution de Y , on récupère alors un bon contrôle de la queue de distribution de X .

Inégalités de concentration convexe pour certaines familles de variables aléatoires négativement associées

La motivation principale est maintenant de s'affranchir de l'hypothèse d'indépendance des variables aléatoires b_i . Le premier résultat dans ce sens est dû à Shao [227]. Dans ce papier Shao s'intéresse aux variables aléatoires négativement associées, il montre comment les inégalités de concentration convexe peuvent conduire à des inégalités classiques comme les inégalités maximales de Rosenthal ou des inégalités de Kolmogorov.

Soit $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ un processus croissant à temps discret, avec $Z_0 = 0$ et dont les sauts valent 0 ou 1, i.e. $Z_{n+1} - Z_n = 0$ ou $Z_{n+1} - Z_n = 1$.

Définition 3.1.2. Un processus $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ satisfait une inégalité de concentration de type binomial si pour $n \in \mathbb{N}^*$ et toute fonction convexe ϕ on a

$$\mathbb{E}(\phi(Z_n)) \leq \mathbb{E}(\phi(B(n, \mathbb{E}(Z_n)/n))). \quad (3.9)$$

On suppose que le processus $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ vérifie l'hypothèse suivante.

Hypothèse 3.1.1. Pour tout n fixé, la suite

$$(\mathbb{P}(Z_{n+1} = k + 1 | Z_n = k))_{k \geq 0}$$

est décroissante.

Théorème 3.1.7 (Klein [148]). *Si le processus $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ vérifie l'hypothèse 3.1.1 alors il satisfait à une inégalité de concentration de type binomial. En d'autres termes, pour toute fonction convexe ϕ , on a*

$$\mathbb{E}(\phi(Z_n)) \leq \mathbb{E}(\phi(B(n, \mathbb{E}(Z_n)/n))). \quad (3.10)$$

La preuve de ce théorème repose sur un résultat de Shao portant sur les suites de variables aléatoires négativement associées (NA). Une famille de variables aléatoires

$\{X_i, 1 \leq i \leq n\}$ est dite négativement associée si pour toute paire de sous-ensembles disjoints A_1 et A_2 de $\{1, 2, \dots, n\}$

$$\text{Cov}\{f_1(X_i, i \in A_1), f_2(X_j, j \in A_2)\} \leq 0. \quad (3.11)$$

Dès que f_1 et f_2 sont croissantes coordonnée par coordonnée et que les covariances existent. Une famille infinie est NA si toute sous-famille finie est NA.

Théorème 3.1.8 (Shao [227]). *Soit $\{X_i, 1 \leq i \leq n\}$ une suite de variables aléatoires NA et soit $\{X_i^*, 1 \leq i \leq n\}$ une suite de variables aléatoires indépendantes vérifiant X_i et X_i^* ont la même loi pour tout $i = 1, 2, \dots, n$. Alors*

$$\mathbb{E}\left(f\left(\sum_{i=1}^n X_i\right)\right) \leq \mathbb{E}\left(f\left(\sum_{i=1}^n X_i^*\right)\right). \quad (3.12)$$

pour toute fonction convexe f , dès que l'espérance existe.

Remarque 3.1.2. La preuve du résultat de Shao n'utilise que le fait que (S_n, X_{n+1}) est NA pour tout $n \in \mathbb{N}$. De plus, l'hypothèse 3.1.1 implique que $(Z_n, Z_{n+1} - Z_n)$ est NA pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Nous présentons maintenant une jolie application du Théorème 3.1.7.

Théorème 3.1.9 (Klein [148]). *Soient $1 \geq p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_l \geq 0$ une suite décroissante de réels et $(B_i)_{1 \leq i \leq l}$ une suite de variables aléatoires indépendantes de loi $B(n, p_i)$. Soit $Z = \sup(B_1, \dots, B_l)$, alors pour toute fonction convexe ϕ , $\mathbb{E}(\phi(Z)) \leq \mathbb{E}(\phi(Y))$ où $Y \sim B(nl, \mathbb{E}(Z)/nl)$.*

La preuve de ce théorème repose sur une jolie construction dynamique de la variable Z .

Soit $(X_{i,j}, 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq l)$ des variables aléatoires de Bernoulli vérifiant $X_{i,j} \sim B(1, p_j)$. Pour $u \in \mathbb{N}$ de la forme $u = an + b$ avec $0 \geq b < n$, on définit un processus Z_u par

$$Z_u = \max(S_n(p_1), S_n(p_2), \dots, S_n(p_a), S_b(p_{a+1}))$$

où $S_m(p_j) = \sum_{j=1}^m X_{i,j} \sim B(m, p_j)$. Il est évident que $Z_{nl} = Z$ et le Théorème 3.1.9 découle du fait que les variables $(Z_u, Z_{u+1} - Z_u)$ sont négativement associées.

Cas de processus à temps continu

Nous présentons maintenant l'analogue du Théorème 3.1.7 pour des processus à temps continu. Pour cela, considérons un processus de comptage $(A_t)_{t \geq 0}$ dont le compensateur $(\Lambda_t)_t$ est absolument continu et fini sur $[0, T]$ (ce genre d'hypothèse a été introduit par Reynaud Bourret dans [209] afin d'obtenir des inégalités exponentielles pour le suprema de processus de comptage) et vérifie $\mathbb{E}(\lambda_t | A_{t-})$ est une fonction décroissante de A_{t-} , alors

$$\mathbb{E}(\phi(A_t)) \leq \mathbb{E}(\phi(Y_t))$$

pour toute fonction convexe ϕ , où Y_t est une variable aléatoire de Poisson de paramètre $\mathbb{E}(A_t)$.

Comme pour le cas des processus à temps discret, ce résultat permet d'obtenir des inégalités de concentration convexe pour le supremum de variables aléatoires de Poisson. Plus précisément, donnons-nous $\mu_1 \geq \dots \mu_p$ p réels rangés de façon décroissante. Considérons alors des variables aléatoires indépendantes de Poisson $(Y_i)_{1 \leq i \leq p}$ où $Y_i \sim \mathcal{P}(\mu_i)$ et posons $W = \sup(Y_1, \dots, Y_p)$ alors pour toute fonction convexe ϕ on a $\mathbb{E}(\phi(W)) \leq \mathbb{E}[\phi(\mathcal{P}(\mathbb{E}(W)))]$.

Cas des martingales à temps continu

Les martingales sont parmi les premières familles de variables aléatoires dépendantes que l'on étudie, il est donc naturel de voir si on est capable d'obtenir des inégalités de concentration convexe pour de telles familles. Dans ce paragraphe, nous présentons une partie des résultats obtenus avec Yutao Ma et Nicolas Privaux (voir [150] pour plus de détails). Nous allons commencer par décrire les objets étudiés.

Soit (Ω, \mathcal{F}, P) un espace de probabilité muni d'une filtration croissante $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ ainsi que d'une filtration décroissante $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$. On se donne $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ une \mathcal{F}_t -forward martingale et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ une \mathcal{F}_t^* -backward martingale. On suppose que $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est càd-làg et que $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est càg-làd. On note respectivement $(M_t^c)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(M_t^{*c})_{t \in \mathbb{R}_+}$ les parties continues de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et par

$$\Delta M_t = M_t - M_{t-}, \quad \Delta^* M_t^* = M_t^* - M_{t+}^*,$$

les sauts forward et backward. Les deux processus $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ ont pour mesure de sauts

$$\mu(dt, dx) = \sum_{s>0} 1_{\{\Delta M_s \neq 0\}} \delta_{(s, \Delta M_s)}(dt, dx),$$

et

$$\mu^*(dt, dx) = \sum_{s>0} 1_{\{\Delta^* M_s^* \neq 0\}} \delta_{(s, \Delta^* M_s^*)}(dt, dx),$$

où $\delta_{(s,x)}$ est la mesure de Dirac au point $(s, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$. On note $\nu(dt, dx)$ et $\nu^*(dt, dx)$ les $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ -les projections duales prévisibles de $\mu(dt, dx)$ et $\mu^*(dt, dx)$, i.e.

$$\int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} f(s, x)(\mu(ds, dx) - \nu(ds, dx)) \quad \text{et} \quad \int_t^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(s, x)(\mu^*(ds, dx) - \nu^*(ds, dx))$$

sont respectivement des \mathcal{F}_t -forward et \mathcal{F}_t^* -backward martingales locales pour tout processus f , resp. g suffisamment intégrable et \mathcal{F}_t -prévisible, resp. \mathcal{F}_t^* -prévisible. Ci-dessus, on a noté \int_0^t pour \int_{0-}^t et \int_t^{∞} pour \int_t^{∞} . Les variations quadratiques $([M, M])_{t \in \mathbb{R}_+}$, $([M^*, M^*])_{t \in \mathbb{R}_+}$ sont définies comme les limites pour la convergence uniforme en probabilité

$$[M, M]_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n |M_{t_i^n} - M_{t_{i-1}^n}|^2,$$

et

$$[M^*, M^*]_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} |M_{t_i^n}^* - M_{t_{i+1}^n}^*|^2,$$

pour toute suite de partitions de $[0, t]$, $\{0 = t_0^n \leq t_1^n \leq \dots \leq t_n^n = t\}$, $n \geq 1$, dont le pas tend vers 0. On pose alors, $M_t^d = M_t - M_t^c$, $M_t^{*d} = M_t^* - M_t^{*c}$,

$$[M^d, M^d]_t = \sum_{0 < s \leq t} |\Delta M_s|^2, \quad [M^{*d}, M^{*d}]_t = \sum_{0 \leq s < t} |\Delta^* M_s^*|^2,$$

et

$$\langle M^c, M^c \rangle_t = [M, M]_t - [M^d, M^d]_t, \quad \langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_t = [M^*, M^*]_t - [M^{*d}, M^{*d}]_t,$$

$t \in \mathbb{R}_+$. On peut remarquer ici que $([M, M]_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(\langle M, M \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $([M^*, M^*]_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(\langle M^*, M^* \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ sont \mathcal{F}_t -adaptés, mais que $([M^*, M^*]_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(\langle M^*, M^* \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ ne sont pas \mathcal{F}_t^* -adaptés. Les couples

$$(\nu(dt, dx), \langle M^c, M^c \rangle) \quad \text{et} \quad (\nu^*(dt, dx), \langle M^{*c}, M^{*c} \rangle)$$

sont appelés les caractéristiques locales de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et de $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$, cf. [135] pour le cas forward. On note $(\langle M^d, M^d \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(\langle M^{*d}, M^{*d} \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ les variations quadratiques conditionnelles de $(M_t^d)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(M_t^{*d})_{t \in \mathbb{R}_+}$, avec

$$d\langle M^d, M^d \rangle_t = \int_{\mathbb{R}} |x|^2 \nu(dt, dx) \quad \text{et} \quad d\langle M^{*d}, M^{*d} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}} |x|^2 \nu^*(dt, dx).$$

Les variations quadratiques $(\langle M, M \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(\langle M^*, M^* \rangle_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et de $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ vérifient

$$\langle M, M \rangle_t = \langle M^c, M^c \rangle_t + \langle M^d, M^d \rangle_t, \quad \text{et} \quad \langle M^*, M^* \rangle_t = \langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_t + \langle M^{*d}, M^{*d} \rangle_t,$$

$t \in \mathbb{R}_+$.

Nous allons regarder le cas où les caractéristiques sont de la forme suivante

$$\nu(du, dx) = \nu_u(dx)du \quad \text{et} \quad \nu^*(du, dx) = \nu_u^*(dx)du, \quad (3.13)$$

et

$$d\langle M^c, M^c \rangle_t = |H_t|^2 dt, \quad \text{et} \quad d\langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_t = |H_t^*|^2 dt, \quad (3.14)$$

où $(H_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(H_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$, sont respectivement prévisibles par rapport à $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et à $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$.

Remarque 3.1.3. Il peut paraître étrange de faire des hypothèses du style (ou de considérer ce genre de modèle)

“ $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est une \mathcal{F}_t^* -adaptée, \mathcal{F}_t -forward martingale et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est une \mathcal{F}_t -adaptée, \mathcal{F}_t^* -backward martingale”.

Cependant elles sont cruciales pour démontrer les Théorèmes 3.1.10 et 3.1.11. En effet, l'élément clé de la preuve est une formule de type formule d'Itô (voir le Théorème 3.1.12) pour des martingales forward/backward appliquée à $\phi(M_t + M_t^*)$. Cette formule nécessite de pouvoir définir des quantités comme $\int_{s^+}^t \phi'(M_u^- + M_u^*) dM_u$ et $\int_s^{t^-} \phi'(M_u + M_u^*) d^* M_u$. Ces processus ne peuvent être rigoureusement définis si l'hypothèse précédente n'est pas vérifiée.

Remarque 3.1.4. Des modèles similaires ont été considérés dans de nombreux travaux ([94, 218, 217]).

Nous pouvons enfin énoncer les résultats principaux.

Théorème 3.1.10 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient*

$$\bar{\nu}_u(dx) = x\nu_u(dx), \quad \bar{\nu}_u^*(dx) = x\nu_u^*(dx), \quad u \in \mathbb{R}_+.$$

On suppose que

- i) $\bar{\nu}_u([x, \infty)) \leq \bar{\nu}_u^*([x, \infty)) < \infty$, $x, u \in \mathbb{R}$ et
- ii) $|H_u| \leq |H_u^*|$, $dPdu - p.p.$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(M_t + M_t^*)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_s + M_s^*)], \quad 0 \leq s \leq t, \quad (3.15)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Sous des hypothèses de type L^2 on a aussi

Théorème 3.1.11 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient*

$$\tilde{\nu}_u(dx) = |x|^2 \nu_u(dx) + |H_u|^2 \delta_0(dx), \quad \tilde{\nu}_u^*(dx) = |x|^2 \nu_u^*(dx) + |H_u^*|^2 \delta_0(dx),$$

$u \in \mathbb{R}_+$ et supposons que $\tilde{\nu}_u([x, \infty)) \leq \tilde{\nu}_u^([x, \infty)) < \infty$, $\forall x \in \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}_+$. Alors on a*

$$\mathbb{E}[\phi(M_t + M_t^*)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_s + M_s^*)], \quad 0 \leq s \leq t, \quad (3.16)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que ϕ' existe et est aussi convexe.

Remarque 3.1.5. Il est utile de remarquer ici que les processus $(M_t)_{t \geq 0}$ et $(M_t^*)_{t \geq 0}$ n'ont pas besoin d'être indépendants.

Comme annoncé ci-dessus, la preuve des Théorèmes 3.1.10 et 3.1.11 est une conséquence d'une formule de type Itô qui est en soit un résultat digne d'intérêt et que nous énonçons maintenant.

Théorème 3.1.12 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soient $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus \mathcal{F}_t^* -adapté et une \mathcal{F}_t -forward martingale à trajectoire càd-làg, et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus \mathcal{F}_t -adapté et une \mathcal{F}_t^* -backward martingale à trajectoires càg-làd, dont les caractéristiques vérifient (3.13) et (3.14). Alors pour tout $f \in C^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$, on a*

$$\begin{aligned} & f(M_t, M_t^*) - f(M_0, M_0^*) \\ &= \int_{0+}^t \frac{\partial f}{\partial x_1}(M_{u-}, M_u^*) dM_u + \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(M_u, M_u^*) d\langle M^c, M^c \rangle_u \\ &+ \sum_{0 < u \leq t} \left(f(M_u, M_u^*) - f(M_{u-}, M_u^*) - \Delta M_u \frac{\partial f}{\partial x_1}(M_{u-}, M_u^*) \right) \\ &- \int_0^{t-} \frac{\partial f}{\partial x_2}(M_u, M_{u+}^*) d^* M_u^* - \frac{1}{2} \int_0^t \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(M_u, M_u^*) d\langle M^{*c}, M^{*c} \rangle_u \\ &- \sum_{0 \leq u < t} \left(f(M_u, M_u^*) - f(M_u, M_{u+}^*) - \Delta M_u^* \frac{\partial f}{\partial x_2}(M_u, M_{u+}^*) \right), \end{aligned}$$

où d^* désigne la différentielle d'Itô backward et $(M_t^c)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(M_t^{*c})_{t \in \mathbb{R}_+}$ dénotent respectivement les parties continues de $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et de $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$.

Nous allons présenter maintenant un cas particulier intéressant des résultats précédents. Pour cela, prenons les formes suivantes pour $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$

$$M_t = M_0 + \int_0^t H_s dW_s + \int_0^t J_s (dZ_s - \lambda_s ds) \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (3.17)$$

et

$$M_t^* = \int_t^{+\infty} H_s^* d^* W_s^* + \int_t^{+\infty} J_s^* (d^* Z_s^* - \lambda_s^* ds), \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (3.18)$$

où $(W_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est un mouvement Brownien standard, $(Z_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus ponctuel d'intensité $(\lambda_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(W_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un mouvement Brownien backward, $(Z_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ un processus ponctuel backward d'intensité $(\lambda_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(H_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(J_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, (resp. $(H_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(J_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$) sont prévisibles par rapport à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ (resp. $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$).

Dans ce cas, on a

$$\nu(dt, dx) = \lambda_t \delta_{J_t}(dx) dt \quad \text{et} \quad \nu^*(dt, dx) = \lambda_t^* \delta_{J_t^*}(dx) dt. \quad (3.19)$$

Corollaire 3.1.1. *Soient $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ des processus ayant pour caractéristiques (3.19) et supposons que $(M_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est \mathcal{F}_t^* -adapté et $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est \mathcal{F}_t -adapté. Alors*

$$\mathbb{E}[\phi(M_t + M_t^*)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_s + M_s^*)], \quad 0 \leq s \leq t, \quad (3.20)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^2 , et à condition que l'une au moins des conditions suivantes soient vérifiées

i) $0 \leq J_t \leq J_t^*$, $\lambda_t dPdt - p.p.$ et

$$|H_t| \leq |H_t^*|, \quad \lambda_t J_t \leq \lambda_t^* J_t^*, \quad dPdt - p.p.,$$

ii) $J_t \leq J_t^*$, $\lambda_t dPdt - p.p.$, et

$$|H_t| \leq |H_t^*|, \quad \lambda_t |J_t|^2 \leq \lambda_t^* |J_t^*|^2, \quad dPdt - p.p..$$

iii) $J_t \leq 0 \leq J_t^*$, $\lambda_t dPdt - p.p.$, et

$$|H_t|^2 + \lambda_t |J_t|^2 \leq |H_t^*|^2 + \lambda_t^* |J_t^*|^2, \quad dPdt - p.p..$$

avec, de plus, ϕ' convexe pour les cas ii) et iii).

Nous allons maintenant donner un exemple très simple afin de montrer comment ces résultats peuvent être utilisés (et surtout pour comprendre l'utilité de ce modèle étrange où se mélangent des martingales forward et backward). Pour cela, prenons un mouvement brownien standard $(W_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et un processus ponctuel $(Z_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ d'intensité $(\lambda_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$, munissons le tout d'une filtration $(\mathcal{F}_t^M)_{t \in \mathbb{R}_+}$. Considérons la variable aléatoire F définie par

$$F = \mathbb{E}[F] + \int_0^{+\infty} H_t dW_t + \int_0^{+\infty} J_t (dZ_t - \lambda_t dt), \quad (3.21)$$

où $(H_u)_{u \in \mathbb{R}_+}$ est un processus prévisible de carré intégrable et $(J_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est quant à lui un processus prévisible qui est soit de carré intégrable, soit positif, soit intégrable.

On note par $\tilde{N}(c)$ une variable aléatoire de Poisson de paramètre $c > 0$ recentrée et par $W(\beta^2)$ une variable aléatoire gaussienne centrée et de variance $\beta^2 \geq 0$. On suppose que $\tilde{N}(c)$ et $W(\beta^2)$ sont indépendantes.

Théorème 3.1.13 (Klein, Ma, Privault [150]). *Soit F définie par (3.21)*

i) *Supposons qu'il existe $k > 0$ pour lequel $0 \leq J_t \leq k$, $dPdt - p.p.$ et posons*

$$\beta_1^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt \right\|_{\infty} \quad \text{et} \quad \alpha_1 = \left\| \int_0^{+\infty} J_t \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi \left(W(\beta_1^2) + k \tilde{N}(\alpha_1/k) \right) \right], \quad (3.22)$$

pour toute fonction convexe $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

ii) *Supposons qu'il existe $k > 0$ pour lequel $J_t \leq k$, $dPdt - p.p.$ et soit*

$$\beta_2^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt \right\|_{\infty} \quad \text{et} \quad \alpha_2^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |J_t|^2 \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi \left(W(\beta_2^2) + k \tilde{N}(\alpha_2^2/k^2) \right) \right], \quad (3.23)$$

pour toute fonction convexe $\mathcal{C}^2 \phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que ϕ' est convexe.

iii) *Supposons que $J_t \leq 0$, $dPdt - p.p.$, et soit*

$$\beta_3^2 = \left\| \int_0^{+\infty} |H_t|^2 dt + \int_0^{+\infty} |J_t|^2 \lambda_t dt \right\|_{\infty}.$$

Alors on a

$$\mathbb{E}[\phi(F - \mathbb{E}[F])] \leq \mathbb{E} \left[\phi(W(\beta_3^2)) \right], \quad (3.24)$$

pour toute fonction convexe $\mathcal{C}^2 \phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que ϕ' est convexe.

Comme énoncé, ce théorème est une conséquence des théorèmes de concentration convexe et plus particulièrement du Corollaire 3.1.1. Cependant, pour l'instant on devine plus ou moins la martingale forward (on arrête l'intégrale à t) mais on ne voit pas du tout de martingale backward. Considérons donc la martingale forward

$$M_t = \mathbb{E}[F | \mathcal{F}_t] - \mathbb{E}[F] = \int_0^t H_s dW_s + \int_0^t J_s (dZ_s - \lambda_s ds), \quad t \geq 0,$$

associée à la filtration $(\mathcal{F}_t^M)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et soient $(\hat{N}_s)_{s \in \mathbb{R}_+}$, $(\hat{W}_s)_{s \in \mathbb{R}_+}$ un processus de Poisson standard continu à gauche et un mouvement brownien standard indépendant de $(\mathcal{F}_s^M)_{s \in \mathbb{R}_+}$.

Par exemple pour $i) - ii)$ et $p = 1, 2$, on considère les filtrations $(\mathcal{F}_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ et $(\mathcal{F}_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ définies par

$$\mathcal{F}_t^* = \mathcal{F}_\infty^M \vee \sigma(\hat{W}_{\beta_p^2} - \hat{W}_{V_p^2(s)}, \hat{N}_{\alpha_p^p/k^p} - \hat{N}_{U_p^p(s)/k^p} : s \geq t)$$

et $\mathcal{F}_t = \sigma(\hat{W}_s, \hat{N}_s : s \geq 0) \vee \mathcal{F}_t^M$, $t \in \mathbb{R}_+$, et soit

$$M_t^* = \hat{W}_{\beta_p^2} - \hat{W}_{V_p^2(t)} + k(\hat{N}_{\alpha_p^p/k^p} - \hat{N}_{U_p^p(t)/k^p}) - (\alpha_p^p - U_p^p(t))/k^{p-1}, \quad (3.25)$$

où

$$V_p^2(t) = \int_0^t |H_s|^2 ds \quad \text{and} \quad U_p^p(t) = \int_0^t J_s^p \lambda_s ds, \quad P - p.s., \quad s \geq 0.$$

Alors $(M_t^*)_{t \in \mathbb{R}_+}$ vérifie les hypothèses du Corollaire 3.1.1- $i) - ii)$, et on peut alors montrer que

$$\mathbb{E}[\phi(M_t)] \leq \mathbb{E}[\phi(M_0^*)],$$

puis faire tendre t vers $+\infty$.

3.2 Etude de structures aléatoires discrètes

Dans cette partie, nous allons présenter d'une part le travail effectué avec Brigitte Chauvin, Jean-François Marckert et Alain Rouault [70] autour des arbres binaires de recherche et d'autre part les deux travaux effectués autour des grandes déviations pour des variables discrètes conditionnées, le premier en collaboration avec Fabrice Gamboa et Clémentine Prieur [111] et le second avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [149].

3.2.1 L'arbre binaire de recherche

Dans ce travail, on s'est intéressé à deux modèles classiques de processus binaires : un processus à temps discret - l'arbre binaire de recherche et un processus à temps continu - le processus de Yule.

- Un arbre binaire de recherche labéllisé (ABRL) est une structure utilisée en informatique pour stocker des données ordonnées. Au temps $t = 0$, l'ABRL est réduit à une feuille sans label. A chaque unité de temps, un nouvel objet est inséré sur une feuille de l'arbre. Cette feuille devient alors un nœud interne et donne naissance à deux nouvelles feuilles. On va s'intéresser à la suite des arbres délabélisés $(\mathcal{T}_n)_n$ induit par cette construction. On appellera cette suite le processus d'arbre binaire de recherche (processus ABR).

- Le processus de Yule $(\mathbb{T}_t)_t$ est un processus à temps continu à valeurs arbre binaire dans lequel chaque feuille se comporte indépendamment les unes des autres (au temps $t = 0$, l'arbre est réduit à une feuille). Après un temps aléatoire de loi exponentielle, une feuille a deux enfants.

En fait, ces deux modèles sont fortement connectés si l'on choisit convenablement l'aléa générant l'ABRL. Sous ce modèle (que l'on décrira dans la suite), si τ_n est le temps aléatoire auquel la feuille $n + 1$ apparaît alors $(\mathbb{T}_{\tau_n})_n$ et $(\mathcal{T}_n)_n$ ont la même loi.

Présentation précise des deux modèles

1. L'arbre binaire de recherche

Nous prendrons la définition suivante des arbres. On commence par définir

$$\mathbb{U} = \{\emptyset\} \cup \bigcup_{n \geq 1} \{0, 1\}^n \quad (3.26)$$

l'ensemble des mots finis sur l'alphabet $\{0, 1\}$ (le mot vide étant \emptyset). Pour u et v dans \mathbb{U} , uv est la concaténation du mot u avec le mot v (par convention $\forall u \in \mathbb{U}, \emptyset u = u$). Si $v \neq \emptyset$, on dit que uv est

un descendant de u et u un ancêtre de uv . De plus $u0$ (resp. $u1$) est appelé le fils gauche (resp. droit) de u .

Un *arbre binaire complet* T est un sous ensemble fini de \mathbb{U} vérifiant

$$\begin{cases} \emptyset \in T \\ \text{si } uv \in T \text{ alors } u \in T, \\ u1 \in T \Leftrightarrow u0 \in T. \end{cases}$$

Les éléments de T sont appelés les nœuds et \emptyset est appelé la racine, le nombre de lettres dans u , est sa profondeur, elle est notée $|u|$ (avec $|\emptyset| = 0$). On notera **AB** l'ensemble des arbres binaires complets.

On peut maintenant introduire les ABRL qui sont couramment utilisés pour stocker des données totalement ordonnées (voir la monographie de [174]). Soit A un ensemble totalement ordonné dont les éléments sont appelés les clés. Pour $n \geq 1$, on tire n éléments (x_1, \dots, x_n) sans remise dans A . L'ABRL construit à partir de ces données est un arbre binaire complet dans lequel chaque nœud interne est associé à une clé. Il est construit de la manière suivante :

- On assigne x_1 à la racine.
- La deuxième clé x_2 est assignée aux fils gauche de la racine si $x_2 < x_1$ et à son fils droit sinon.
- On répète le même algorithme pour insérer les autres clés.

Afin d'étudier la forme typique de ce genre d'arbre lorsque n est grand, il est classique d'introduire un modèle aléatoire. Pour cela, on suppose que les clés insérées sont des variables aléatoires i.i.d. $(x_i)_{i \geq 1}$ de loi continue F sur $[0, 1]$. Sous ce modèle, l'ABRL $L_n^{(F)}$ est une variable aléatoire à valeurs dans l'ensemble des arbres binaires dans lequel chaque nœud interne a un label appartenant à $[0, 1]$. La suite $(L_n^{(F)}, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov.

La structure que l'on va étudier est l'arbre sous-jacent $\mathcal{T}_n^{(F)}$ de $L_n^{(F)}$, i.e. l'arbre qui a la même structure arborescente que $L_n^{(F)}$, mais qui n'a pas de label. On pose

$$(\mathcal{T}_n^{(F)}, n \geq 0) := (\mathbf{UNDER}(L_n^{(F)}), n \geq 0);$$

par construction $\mathcal{T}_n^{(F)}$ est un arbre binaire complet.

Pour tout $n \geq 1$, la suite x_1, \dots, x_n induit p.s une permutation de $\{1, \dots, n\}$, σ_n vérifiant $x_{\sigma_n(1)} < x_{\sigma_n(2)} < \dots < x_{\sigma_n(n)}$. Comme les x_i sont échangeables, σ_n suit la loi uniforme sur \mathcal{S}_n . Cette loi est donc indépendante de F ; on pourra donc supposer que F est la loi uniforme sur $[0, 1]$ et noter alors L_n au lieu de $L_n^{(F)}$ et \mathcal{T}_n à la place de $\mathcal{T}_n^{(F)}$. C'est ce qu'on appellera dans la suite le modèle des permutations aléatoires. Par échangeabilité, on peut voir que σ_n est indépendante du vecteur $(x_{\sigma_n(1)}, x_{\sigma_n(2)}, \dots, x_{\sigma_n(n)})$ et que

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(x_{n+1} \in (x_{\sigma_n(j)}, x_{\sigma_n(j+1)}) \mid \sigma_n) &= \mathbb{P}(x_{n+1} \in (x_{\sigma_n(j)}, x_{\sigma_n(j+1)})) \\ &= \mathbb{P}(\sigma_{n+1}(j+1) = n+1) = (n+1)^{-1} \end{aligned}$$

pour tout $j \in \{0, 1, \dots, n\}$, où $x_{\sigma_n(0)} := 0$ et $x_{\sigma_n(n+1)} := 1$. Cette relation assure la consistance de la suite $(\sigma_n)_n$.

Cela se traduit pour l'ABR, de la manière suivante : l'insertion de la $n+1$ ième clé dans l'arbre ayant n nœuds internes est uniforme parmi les $n+1$ feuilles. Autrement dit, dans ce modèle, la suite $(\mathcal{T}_n)_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov définie par $\mathcal{T}_0 = \{\emptyset\}$ et

$$\mathcal{T}_{n+1} = \mathcal{T}_n \cup \{D_n 0, D_n 1\}, \tag{3.27}$$

$$\mathbb{P}(D_n = u \mid \mathcal{T}_n) = (n+1)^{-1}, \quad u \in \partial \mathcal{T}_n; \tag{3.28}$$

la feuille D_n de \mathcal{T}_n est le nœud aléatoire où la $n + 1$ -ième clé est insérée et sa hauteur est d_n .

Nous commençons par lister certains résultats concernant l'évolution de l'ABR. Tout d'abord concernant le niveau de saturation h_n et la hauteur H_n :

$$h_n = \min\{|u| : u \in \partial\mathcal{T}_n\} \quad , \quad H_n = \max\{|u| : u \in \partial\mathcal{T}_n\}$$

croissent logarithmiquement (voir par exemple Devroye [85])

$$\text{p.s.} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{h_n}{\log n} = c' = 0.3733\dots \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{H_n}{\log n} = c = 4.31107\dots ; \quad (3.29)$$

où les constantes c' et c sont les deux solutions de l'équation $\eta_2(x) = 1$ avec

$$\eta_\lambda(x) := x \log \frac{x}{\lambda} - x + \lambda, \quad x \geq 0. \quad (3.30)$$

Le comportement asymptotique précis de H_n a été étudié dans les papiers [90, 208, 215, 157]. Afin de conserver toute l'information sur \mathcal{T}_n , on étudie le profil de l'arbre défini par

$$U_k(n) := \#\{u \in \partial\mathcal{T}_n, |u| = k\} \quad , \quad k \geq 1. \quad (3.31)$$

$U_k(n)$ est le nombre de feuilles de l'arbre \mathcal{T}_n qui sont au niveau k . On peut remarquer que $U_k(n) = 0$ pour $k > H_n$ et pour $k < h_n$. Il est donc naturel d'encoder le profil par le polynôme aléatoire des niveaux $\sum_k U_k(n)z^k$, dont le degré est H_n . Jabbour [69, 134] a montré une très jolie propriété de martingale. Il a montré que pour $z \notin \{0, -1/2, -1, -3/2, \dots\}$, $n \geq 0$, et si

$$\mathcal{M}_n(z) := \frac{1}{C_n(z)} \sum_{k \geq 0} U_k(n)z^k = \frac{1}{C_n(z)} \sum_{u \in \partial\mathcal{T}_n} z^{|u|}, \quad (3.32)$$

où $C_0(z) = 1$, pour $n \geq 1$,

$$C_n(z) := \prod_{k=0}^{n-1} \frac{k+2z}{k+1} = (-1)^n \binom{-2z}{n} \quad (3.33)$$

et si $\mathcal{F}_{(n)}$ est la filtration engendrée par les événements $\{u \in \mathcal{T}_j\}_{j \leq n, u \in \mathbb{U}}$. Alors $(\mathcal{M}_n(z), \mathcal{F}_{(n)})_n$ est une martingale, que l'on appellera dans la suite la martingale de l'ABR. Si $z > 0$, la martingale étant positive elle converge donc presque sûrement vers une limite notée $\mathcal{M}_\infty(z)$. Jabbour [134] a montré que la limite est strictement positive si $z \in]z_c^-, z_c^+[$, où

$$z_c^- = c'/2 = 0.186\dots, \quad z_c^+ = c/2 = 2.155\dots \quad (3.34)$$

et que $\mathcal{M}_\infty(z) = 0$ si $z \notin [z_c^-, z_c^+]$. Cette martingale permet aussi de montrer que le profil correctement renormalisé autour de $2 \log n$ a une forme gaussienne (voir Théorème 1 dans [69]).

Le lecteur attentif aura remarqué l'absence de résultat si $z = z_c^-$ ou si z_c^+ . Afin de comprendre ce qui se passe en ces deux points, nous allons plonger ce modèle d'ABR à temps discret dans un modèle (de fragmentation) à temps continu.

2. Processus de fragmentation, processus de Yule et plongement

L'idée de plonger des modèles discrets (comme des modèle d'urnes) dans des processus de branchement à temps continu remonte au moins à Athreya-Karlin [14]. On peut en trouver une description dans Athreya et Ney ([15], section 9) et a été revisité par Janson [139]. Pour l'ABR, Devroye [85] mentionne plusieurs plongements. En particulier, il cite ceux dus à Pittel [198], et Biggins [30, 31]. Nous allons pour notre part travailler avec une variante du processus de Yule, qui tiendra compte de la structure d'arbre (i.e. la généalogie).

Commençons par présenter un processus de fragmentation $(F(t))_{t \geq 0}$ de l'intervalle $]0, 1[$. On note

$I_\emptyset =]0, 1[$ et pour $u = u_1 u_2 \dots u_k \in \mathbb{U}$ (voir Equation (3.26) pour la définition de \mathbb{U}), on définit l'intervalle I_u par

$$I_u = \left] \sum_{j=1}^k u_j 2^{-j}, 2^{-k} + \sum_{j=1}^k u_j 2^{-j} \right[.$$

Ainsi à chaque élément u de \mathbb{U} , on associe un et un seul sous-intervalle I_u de $]0, 1[$ à extrémités dyadiques.

On pose $F(0) = I_\emptyset =]0, 1[$ et on attache à cet intervalle une horloge $\tau_1 \sim \mathbf{Exp}(1)$ de loi exponentielle de paramètre 1. Au temps τ_1 , le processus F saute. L'intervalle $F(0) =]0, 1[$ se divise en deux en son milieu et donne naissance à deux nouveaux intervalles $F(\tau_1) = (]0, 1/2[,]1/2, 1]) = (I_0, I_1)$.

On attache alors à chaque intervalle deux horloges indépendantes de lois exponentielles (disons E_1 et E_2). Dès que la première horloge sonne, l'intervalle se coupe en deux selon le même procédé.

Ainsi à chaque temps de saut τ , les fragments de $F(\tau)$ se comportent indépendamment les uns des autres. Chaque fragment I_u se divise en deux parties égales I_{u0} et I_{u1} après un temps aléatoire de loi exponentielle de paramètre 1. En raison de l'absence de mémoire de la loi exponentielle lorsque n fragments sont présents, chacun d'entre eux a autant de chance d'être le premier à se scinder (ce qui ressemble beaucoup aux propriétés décrites par (3.27)).

On est maintenant en mesure de définir le processus de Yule comme un encodage du processus de fragmentation. L'idée est relativement simple : il s'agit d'interpréter les fragments I_{u0} et I_{u1} de I_u comme ses deux enfants : I_{u0} est le fragment gauche et I_{u1} le fragment droit. On obtient ainsi une structure d'arbre binaire où un intervalle de longueur 2^{-k} correspond à une feuille de profondeur k dans la structure arborescente. Réciproquement, la taille du fragment I_u est $2^{-|u|}$. Plus formellement, on définit l'arbre \mathbb{T}_t par son ensemble de feuilles :

$$\partial\mathbb{T}_t = \{u, I_u \in F(t)\}. \quad (3.35)$$

On appelle processus de Yule, le processus à valeurs arbre binaire $\mathbb{T}_{t \geq 0}$. Les deux processus $\mathbb{T}_{t \geq 0}$ et $(F(t))_{t \geq 0}$ sont des processus de Markov à sauts purs. Le processus de comptage $(N_t)_{t \geq 0}$ qui donne le nombre de feuilles de $\mathbb{T}_{t \geq 0}$

$$N_t := \#\partial\mathbb{T}_t, \quad (3.36)$$

est le processus classique de Yule (Athreya-Ney [15]).

On dénote par $0 = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots$ la suite des temps de sauts de ces processus markoviens,

$$\tau_n = \inf\{t : N_t = n + 1\}. \quad (3.37)$$

Afin de pouvoir transférer les propriétés bien connues du processus de Yule à l'ABR, il est nécessaire de pouvoir construire les objets sur le même espace de probabilité. Cette observation avait déjà été faite par Aldous et Shields [4] section 1, (voir aussi [146] p.237 et Tavaré [238] p.164).

Lemme 3.2.1. *a) Les intervalles de temps inter-saut $(\tau_n - \tau_{n-1})_n$ sont indépendants et vérifient :*

$$\tau_n - \tau_{n-1} \sim \mathbf{Exp}(n) \text{ pour tout } n \geq 1, \quad (3.38)$$

où $\mathbf{Exp}(\lambda)$ est la loi exponentielle de paramètre λ .

b) Les processus $(\tau_n)_{n \geq 1}$ et $(\mathbb{T}_{\tau_n})_{n \geq 1}$ sont indépendants.

c) Les processus $(\mathbb{T}_{\tau_n})_{n \geq 1}$ et $(\mathcal{T}_n)_{n \geq 0}$ sont égaux en loi.

Enoncé des résultats principaux

Tous les résultats sont basés sur une connexion entre les martingales associées aux processus à temps discret et à celles associées au temps continu. Cette connexion permet de transférer certains résultats concernant les processus de fragmentation à l'ABR. Il est donc raisonnable de commencer par présenter rigoureusement

les martingales en présence (on a déjà croisé, Equation (3.32), la martingale $\mathcal{M}_n(z)$ de l'ABR).

On associe classiquement¹ au processus de Yule une famille de martingales additives paramétrisée par $\theta \in \mathbb{R}$ et indexée par $t \geq 0$,

$$m(t, \theta) := \sum_{u \in \partial \mathbb{T}_t} \exp(\theta|u| - tL(\theta)),$$

où

$$L(\theta) = 2e^\theta - 1 \quad (3.39)$$

(cette martingale apparaît par exemple dans les travaux suivants [243, 159, 23]). Afin d'avoir de plus jolies formules, on reparamétrise cette martingale par $z = e^\theta$ et on considère donc la famille de martingales suivante

$$M(t, z) := m(t, \log z) = \sum_{u \in \partial \mathbb{T}_t} z^{|u|} e^{t(1-2z)}. \quad (3.40)$$

En particulier, $M(t, 1/2) = 1$ et $M(t, 1) = e^{-t} N_t$.

La formule de plongement permet de connecter la famille des martingales de l'ABR $(\mathcal{M}_n, \mathcal{F}_{(n)})_n$ avec la famille des martingales du processus de Yule $(M(t, z), \mathcal{F}_t)_t$. Si l'on observe la martingale $(M(\cdot, z))$ aux temps d'arrêts $(\tau_n)_n$, on peut décomposer (voir la Proposition 3.2.1) la martingale en une partie spatiale $\mathcal{M}_n(z)$ et en une partie temporelle

$$\mathcal{C}_n(z) := e^{\tau_n(1-2z)} \mathcal{M}_n(z).$$

Le processus $(\mathcal{C}_n(z))_n$ est \mathcal{F}_{τ_n} -adapté.

Un résultat classique (voir Athreya-Ney [15] ou Devroye [85] 5.4) assure que p.s. $e^{-t} N_t$ converge lorsque $t \rightarrow +\infty$ et

$$\xi := \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-t} N_t \sim \mathbf{Exp}(1). \quad (3.41)$$

De plus, comme $\lim_n \tau_n = \infty$ p.s., on obtient grâce à (3.37) et (3.41) que

$$\lim_n n e^{-\tau_n} = \xi \text{ p.s.} \quad (3.42)$$

Proposition 3.2.1 (Chauvin, Klein, Marckert, Rouault [70]. Martingale connexion). *Soit $z \in \mathbb{C} \setminus \frac{1}{2}\mathbb{Z}^-$.*

1) *La famille $(\mathcal{C}_n(z))_{n \geq 0}$ est une martingale de moyenne 1 et*

$$\lim_n (\mathcal{C}_n(z)) = \frac{\xi^{2z-1}}{\Gamma(2z)} \text{ p.s.} \quad (3.43)$$

De plus, si la partie réelle de z est strictement positive, la convergence a lieu aussi dans L^1 .

2) *Les deux martingales $(\mathcal{C}_n(z))_{n \geq 0}$ et $(\mathcal{M}_n(z))_{n \geq 0}$ sont indépendantes et*

$$M(\tau_n, z) = (\mathcal{C}_n(z)) \mathcal{M}_n(z). \quad (3.44)$$

La Proposition 3.2.1 est un moyen de transférer les résultats connus sur la martingale de Yule à celle de l'ABR. Ce transfert permet de donner des preuves élémentaires de résultats déjà connus mais surtout de répondre aux questions posées par Jabbour dans [134]. En effet le Théorème 3.2.1 2., donne le comportement de la martingale de l'ABR aux points critiques de z .

Théorème 3.2.1 (Chauvin, Klein, Marckert, Rouault [70].). 1. *Si $z \in]z_c^-, z_c^+[$,*

(a) alors on a les relations suivantes pour les limites des martingales

$$\text{p.s.} \quad M(\infty, z) = \frac{\xi^{2z-1}}{\Gamma(2z)} \mathcal{M}_\infty(z), \quad (3.45)$$

où la variable exponentielle ξ a été définie par (3.41).

1. En général, $|u|$ est remplacé par la position X_u et $L(\theta) = \beta(E \int e^{\theta x} Z(dx) - 1)$ où β est le paramètre de durée de vie et Z est le processus ponctuel de naissance; ici $\beta = 1$ et $Z = 2\delta_1$.

(b) On a aussi les formules suivantes de splitting

i. pour le processus de Yule,

$$M(\infty, z) = ze^{(1-2z)\tau_1} (M_0(\infty, z) + M_1(\infty, z)) \quad p.s. \quad (3.46)$$

où $M_0(\infty, z)$ et $M_1(\infty, z)$ sont indépendantes, de même loi que $M(\infty, z)$ et indépendantes de τ_1 .

ii. Pour l'ABR,

$$\mathcal{M}_\infty(z) = z (U^{2z-1} \mathcal{M}_{\infty,(0)}(z) + (1-U)^{2z-1} \mathcal{M}_{\infty,(1)}(z)) \quad (3.47)$$

où $\mathcal{M}_{\infty,(0)}(z)$, $\mathcal{M}_{\infty,(1)}(z)$ sont indépendantes et indépendantes de U et distribuées comme $\mathcal{M}_\infty(z)$.

2. Si $z \in]0, \infty[\setminus]z_c^-, z_c^+[$, alors $p.s. \lim_t M(t, z) = 0$ et $\lim_n \mathcal{M}_n(z) = 0$.

On peut déduire des résultats précédents des relations sur les martingales dérivées. La martingale dérivée permet d'une part de mieux comprendre le comportement de la martingale aux points critiques et d'autre part, elle permet de retrouver une version forte de l'équation dite de Quicksort (forte signifie ici trajectorielle et non pas seulement en loi). Le Quicksort est un algorithme utilisé en informatique pour classer des données. Les dérivées

$$M'(t, z) := \frac{d}{dz} M(t, z), \quad \mathcal{M}'_n(z) := \frac{d}{dz} \mathcal{M}_n(z) \quad (3.48)$$

sont des martingales qui ne sont plus positives. Le théorème suivant décrit leur comportement

Théorème 3.2.2 (Chauvin, Klein, Marckert, Rouault [70]). 1. Si $z \in]z_c^-, z_c^+[$, les martingales $(M'(t, z), t \geq 0)$ et $(\mathcal{M}'_n(z), n \geq 0)$ convergent $p.s.$ On notera $M'(\infty, z)$ et $\mathcal{M}'_\infty(z)$ les limites respectives.

(a) Les martingales limites vérifient les relations suivantes

$$M'(\infty, z) = \frac{\xi^{2z-1}}{\Gamma(2z)} \left(\mathcal{M}'_\infty(z) + 2 \left(\log \xi - \frac{\Gamma'(2z)}{\Gamma(2z)} \right) \mathcal{M}_\infty(z) \right) \quad p.s. \quad (3.49)$$

où $\xi \sim \mathbf{Exp}(1)$ est définie par (3.41) et est indépendante de $\mathcal{M}_\infty(z)$ et de $\mathcal{M}'_\infty(z)$.

(b) On a les formules suivantes de splitting

$$\begin{aligned} \mathcal{M}'_\infty(z) &= zU^{2z-1} \mathcal{M}'_{\infty,(0)}(z) + z(1-U)^{2z-1} \mathcal{M}'_{\infty,(1)}(z) \\ &\quad + 2z (U^{2z-1} \log U) \mathcal{M}_{\infty,(0)}(z) \\ &\quad + 2z ((1-U)^{2z-1} \log(1-U)) \mathcal{M}_{\infty,(1)}(z) \\ &\quad + z^{-1} \mathcal{M}_\infty(z) \end{aligned} \quad (3.50)$$

où $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et les variables aléatoires $\mathcal{M}'_{\infty,(0)}(z)$ et $\mathcal{M}'_{\infty,(1)}(z)$ sont indépendantes (et indépendantes de U) et distribuées comme $\mathcal{M}'_\infty(z)$.

2. Les martingales $(M'(t, z_c^-), t \geq 0)$ et $(\mathcal{M}'_n(z_c^-), n \geq 0)$ (resp. $(M'(t, z_c^+), t \geq 0)$ et $(\mathcal{M}'_n(z_c^+), n \geq 0)$) convergent $p.s.$ Les limites notées $M'(\infty, z_c^-)$ et $\mathcal{M}'_\infty(z_c^-)$ (resp. $M'(\infty, z_c^+)$ et $\mathcal{M}'_\infty(z_c^+)$) sont strictement positives (resp. négatives) et vérifient

$$\mathbb{E}(M'(\infty, z_c^-)) = \mathbb{E}(\mathcal{M}'_\infty(z_c^-)) = +\infty, \quad (3.51)$$

$$\mathbb{E}(M'(\infty, z_c^+)) = \mathbb{E}(\mathcal{M}'_\infty(z_c^+)) = -\infty. \quad (3.52)$$

3. $M'(\infty, z_c^\pm)$ et $\mathcal{M}'_\infty(z_c^\pm)$ vérifient des équations similaires à (3.45), (3.46) et (3.47) :

$$M'(\infty, z_c^\pm) = \frac{\xi^{2z_c^\pm-1}}{\Gamma(2z_c^\pm)} \mathcal{M}'_\infty(z_c^\pm) \quad (3.53)$$

$$M'(\infty, z_c^\pm) = z_c^\pm e^{(1-2z_c^\pm)\tau_1} (M'_0(\infty, z_c^\pm) + M'_1(\infty, z_c^\pm)) \quad (3.54)$$

$$\mathcal{M}'_\infty(z_c^\pm) = z_c^\pm \left(U^{2z_c^\pm-1} \mathcal{M}'_{\infty,(0)}(z_c^\pm) + (1-U)^{2z_c^\pm-1} \mathcal{M}'_{\infty,(1)}(z_c^\pm) \right) \quad a.s.. \quad (3.55)$$

Corollaire 3.2.1. *On a*

$$M'(\infty, 1) = \xi (\mathcal{M}'_{\infty}(1) + 2(\log \xi + \gamma - 1)) \quad p.s., \quad (3.56)$$

où γ est la constante d'Euler et $\mathcal{M}'_{\infty}(1)$ vérifie la version p.s. de l'équation de Quicksort :

$$\mathcal{M}'_{\infty}(1) = U\mathcal{M}'_{\infty,(0)}(1) + (1-U)\mathcal{M}'_{\infty,(1)}(1) + 2U \log U + 2(1-U) \log(1-U) + 1, \quad (3.57)$$

où $\mathcal{M}'_{\infty,(0)}(1)$ et $\mathcal{M}'_{\infty,(1)}(1)$ sont indépendantes (et indépendantes de U), de distribution $\mathcal{M}'_{\infty}(1)$ et $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

3.2.2 Théorème de Berry-Esseen et principe de grandes déviations pour des variables discrètes conditionnées

Cette partie présente les travaux réalisés d'une part avec Fabrice Gamboa et Clémentine Prieur [111] et d'autre part avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [149].

Comme mentionné dans le Chapitre 1, ces travaux découlent d'une volonté d'une part de continuer à travailler sur des modèles discrets liés à l'informatique théorique et d'autre part d'obtenir des principes de grandes déviations. Jean-François Marckert m'a alors conseillé la lecture de l'article de Svante Janson [138]. Cet article étant le point de départ de ces recherches, nous allons commencer à le présenter succinctement.

Le travail de Janson

Janson part de la constatation suivante : dans de nombreux problèmes combinatoires, la distribution de la quantité d'intérêt est la loi d'une moyenne empirique construite à partir d'un échantillon i.i.d. conditionnée par une variable exogène. Cette variable exogène est elle-même (la plupart du temps) une moyenne empirique construite à partir d'un échantillon i.i.d. De façon plus précise, notons \mathbb{N}^* l'ensemble des entiers naturels positifs et $\mathbb{N} = \mathbb{N}^* \cup 0$ et donnons-nous

1. $(k_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ une suite d'entiers et $(N_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ une suite d'entiers strictement positifs ;
2. $\mathbf{X} = (X_j^{(n)})_{n \in \mathbb{N}^*, j=1, \dots, N_n}$ et $\mathbf{Y} = (Y_j^{(n)})_{n \in \mathbb{N}^*, j=1, \dots, N_n}$ deux tableaux triangulaires de variables aléatoires. Les tableaux sont tels que sur chaque ligne les variables sont i.i.d. (les lignes sont indépendantes entre elles). Mais les tableaux ne sont pas forcément indépendants entre eux (si c'est le cas la loi conditionnelle sera triviale). Le point crucial pour la suite est que les variables du tableau \mathbf{X} sont à valeurs entières.

La quantité étudiée par Janson est la loi de $(N_n)^{-1}T_n := (N_n)^{-1} \sum_{j=1}^{N_n} Y_j^{(n)}$ conditionnée par une valeur précise de $S_n := \sum_{j=1}^{N_n} X_j^{(n)}$. Plus précisément, il a prouvé un théorème central limite pour la loi

$$\mathcal{L}_n := \mathcal{L}((N_n)^{-1}T_n | S_n = k_n). \quad (3.58)$$

Avant d'expliquer l'idée clé de Janson pour démontrer son théorème, nous allons d'abord donner plusieurs exemples de structures combinatoires pouvant s'écrire sous cette forme conditionnée. Tous ces exemples sont introduits par Janson et on renvoie à son article [138] ainsi qu'aux références citées par ce dernier pour plus de détails.

1. Allocations aléatoires

On jette indépendamment de façon uniforme m boules dans N urnes. Notons Z_i le nombre de boules dans l'urne i à la fin de l'expérience. Alors il est bien connu que (Z_1, \dots, Z_N) suit la loi multinomiale. De plus si X_1, \dots, X_N sont des variables i.i.d. de loi $\mathcal{P}(\lambda^*)$ (pour un $\lambda^* > 0$ arbitraire) alors la loi de (X_1, \dots, X_N) conditionnée par $\sum_{i=1}^N X_i = m$ est celle de (Z_1, \dots, Z_N) . Une question classique est de connaître le nombre W d'urnes vides ; sa loi est donc celle de $\sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{\{X_i=0\}}$ conditionnée par $\sum_{i=1}^N X_i = m$. Ainsi en posant $Y_i = \mathbf{1}_{\{X_i=0\}}$, on est exactement dans le cadre décrit ci-dessus.

Bien évidemment on peut prendre d'autres statistiques pour $\sum_{i=1}^n Y_i$ par exemple $\sum_{i=1}^n f(X_i, U_i)$ où les U_1, \dots, U_n sont des variables aléatoires i.i.d. et indépendantes de X_1, \dots, X_n . Il est intéressant de

noter qu'une technique classique de rééchantillonnage - le bootstrap - rentre dans ce cadre. On tire aléatoirement et avec remise un m échantillon parmi les (Z_1, \dots, Z_n) que l'on note Z_1^*, \dots, Z_m^* . Alors $\sum_{i=1}^m f(Z_i^*)$ a la même loi que $\sum_{i=1}^n X_i f(Z_i)$ conditionnée par $\sum_{i=1}^n X_i = m$, où $X_i \sim \mathcal{P}(\lambda)$, $i = 1, \dots, n$. Pour plus de détails sur le bootstrap le lecteur pourra lire [92].

2. Processus de branchement

Prenons un processus de Galton-Watson critique. La généalogie commence par un ancêtre et le nombre d'enfants de chaque individu est une variable aléatoire X vérifiant $\mathbb{E}(X) = 1$. On numérote les individus au fur et à mesure qu'ils arrivent. On note X_i le nombre d'enfants du i -ème individu, Janson explique que la population totale est $n \geq 1$ si et seulement si

$$S_k := \sum_{i=1}^k X_i \geq k \text{ pour } 0 \leq k < n \text{ mais } S_n = n - 1. \quad (3.59)$$

Ce conditionnement n'est pas le même que celui décrit par l'Equation (3.58). Cependant si on ignore l'ordre de X_1, \dots, X_n , conditionner par (3.59) est équivalent à conditionnement du type de (3.58).

3. Les Forêts aléatoires

On considère une forêt aléatoire étiquetée uniformément distribuée ayant m sommets et $N < m$ racines. Les sommets sont $1, \dots, m$ et par symétrie, on peut supposer que les racines sont les N premiers sommets. Ce modèle peut être construit de la manière suivante. Tout d'abord, la taille des N arbres dans la forêt est distribuée comme X_1, \dots, X_N conditionnée par $\sum_{i=1}^N X_i = m$ où X_i est une variable aléatoire de Borel de paramètre (arbitraire) $\lambda \in]0, 1/e]$. On rappelle que X est une variable aléatoire de Borel de paramètre $\lambda \in]0, 1/e]$ si

$$\mathbb{P}(X = l) = \frac{1}{T(\lambda)} \frac{l^{l-1}}{l!} \lambda^l, \quad l \in \mathbb{N}^*, \lambda \in]0, 1/e], \quad (3.60)$$

où $T(\lambda) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l^{l-1}}{l!} \lambda^l$ est la fonction d'arbre (voir [98]). Ensuite, l'arbre numéro i est tiré uniformément parmi les arbres de taille X_i . De nombreux auteurs (voir par exemple [155, 191, 192]) se sont intéressés au nombre d'arbres de taille k dans la forêt. Pour cela, on pose $Y_i = \mathbf{1}_{\{X_i = k\}}$.

4. Hachage avec essais linéaires

Le hachage avec essais linéaires est une structure combinatoire très étudiée en informatique théorique (voir Knuth [153]). Elle peut être construite de la manière suivante. On jette n boules séquentiellement dans m urnes de façon aléatoire. Les m urnes sont disposées circulairement et une boule qui tombe dans une urne déjà occupée est déplacée jusqu'à la prochaine urne vide, les déplacements s'effectuant toujours dans la même direction. La longueur du déplacement est appelée le déplacement de la boule. On s'intéresse au déplacement total (c'est-à-dire la somme de tous les déplacements). Ce déplacement total est une variable aléatoire notée $d_{m,n}$. On suppose que $n < m$.

Exemple 3.2.1. Supposons que $n = 8$, $m = 10$ et que $(6, 9, 1, 9, 9, 6, 2, 5)$ sont les adresses auxquelles les boules désirent aller. On note d_i le déplacement de la boule i , alors $d_1 = d_2 = d_3 = 0$. La boule 4 désire aller dans l'urne 9, celle-ci est occupée par la boule 2, par conséquent elle se déplace jusqu'à l'urne 10 et $d_4 = 1$. La boule 5 désire aussi aller dans l'urne 9; ceci n'étant pas possible, elle se déplace jusqu'à l'urne 10. Cependant cette urne étant aussi occupée, elle se déplace une fois encore et ainsi de suite jusqu'à rencontrer une place libre (l'urne 2) et $d_5 = 3$. De même on voit que $d_6 = 1$, $d_7 = 1$, $d_8 = 0$. Le déplacement total est donc de $1 + 3 + 1 + 1 = 6$. Après avoir placé toutes les boules, il reste $N = m - n$ urnes vides. Ce qui partitionne les urnes occupées en blocs d'urnes consécutives. Pour facilité l'étude, on considère que la première urne vide à la fin d'un bloc fait partie de ce bloc. Dans l'exemple précédent, il y a deux blocs, l'un contient les urnes 9, 10, 1, 2, 3 (urnes occupées) et l'urne vide 4, l'autre contient les urnes occupées 5, 6, 7 et l'urne vide 8.

S. Janson [137] a montré que la longueur des blocs (en tenant compte de l'urne vide) et la somme des déplacements à l'intérieur de chaque bloc sont distribuées comme $(X_1, Y_1), \dots, (X_N, Y_N)$ ($N = m - n$)

conditionnées par $\sum_{i=1}^N X_i = m$, où (X_i, Y_i) sont des copies i.i.d. d'un couple (X, Y) de variables aléatoires où X est une variable aléatoire de loi de Borel (voir Equation (3.60)) et de plus, la loi conditionnelle de Y sachant $X = l$ a la même distribution que $d_{l, l-1}$.

5. La statistique de Bose-Einstein

Cet exemple a été emprunté par Janson à Holst [129]. Considérons N urnes dans lesquelles on lance n boules indistinguables de telle sorte que chaque réalisation indistinguishable arrive avec la même probabilité; c'est-à-dire

$$1 / \binom{n + N - 1}{n},$$

voir par exemple [95]. Soit Z_k le nombre de boules dans l'urne k . Il est bien connu que (Z_1, \dots, Z_N) a la même distribution que (X_1, \dots, X_N) conditionné par $\sum_{i=1}^N X_i = n$, où X_1, \dots, X_N sont des variables aléatoires i.i.d. de loi géométrique. On peut alors par exemple considérer $Y_i = h(X_i)$.

L'idée de la preuve de S. Janson est d'appliquer le théorème de Paul Levy. Il s'agit donc de pouvoir décrire le comportement asymptotique de la fonction caractéristique de \mathcal{L}_n . Pour cela S. Janson utilise une jolie représentation intégrale de cette fonction caractéristique conditionnée. Cette représentation est une conséquence immédiate d'un lemme dû à Bartlett. Pour toute variable aléatoire Z , sa fonction caractéristique est définie par $\varphi_Z(t) := \mathbb{E}(e^{itZ})$.

Lemme 3.2.2 (Formule de Bartlett, voir Equation (16) dans [19]). *Soit Z une variable aléatoire à valeurs entières et W une variable aléatoire intégrable, alors pour tout k entier positif du support de Z ,*

$$\mathbb{E}[W|Z = k] = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \mathbb{E}[W \exp(itZ)] \exp(-ikt) dt}{\int_{-\pi}^{\pi} \varphi_Z(t) \exp(-ikt) dt}.$$

En prenant $W = T_n$ et $Z = S_n$, on obtient une représentation intégrale de la fonction caractéristique sur laquelle on peut faire des développements asymptotiques et en déduire un théorème central limite.

Deux questions naturelles

Une fois un théorème central limite établi, plusieurs questions naturelles se posent, comme par exemple

1. Peut-on quantifier la vitesse de convergence dans le TCL ?
2. Peut-on regarder les phénomènes à d'autres échelles que \sqrt{n} ?

Nous allons répondre à ces deux questions. La vitesse de convergence dans le TCL sera précisée à l'aide d'un théorème de Berry-Esseen (voir Théorème 3.2.3). Un premier théorème de Berry-Esseen pour ce genre de modèle a été donné par Quine et Robinson [202]. Dans ce travail, les auteurs étudient le cas particulier du problème d'occupation où les variables $X^{(n)}$ sont des variables aléatoires de Poisson et $Y^{(n)} = \mathbf{1}_{\{X^{(n)}=0\}}$. A notre connaissance, c'est le seul résultat existant pour ce type de modèles. Dans ce qui suit nous établissons un théorème de Berry-Esseen (Théorème 3.2.3) qui couvre tous les exemples présentés ci-dessus. Ensuite, nous regarderons, nos modèles à l'échelle logarithmique des grandes et moyennes déviations (voir Théorèmes 3.2.3 3.2.4 3.2.5). La vitesse classique de grandes déviations pour les sommes de variables aléatoires i.i.d. est donnée par le théorème de Cramér (voir par exemple [83]). Elle vaut n . Nous allons obtenir deux sortes de vitesse différentes pour nos modèles conditionnés. D'une part, dans le Théorème 3.2.4 nous retrouvons la vitesse classique n pour les modèles pour lesquelles la transformée de Laplace de $(X_j^{(n)}, Y_j^{(n)})$ est bien définie (au moins pour les moyennes déviations dans un voisinage de $(0, 0)$). Notre approche consiste à se mettre en situation pour pouvoir appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. L'originalité de l'approche consiste à regarder une transformée double, Fourier en X et Laplace en Y . La partie Fourier permet de réécrire le conditionnement sous forme intégrale et la partie Laplace permet d'appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. L'hypothèse forte d'existence des transformées de Laplace n'est malheureusement pas satisfaite pour le modèle phare qu'est le hachage. Dans cet exemple la transformée de Laplace des variables Y n'est pas définie dans un voisinage de 0. Pour contourner ce problème, nous adoptons l'approche initiée dans les travaux de

Nagaev [184, 185], ce dernier établit des résultats de type grandes déviations pour des sommes de variables aléatoires dont les lois sont d'une part absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue et d'autre part dont la transformée de Laplace n'est pas définie dans un voisinage de 0. Nous avons donc établi un résultat de grandes déviations pour le modèle de hachage avec essais linéaires.

Lorsque les lois de $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ ne dépendent pas de n , le principe conditionnel de Gibbs ([59, 76, 83]) assure que \mathcal{L}_n converge faiblement vers une loi dégénérée concentrée sur un point χ qui dépend de la valeur conditionnante (voir [111, Corollary 2.2]). Dans le domaine d'attraction du théorème de Gibbs, des théorèmes généraux limites étudient le comportement de la somme conditionnée ([233, 129, 158]) et des développements asymptotiques sont donnés dans [126, 214].

Cadre et notations

Pour tout $n \geq 1$, on considère un couple de variables aléatoires $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ telles que $X^{(n)}$ est à valeurs entières et $Y^{(n)}$ à valeurs dans \mathbb{R} . Soit $(N_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ une suite d'entiers telle que $N_n \rightarrow +\infty$ lorsque n tend vers l'infini. Soit $(X_i^{(n)}, Y_i^{(n)})$ ($i = 1, 2, \dots, N_n$) un échantillon i.i.d. distribué comme $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ et posons

$$S_n := \sum_{i=1}^{N_n} X_i^{(n)} \quad \text{et} \quad T_n := \sum_{i=1}^{N_n} Y_i^{(n)}.$$

Soient $k_n \in \mathbb{Z}$ tel que $\mathbb{P}(S_n = k_n) > 0$ et U_n une variable aléatoire de même loi que la loi conditionnelle T_n sachant $S_n = k_n$. Dans la suite, nous présentons une borne de Berry-Esseen et des résultats de grandes déviations pour $(U_n)_{n \geq 1}$.

Borne de Berry-Esseen

Théorème 3.2.3 (Klein, Lagnoux, Petit [149]). *Supposons qu'il existe des constantes strictement positives $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5$, et c_6 telles que :*

1. $\tilde{c}_1 \leq \sigma_{X^{(n)}} := \text{Var}(X^{(n)})^{1/2} \leq c_1$;
2. $\rho_{X^{(n)}} := \mathbb{E} \left[|X^{(n)} - \mathbb{E}[X^{(n)}]|^3 \right] \leq c_2^3 \sigma_{X^{(n)}}^3$;
3. soit $Y'^{(n)} := Y^{(n)} - X^{(n)} \text{Cov}(X^{(n)}, Y^{(n)}) / \sigma_{X^{(n)}}^2$, il existe $\eta_0 > 0$ tel que, pour tout $s \in [-\pi, \pi]$ et $t \in [0, \eta_0]$,

$$\left| \mathbb{E} \left[e^{i(sX^{(n)} + tY'^{(n)})} \right] \right| \leq 1 - c_5 (\sigma_{X^{(n)}}^2 s^2 + \sigma_{Y'^{(n)}}^2 t^2);$$

4. $k_n = N_n \mathbb{E}[X^{(n)}] + O(\sigma_{X^{(n)}} N_n^{1/2})$ (rappelons que $k_n \in \mathbb{Z}$ et $\mathbb{P}(S_n = k_n) > 0$) ;
5. $\tilde{c}_3 \leq \sigma_{Y^{(n)}} := \text{Var}(Y^{(n)})^{1/2} \leq c_3$;
6. $\rho_{Y^{(n)}} := \mathbb{E} \left[|Y^{(n)} - \mathbb{E}[Y^{(n)}]|^3 \right] \leq c_4^3 \sigma_{Y^{(n)}}^3$;
7. le coefficient de corrélation $r_n := \text{Cov}(X^{(n)}, Y^{(n)}) \sigma_{X^{(n)}}^{-1} \sigma_{Y^{(n)}}^{-1}$ vérifie $|r_n| \leq c_6 < 1$, si bien que

$$\tau_n^2 := \sigma_{Y^{(n)}}^2 (1 - r_n^2) \geq \tilde{c}_2^2 (1 - c_6^2) > 0.$$

Alors les points suivants sont vérifiés.

1. Il existe $\tilde{c}_5 > 0$ tel que

$$\mathbb{P}(S_n = k_n) \geq \frac{\tilde{c}_5}{2\pi \sigma_{X^{(n)}} N_n^{1/2}}.$$

2. Pour $N_n \geq N_0 := \max(3, c_2^6, c_4^6)$, la loi conditionnelle de

$$N_n^{-1/2} \tau_n^{-1} (T_n - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \frac{\sigma_{Y^{(n)}}}{\sigma_{X^{(n)}}} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}]))$$

sachant $S_n = k_n$ vérifie

$$\sup_x \left| \mathbb{P} \left(\frac{U_n - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \sigma_{Y^{(n)}} \sigma_{X^{(n)}}^{-1} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}])}{N_n^{1/2} \tau_n} \leq x \right) - \Phi(x) \right| \leq \frac{C}{N_n^{1/2}}, \quad (3.61)$$

où Φ est la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite et C est une constante strictement positive dépendant de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$, et c_6 .

3. De plus, il existe des constantes strictement positives c_7 et c_8 dépendant uniquement de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$, et c_6 telles que

$$|\mathbb{E}[U_n] - N_n \mathbb{E}[Y^{(n)}] - r_n \frac{\sigma_{Y^{(n)}}}{\sigma_{X^{(n)}}} (k_n - N_n \mathbb{E}[X^{(n)}])| \leq c_7 \quad (3.62)$$

et

$$|\text{Var}(U_n) - N_n \tau_n^2| \leq c_8 N_n^{1/2}. \quad (3.63)$$

Si $N_n \geq \tilde{N}_0 := \max(N_0, 4c_8^2/\tilde{c}_3^2)$, on a aussi

$$\sup_x \left| \mathbb{P} \left(\frac{U_n - \mathbb{E}[U_n]}{\text{Var}(U_n)^{1/2}} \leq x \right) - \Phi(x) \right| \leq \frac{\tilde{C}}{N_n^{1/2}}, \quad (3.64)$$

où \tilde{C} est une constante dépendant de $\tilde{c}_1, c_1, c_2, \tilde{c}_3, c_3, c_4, c_5, \tilde{c}_5$ et c_6 .

Remarque 3.2.1.

1. L'hypothèse $N_n \rightarrow +\infty$ n'est là que pour assurer l'existence de la constante \tilde{c}_5 qui repose sur le théorème de convergence dominée de Lebesgue.
2. L'ensemble des hypothèses du Théorème 3.2.3 impliquent celle du théorème central limite dans [138, Theorem 2.1] (pas vraiment surprenant). Remarquons, que dans l'hypothèse 4, le conditionnement est à peu près égal à la valeur moyenne, exactement comme dans le théorème central limite dans [138, Theorem 2.3].
3. L'hypothèse 7 n'est pas très restrictive, elle est aisément vérifiée par tous les exemples considérés.

Comme cela a déjà été remarqué dans [138], le résultat devient bien plus simple lorsque les lois se stabilisent.

Corollaire 3.2.2. *Supposons que $(X^{(n)}, Y^{(n)}) \xrightarrow{(d)} (X, Y)$ lorsque $n \rightarrow \infty$ et que pour tout $r > 0$ fixé,*

$$\limsup_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} [|X^{(n)}|^r] < \infty \quad \text{et} \quad \limsup_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} [|Y^{(n)}|^r] < \infty.$$

Supposons de plus que X est de spam 1 et que Y n'est pas presque sûrement une fonction affine $c + dX$ de X , que k_n et N_n sont des entiers tels que $\mathbb{E}[X^{(n)}] = k_n/N_n$ et $N_n \rightarrow +\infty$. Alors, toutes les hypothèses du Théorème 3.2.3 sont vérifiées.

Ce corollaire s'applique aux exemples présentés au début de ce paragraphe (allocation aléatoire, processus de branchement, fôrets aléatoires et hachage, statistique de Bose-Einstein).

Principe de grandes déviations sous hypothèse d'existence de la transformée de Laplace

Le théorème de Gärtner-Ellis [83] permet d'obtenir des principes de grandes déviations lorsque la transformée de Laplace existe. Ainsi, une première idée est de remplacer la transformée de Fourier double intervenant dans la preuve du résultat de Janson par une transformée mixte Laplace-Fourier. La partie Fourier permet d'exprimer le conditionnement sous forme intégrale et la partie Laplace permet d'appliquer le théorème de Gärtner-Ellis. Nous avons alors obtenu avec F. Gamboa et C. Prieur les deux théorèmes suivants (Théorème 3.2.4 et Théorème 3.2.5 voir [111]).

On appelle le domaine de la transformée de Laplace d'une variable aléatoire Z l'ensemble $\text{dom } \psi_Z := \{\tau \in \mathbb{R} : [\exp(\tau Z)] < +\infty\}$. Si $\tau \in \text{dom } \psi_Z$, on peut alors définir $\psi_Z(\tau) := \ln[\exp(\tau Z)]$ comme le logarithme de la transformée de Laplace de Z . On notera R_Z l'ensemble des valeurs prises par ψ'_Z . Finalement, ψ_Z^* sera la transformée de Fenchel-Legendre de ψ_Z ([83, Définition 2.2.2 p. 26]).

On suppose que $(X^{(n)}, Y^{(n)})$ converge en loi vers (X, Y) ; où la limite X est une variable aléatoire à valeurs entières non essentiellement constante.

Théorème 3.2.4 (Gamboa, Klein, Prieur [111]). *Soient $k_n \in \mathbb{Z}, N_n \in \mathbb{N}^*, \lambda \in \mathbb{R}$ tels que $k_n/N_n \in R_{X^{(n)}} \rightarrow \lambda \in R_X$. Supposons que*

1. les fonctions $\psi_{X,Y}$ et ψ_{X_n, Y_n} sont essentiellement lisses et soit τ l'unique nombre réel tel que $\psi'_X(\tau) = \lambda$;
2. $\text{dom } \psi_Y = \text{dom } \psi_{Y^{(n)}} = \mathbb{R}$, et $\forall u \in \mathbb{R} \left| \mathbb{E} \left[e^{uY^{(n)}} - e^{uY} \right] \right| \rightarrow 0$;
3. Il existe $r > 0$, tel que $I_\tau := [\tau - r, \tau + r] \subset (\text{dom } \psi_X) \cap (\bigcap_{n \geq 1} \text{dom } \psi_{X^{(n)}})$ et

$$\forall u \in \mathbb{R}, \forall s \in I_\tau, \sup_{t \in \mathbb{R}} \left| \mathbb{E} \left[e^{(it+s)X^{(n)} + uY^{(n)}} - e^{(it+s)X + uY} \right] \right| \rightarrow 0. \quad (3.65)$$

Alors la distribution de (T_n/N_n) conditionnée par l'événement $\{S_n = k_n\}$ vérifie un principe de grandes déviations de bonne fonction de taux $\psi_{X,Y}^*(\lambda, \cdot) - \psi_X^*(\lambda)$ à la vitesse $(N_n)^{-1}$.

Déviations modérées La fonction de taux intervenant dans le principe de déviations modérées du Théorème 3.2.5 fait intervenir un terme de variance résiduel α_ξ^2 . Afin de définir rigoureusement ce terme de variance, nous avons besoin de considérer (comme souvent lorsque l'on s'intéresse à des principes de grandes déviations) à un (subtil) changement de loi. Pour cela, prenons ξ dans l'intérieur de $\text{dom } \psi_X$ et considérons le vecteur aléatoire $(\check{X}_\xi, \check{Y}_\xi)$ dont la loi est donnée pour $k \in \mathbb{N}$ et tout borélien A de \mathbb{R} par

$$(\check{X}_\xi = k, \check{Y}_\xi \in A) = \exp[-\psi_X(\xi) + k\xi] (X = k, Y \in A). \quad (3.66)$$

Soit α_ξ^2 la variance du résidu $\check{\varepsilon}_\xi$ pour la régression linéaire de \check{Y}_ξ sur \check{X}_ξ :

$$\check{\varepsilon}_\xi := (\check{Y}_\xi - \mathbb{E}(\check{Y}_\xi)) - \frac{\text{cov}(\check{X}_\xi, \check{Y}_\xi)}{\text{var}(\check{X}_\xi)} (\check{X}_\xi - \mathbb{E}(\check{X}_\xi)). \quad (3.67)$$

On pourra noter que cette variance est la variance limite dans le théorème central limite démontré par S. Janson (Theorem 2.1 dans [138]). Sa forme explicite est alors

$$\alpha_\xi^2 = \text{var}(\check{Y}_\xi) - \text{Cov}(\check{X}_\xi, \check{Y}_\xi)^2 / \text{var}(\check{X}_\xi).$$

On peut alors obtenir le théorème suivant de déviations modérées.

Théorème 3.2.5 (Gamboa, Klein, Prieur [111]). *Soient $\lambda \in \mathbb{R}$ et $k_n \in \mathbb{Z}, N_n \in \mathbb{N}^*$ tels que λ (resp. k_n/N_n) appartienne à R_X (resp. $R_{X^{(n)}}$) et $k_n/N_n \rightarrow \lambda$. Supposons que*

1. les fonctions $\psi_{X,Y}$ et ψ_{X_n, Y_n} sont essentiellement lisses;

2. il existe $r_0 > 0$ tel que

$$B_0 :=] - r_0, r_0[\subset (\text{dom} \psi_Y) \cap (\cap_{n \geq 1} \text{dom} \psi_{Y^{(n)}}),$$

et soit τ (resp. τ_n) l'unique réel tel que $\psi'_X(\tau) = \lambda$ (resp. $\psi'_{X^{(n)}}(\tau_n) = k_n/N_n$);

3. il existe $r > 0$ tel que $I_r := [\tau - r, \tau + r] \subset (\text{dom} \psi_X) \cap (\cap_{n \geq 1} \text{dom} \psi_{X^{(n)}})$ et

$$\forall s \in I_r, \sup_{t \in \mathbb{R}} \left| \mathbb{E} \left[e^{(it+s)X^{(n)}} - e^{(it+s)X} \right] \right| \rightarrow 0, \quad (3.68)$$

$$\sup_n \sup_{(s,v) \in I_r \times B_0} \mathbb{E} \left(e^{sX^{(n)} + v(Y^{(n)} - \mathbb{E}(\tilde{Y}_{\tau_n}^{(n)}))} \right) < \infty; \quad (3.69)$$

4. (a_n) vérifie $a_n N_n \rightarrow +\infty$.

Alors la distribution de $\left(\sqrt{\frac{a_n}{N_n}} \left(T_n - N_n \mathbb{E}(\tilde{Y}_{\tau_n}^{(n)}) \right) \right)$ conditionnée par l'événement $\{S_n = k_n\}$ satisfait à un principe de déviations modérées de bonne fonction de taux $J(\cdot) = \frac{(\cdot)^2}{2\alpha^2}$ à la vitesse a_n .

Principe de grandes déviations lorsque la transformée de Laplace n'est pas définie

Les théorèmes précédents reposent sur l'hypothèse forte d'existence de la transformée de Laplace sur \mathbb{R} (ou au minimum sur un voisinage de 0) pour la variable aléatoire Y (voir par exemple l'hypothèse $\text{dom} \psi_Y = \text{dom} \psi_{Y^{(n)}} = \mathbb{R}$ du Théorème 3.2.4). Ce genre d'hypothèses apparaît par exemple dans le théorème de Gärtner-Ellis, mais cela ne permet pas de traiter le cas des variables aléatoires ayant des queues de distributions dites lourdes. La motivation de ces travaux provenant de l'étude de certaines structures combinatoires (voir par exemple celles décrites ci-dessus), les Théorèmes 3.2.4 et 3.2.5 seraient satisfaisants s'ils permettaient de traiter tous les exemples présentés. Malheureusement, l'exemple le plus intéressant, le hachage avec essais linéaires, ne vérifie pas les hypothèses des théorèmes. En effet, dans cet exemple la transformée de Laplace de la variable Y est seulement définie sur $] - \infty, 0]$ et donc pas dans un voisinage de 0.

Le résultat qui suit permet de traiter le cas du hachage, il a fait l'objet d'une collaboration avec Agnès Lagnoux et Pierre Petit [149].

De façon intuitive, on peut distinguer plusieurs régimes pour les principes de grandes déviations.

1. Lorsque la transformée de Laplace est définie (situation décrite par le théorème de Gärtner-Ellis), toutes les variables jouent plus ou moins le même rôle et c'est la somme (ou la moyenne) des variables qui gouverne les grandes déviations. C'est-à-dire que pour avoir un événement rare (par exemple que S_n soit très grand, il faut que toutes les variables soient très grandes).
2. Lorsque les variables sont à queues très lourdes, les grandes déviations sont gouvernées par la plus grande des variables. C'est-à-dire que pour avoir un événement rare (par exemple que S_n soit très grand, il faut que $\max(X_i, i = 1, \dots, n)$ soit très grand [181]).
3. Lorsque les variables sont à queues lourdes mais pas trop (par exemple existence de tous les moments mais pas de la transformée de Laplace), nous sommes dans un régime intermédiaire. Le hachage rentre dans ce cadre.

Avec Agnès et Pierre, toujours dans le cadre de sommes conditionnées, nous avons donc étudié le cas 3. Tout repose sur d'anciens travaux de Nagaev [184, 185] dans lequel l'auteur décrit le comportement asymptotique précis de $\mathbb{P}(X_1 + \dots + X_n \geq x)$ en fonction du comportement asymptotique de $\mathbb{P}(X_1 \geq x)$ lorsque les variables $(X_i)_{1 \leq i \leq n}$ sont i.i.d. à valeurs réelles. Nous nous sommes donc fortement inspirés de ces travaux et avons obtenu des résultats de grandes déviations lorsque la transformée de Laplace n'est pas définie. On considère à nouveau le modèle du hachage et on rappelle que $d_{m,n}$ est la variable comptant le nombre de déplacement pour placer n boules dans m urnes.

Proposition 3.2.2 (Klein, Lagnoux, Petit [149]). *Supposons que λ le paramètre de la loi de Borel (loi de X) vérifie $\kappa := -\log(\lambda) - 1 \leq \log(2)$. Alors*

$$-\beta \leq \liminf_{y \rightarrow +\infty} \frac{1}{\sqrt{y}} \log \mathbb{P}(Y \geq y) \leq \limsup_{y \rightarrow +\infty} \frac{1}{\sqrt{y}} \log \mathbb{P}(Y \geq y) \leq -\alpha, \quad (3.70)$$

avec

$$\alpha := \kappa\sqrt{2} \quad \text{et} \quad \beta := 2\kappa\sqrt{\left(1 + \frac{1}{\kappa}\right)\left(1 + \frac{1 + \log 2}{\kappa}\right)}.$$

Maintenant, pour tout $n \geq 1$, soient m_n et n_n des entiers vérifiant $n_n < m_n$, et $N_n := m_n - n_n$. Supposons que $m_n/N_n \rightarrow a \in [1, +\infty[$. Soit $\lambda_n := (n_n/m_n) \exp(-n_n/m_n) \in [0, e^{-1}[$. Ainsi $\lambda_n \rightarrow (1 - 1/a) \exp(-1 + 1/a) =: \lambda$. Afin de pouvoir appliquer la Proposition 3.2.2, on suppose que $\lambda \geq (2e)^{-1}$. Soient maintenant, $(X_i^{(n)}, Y_i^{(n)})_{i=1,2,\dots,N_n}$ des copies i.i.d. de $(X^{(n)}, Y^{(n)})$, $X^{(n)}$ suivant une loi de Borel de paramètre λ_n (si bien $\mathbb{E}[X^{(n)}] = m_n/N_n$), et $Y^{(n)}$ conditionnée par $X^{(n)} = l$ est distribuée comme $d_{l,l-1}$. Soient

$$S_n := \sum_{i=1}^{N_n} X_i^{(n)} \quad \text{et} \quad T_n := \sum_{i=1}^{N_n} Y_i^{(n)}.$$

Le déplacement total d_{m_n, n_n} a alors la même distribution que la loi conditionnelle de T_n sachant $S_n = m_n$.

Proposition 3.2.3 (Klein, Lagnoux, Petit [149]. Grandes déviations pour le hachage avec essais linéaires). Soient α et β définis dans la Proposition 3.2.2 et $k_n = m_n$, si

1. $\log(\sigma_{X^{(n)}}) = o(N_n^{1/2})$ où $\sigma_{X^{(n)}} := \text{Var}(X^{(n)})^{1/2}$;
2. $\rho_{X^{(n)}} := \mathbb{E}\left[|X^{(n)} - \mathbb{E}[X^{(n)}]|^3\right] = o(N_n^{1/2}\sigma_{X^{(n)}}^3)$;
3. il existe $c > 0$ telle que pour tout $n \geq 1$ et $s \in [-\pi, \pi]$,

$$|\mathbb{E}\left[e^{isX^{(n)}}\right]| \leq 1 - c\sigma_{X^{(n)}}^2 s^2;$$

4. $k_n = N_n \mathbb{E}[X^{(n)}] + O(\sigma_{X^{(n)}} N_n^{1/2})$;
5. $\text{Var}(Y^{(n)}) = o(N_n^{1/2})$.

Alors, pour tout $y > 0$,

$$\begin{aligned} -\beta\sqrt{y} &\leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{N_n}} \log \mathbb{P}(d_{m_n, n_n} - \mathbb{E}[d_{m_n, n_n}] \geq N_n y) \\ &\leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{N_n}} \log \mathbb{P}(d_{m_n, n_n} - \mathbb{E}[d_{m_n, n_n}] \geq N_n y) \leq -\alpha\sqrt{y}. \end{aligned}$$

Chapitre 4

Moyennes de Fréchet - Barycentres sur l'espace de Wasserstein

Ce chapitre regroupe les travaux effectués d'une part autour de l'existence et de la caractérisation des moyennes de Fréchet dans l'espace de Wasserstein [37] et d'autre part sur la construction d'une analyse en composantes principales dans l'espace de Wasserstein en dimension un [36]. Le premier travail [37] effectué en collaboration avec Jérémie Bigot est actuellement soumis et le second en collaboration avec Jérémie Bigot, Raúl Gouet et Alfredo López [36] a été publié aux annales de L'IHP. Dans la Section 4.1, nous démontrons l'existence et l'unicité d'une moyenne de Fréchet pour un modèle très particulier de variables aléatoires à valeurs dans l'espace de Wasserstein. La restriction majeure de notre travail est que nous travaillons dans un cadre de compacité. Ce travail utilise les résultats de Agueh et Carlier [2]. Dans la Section 4.2, nous définissons et étudions une notion d'analyse en composantes principales géodésiques dans l'espace de Wasserstein sur \mathbb{R} .

4.1 Caractérisation des moyennes de Fréchet dans l'espace de Wasserstein

4.1.1 Introduction

Dans ce travail, on s'intéresse au problème de caractériser le barycentre de mesures de probabilités aléatoires sur \mathbb{R}^d . L'ensemble des mesures de Radon de probabilités muni de la distance 2-Wasserstein n'est pas un espace localement convexe. Par suite, il est naturel d'utiliser la notion de moyenne de Fréchet [103] pour définir une notion de barycentre pour des mesures de probabilités aléatoires. Cette notion de moyenne est une extension de la notion usuelle euclidienne de barycentre à des espaces non linéaires munis d'une métrique non-euclidienne. Si \mathbf{Y} est une variable aléatoire de loi \mathbb{P} à valeurs dans un espace métrique $(\mathcal{M}, d_{\mathcal{M}})$, la moyenne de Fréchet (qui n'existe pas forcément, et n'est pas non plus forcément unique) de la loi \mathbb{P} est un point $m^* \in \mathcal{M}$ qui est un minimiseur global de la fonctionnelle

$$J(m) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{M}} d_{\mathcal{M}}^2(m, y) d\mathbb{P}(y) \quad \text{i.e.} \quad m^* \in \underset{m \in \mathcal{M}}{\text{Argmin}} J(m).$$

Dans la suite, nous utiliserons indifféremment la terminologie moyenne de Fréchet ou barycentre. Une moyenne de Fréchet empirique d'un échantillon i.i.d. $\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_n$ de loi \mathbb{P} est

$$\bar{\mathbf{Y}}_n \in \underset{m \in \mathcal{M}}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} d_{\mathcal{M}}^2(m, \mathbf{Y}_j).$$

Un des premiers exemples de moyennes de Fréchet pour des variables aléatoires appartenant à des espaces métriques non-linéaires est celui du calcul de la moyenne de formes planaires dans l'espace des formes de Kendall [143]. Ce calcul conduit à la notion de moyenne procuste étudiée dans [114]. De nombreuses propriétés des moyennes de Fréchet dans les sous-variétés riemanniennes de dimensions finies ont été étudiées (voir entre autres [1, 12, 26, 27, 132]). Pour les variables aléatoires vivant dans des espaces à courbures négatives, une étude approfondie et de nombreux résultats ont été obtenus et peuvent être trouvés dans [236]. Cependant, il n'existe pas énormément de travaux portant sur les moyennes de Fréchet dans des espaces de dimension infinie et ne vérifiant pas la propriété de courbure négative définie dans [236].

Une famille paramétrique de mesures de probabilités aléatoires

Dans ce travail, nous considérons le cas où $\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu}$ est une mesure de probabilité aléatoire de l'espace 2-Wasserstein sur un ensemble compact Ω de \mathbb{R}^d . On suppose que nos mesures aléatoires appartiennent à un modèle paramétrique de mesures de probabilités que nous décrivons maintenant. Soit $\mathcal{M}_+(\Omega)$ l'ensemble des mesures de Radon de probabilités sur Ω muni de la distance de Wasserstein d'ordre 2 notée d_{W_2} . Soit $\Phi : (\mathbb{R}^p, \mathcal{B}(\mathbb{R}^p)) \rightarrow (\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ une application où $\mathcal{B}(\mathbb{R}^p)$ est la tribu de Borel de \mathbb{R}^p et $\mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega))$ celle de $\mathcal{M}_+(\Omega)$ pour la topologie induite par d_{W_2} . Soit maintenant Θ un ensemble mesurable de \mathbb{R}^p ($p \geq 1$), et on considère l'ensemble paramétrique de mesures de probabilités $\{\mu_\theta = \Phi(\theta), \theta \in \Theta\}$. Nous supposons de plus que pour tout $\theta \in \Theta$, la mesure $\mu_\theta = \Phi(\theta) \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Il s'en suit que si $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$ est un vecteur aléatoire de loi \mathbb{P}_Θ admettant une densité $g : \Theta \rightarrow \mathbb{R}_+$, alors $\mu_{\boldsymbol{\theta}} = \Phi(\boldsymbol{\theta})$ est une mesure de probabilité aléatoire de loi \mathbb{P}_g sur $(\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ qui est la mesure image définie par

$$\mathbb{P}_g(B) = \mathbb{P}_\Theta(\Phi^{-1}(B)), \text{ pour tout } B \in \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)). \quad (4.1)$$

Nous proposons d'étudier certaines propriétés du barycentre μ^* de $\mu_{\boldsymbol{\theta}}$ défini comme la moyenne de Fréchet suivante

$$\mu^* = \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} J(\nu), \quad (4.2)$$

où

$$J(\nu) = \int_{\mathcal{M}_+(\Omega)} \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu) d\mathbb{P}_g(\mu) = \mathbb{E} \left(\frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\boldsymbol{\theta}}) \right) = \int_{\Theta} \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta) g(\theta) d\theta, \quad \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega).$$

Si elle existe et est unique, la mesure μ^* sera nommée le barycentre (ou barycentre théorique) de la mesure aléatoire $\mu_{\boldsymbol{\theta}}$ de loi \mathbb{P}_g . La version empirique du barycentre μ^* est le barycentre $\bar{\mu}_n$ défini par

$$\bar{\mu}_n = \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\boldsymbol{\theta}_i}), \quad (4.3)$$

où $\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_n$ est un vecteur aléatoire i.i.d. dans Θ de densité g .

Résultats principaux

Le résultat principal de cette partie est la caractérisation explicite du barycentre μ^* que l'on peut décrire de la manière suivante. Soit $\mu_0 \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ une mesure de référence fixée absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Soit $T_{\boldsymbol{\theta}} : \Omega \rightarrow \Omega$ le plan de transport optimal de μ_0 sur $\mu_{\boldsymbol{\theta}}$ (i.e. $\mu_{\boldsymbol{\theta}} = T_{\boldsymbol{\theta}} \# \mu_0$, où $T_{\boldsymbol{\theta}} \# \mu_0$ est la mesure image de μ_0 par $T_{\boldsymbol{\theta}}$, on a utilisé la notation venant du monde du transport optimal mais gardé la terminologie mesure image et pas mesure poussée vers l'avant). Si pour tout $x \in \Omega$, $\mathbb{E}(T_{\boldsymbol{\theta}}(x)) = x$ alors μ_0 est le barycentre μ^* et on a

$$\inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(|T_{\boldsymbol{\theta}}(x) - x|^2) d\mu^*(x) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_{\Theta} (|T_{\boldsymbol{\theta}}(x) - x|^2) g(\theta) d\theta d\mu^*(x).$$

Ce résultat peut se réécrire comme suit $\mu^* = \bar{T} \# \mu_0$, où $\bar{T} = \mathbb{E}(T_{\boldsymbol{\theta}})$ est l'application définie pour tout $x \in \Omega$ par $\bar{T}(x) = \mathbb{E}(T_{\boldsymbol{\theta}}(x))$. Cela suggère donc que moyenniser dans l'espace de Wasserstein reviendrait (il

y a bien un conditionnel ici) à prendre la moyenne (au sens usuel) de la carte de transport optimal T_{θ} par rapport à la mesure de référence μ_0 . Malheureusement, ce très joli résultat n'est en général pas vrai lorsque $\mathbb{E}(T_{\theta}) \neq I$ où $I = \Omega \rightarrow \Omega$ est l'identité de Ω . Cependant, nous allons donner des conditions suffisantes (différentes de la condition déjà énoncée $\mathbb{E}(T_{\theta}) = I$) sous lesquelles on ait

$$\mu^* = \bar{T} \# \mu_0, \text{ où } \bar{T} = \mathbb{E}(T_{\theta}). \quad (4.4)$$

Un résultat similaire a été établi dans [40] pour le barycentre empirique. Il y est montré que

$$\bar{\mu}_n = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_{\theta_i} \right) \# \mu_0, \quad (4.5)$$

lorsque les plans de transports optimaux T_{θ_i} appartiennent à une classe \mathcal{C} dite admissible (Definition 4.2 de [40]). La classe \mathcal{C} est dite admissible s'il existe i_0 pour lequel $T_{\theta_{i_0}} = I$ et si pour tout $1 \leq i \leq n$, T_{θ_i} est une bijection et si la composition $T_{\theta_i} \circ T_{\theta_j}^{-1}$ de deux plans de transports optimaux dans la classe reste optimale.

L'extension du résultat de [40] du barycentre empirique au barycentre théorique n'avait pas encore été faite. Dans ce qui suit nous ne supposons pas lorsque $\bar{T} = \mathbb{E}(T_{\theta}) \neq I$, que la collection de plans est une classe admissible, pour prouver que $\mu^* = \bar{T} \# \mu_0$. En effet, l'Equation (4.4) sera essentiellement une conséquence que $T_{\theta} \circ \bar{T}^{-1}$ est un plan optimal pour tout $\theta \in \Theta$. L'Equation (4.4) n'est pas difficile à obtenir en dimension $d = 1$. C'est bien plus difficile lorsque $d \geq 2$. Le point clé de l'étude en dimension $d \geq 2$ est une formulation duale du problème d'optimisation (4.2) qui permet de caractériser précisément certaines propriétés du barycentre théorique. Celles-ci sont alors utilisées pour prouver l'Equation (4.4). Nous nous sommes inspirés des arguments de dualité développés dans [2] pour la caractérisation du barycentre empirique. Ainsi, notre approche est fortement connectée à la théorie du transport optimal et au problème de Monge-Kantorovitch par le biais d'arguments de dualité et d'analyse convexe (voir [249] pour plus de détails sur ces sujets).

Une seconde contribution a consisté à savoir si cette notion de barycentre dans l'espace de Wasserstein était utile pour l'analyse statistique des modèles de déformation en théorie du signal et en imagerie. Les modèles statistiques de déformation sont très fréquemment utilisés pour analyser une suite de signaux ou d'images aléatoires ayant une certaine variabilité en espace et en temps (le lecteur intéressé trouvera un état de l'art sur les modèles de déformation dans [6]). Dans de tels contextes, il est essentiel d'avoir en main une notion cohérente de moyenne. Nous étudions donc un modèle couramment utilisé pour étudier de tels phénomènes. On se donne des mesures aléatoires μ_{θ} dont les densités q_{θ} suivent le modèle semi-paramétrique de déformation suivant

$$q_{\theta}(x) = \left| \det \left(D\varphi_{\theta}^{-1} \right) (x) \right| q_0 \left(\varphi_{\theta}^{-1}(x) \right) \quad x \in \Omega, \quad (4.6)$$

où $\varphi_{\theta} : \Omega \rightarrow \Omega$ est un difféomorphisme aléatoire, $\det \left(D\varphi_{\theta}^{-1} \right) (x)$ est le déterminant de sa matrice jacobienne au point x et q_0 est une densité de référence fixée. Dans le modèle (4.6), il semble naturel de définir la moyenne de q_{θ} comme la densité \bar{q} définie par

$$\bar{q}(x) = \left| \det \left(D\bar{\varphi}^{-1} \right) (x) \right| q_0 \left(\bar{\varphi}^{-1}(x) \right) \quad x \in \Omega,$$

où $\bar{\varphi} : \Omega \rightarrow \Omega$ est défini par $\bar{\varphi}(x) = \mathbb{E} \left(\varphi_{\theta}(x) \right) = \int_{\Omega} \varphi_{\theta}(x) g(\theta) d\theta$, $x \in \Omega$. Nous allons donc proposer des conditions suffisantes sur le difféomorphisme aléatoire φ_{θ} sous lesquelles la mesure $\bar{\mu}$ de densité \bar{q} est exactement le barycentre empirique dans l'espace de Wasserstein de la mesure aléatoire μ_{θ} .

Finalement, en tant que statisticiens, il nous fallait évidemment étudier la convergence du barycentre empirique $\bar{\mu}_n$ vers le barycentre théorique μ^* lorsque le nombre de mesures tend vers l'infini.

Quelques éléments bibliographiques

Une notion similaire, à celle développée ici, de barycentre théorique et ses rapports avec le transport optimal a été étudiée dans [190]. En particulier, afin d'étudier l'existence et l'unicité de μ^* , il y est aussi considéré une

classe paramétrique de mesures de probabilités, où l'espace des paramètres Θ est uni-dimensionnel. Quelques généralisations de ces notions pour des mesures de probabilités définies sur des sous-variétés Riemanniennes munies de la distance de Wasserstein ont été proposées par [115] et par [144]. Une caractérisation détaillée des barycentres empiriques (valable dans un cadre bien plus général que le notre), en terme d'existence, d'unicité, de régularité et aussi en liaison avec le problème des marginales en transport optimal peut-être trouvée dans [2].

Dans la littérature, que ce soit en traitement du signal ou en imagerie, il existe de nombreuses applications de la notion de Barycentre dans l'espace de Wasserstein. Par exemple, elle a été utilisée avec succès en imagerie pour l'analyse de texture [41, 203]. Il existe aussi un intérêt grandissant pour développer des algorithmes efficaces pour calculer des barycentres empiriques, avec de nombreuses applications en imagerie [22, 78]. La théorie du transport optimal s'est montrée très efficace pour étudier la déformation d'images [219, 121]. Certaines propriétés du barycentre dans l'espace de 2-Wasserstein pour des mesures aléatoires issues d'un modèle similaire à (4.6) ont été étudiées [40]. Afin d'étudier le "registration problem of distributions," l'utilisation de modèles semi paramétriques pour des densités du type (4.6) a aussi été considéré par [3].

La suite est organisée comme suit. Nous présentons dans la Section 4.1.2, le cadre de notre travail et discutons de l'existence et de l'unicité du barycentre théorique. La Section 4.1.3 est consacrée à l'étude de la dimension un. La formulation duale du problème d'optimisation (4.2) fait l'objet de la Section 4.1.4. La section 4.1.5 donne une caractérisation explicite du barycentre à l'aide de la formulation duale de la section précédente. Nous présentons dans la Section 4.1.6, une application aux modèles statistiques de déformations. L'étude de la convergence du barycentre empirique vers le barycentre théorique est faite dans la Section 4.1.7. Quelques perspectives seront données dans la Section 4.1.8.

4.1.2 Existence et unicité du barycentre théorique

Définitions et notations

Les lettres en gras $\mathbf{Y}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\theta}, \dots$ seront réservées aux objets aléatoires. La norme euclidienne d'un vecteur $x \in \mathbb{R}^m$ sera notée $|x|$ et le produit scalaire de \mathbb{R}^m par $\langle x, y \rangle$, $\mathcal{M}_+(\Omega)$ est l'ensemble des mesures de Radon de probabilités sur Ω . Les deux hypothèses qui suivent seront supposées vérifiées dans toute la suite.

Hypothèse 4.1.1. L'ensemble $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est compact.

Hypothèse 4.1.2. L'application $\Phi : (\Theta \subset \mathbb{R}^p, \mathcal{B}(\mathbb{R}^p)) \rightarrow (\mathcal{M}_+(\Omega), \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega)))$ est mesurable. De plus, pour tout $\theta \in \Theta$, la mesure $\mu_\theta = \Phi(\theta) \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d .

Le carré de la distance 2-Wasserstein entre deux mesures de probabilités $\mu, \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ est

$$d_{W_2}^2(\mu, \nu) := \inf_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \left\{ \int_{\Omega \times \Omega} |x - y|^2 d\gamma(x, y) \right\}, \quad (4.7)$$

où $\Pi(\mu, \nu)$ est l'ensemble des mesures de probabilités sur $\Omega \times \Omega$ de marginales μ et ν (voir par exemple [249]). L'application $\tilde{\gamma} \in \Pi(\mu, \nu)$ est un plan de transport optimal entre μ et ν si

$$d_{W_2}^2(\mu, \nu) = \int_{\Omega \times \Omega} |x - y|^2 d\tilde{\gamma}(x, y).$$

Soit $T : \Omega \rightarrow \Omega$ une application mesurable et soit $\mu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$, la mesure image de μ par T sera notée $T\#\mu$, elle est définie par dualité par

$$\int_{\Omega} f(x) d(T\#\mu)(x) = \int_{\Omega} f(T(x)) d\mu(x), \quad \text{pour toute fonction continue et bornée } f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}.$$

Nous rappelons le résultat de Brenier permettant de caractériser les plans de transports optimaux (voir [249] ou Proposition 3.3 de [2]).

Proposition 4.1.1 (Brenier). *Soit $\mu, \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$. Alors $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ est un plan de transport optimal entre μ et ν si et seulement si le support de γ est inclus dans le graphe $\partial\phi$ de la sous-différentielle d'une fonction convexe et semi-continue inférieurement ϕ vérifiant*

$$\phi = \operatorname{Argmin}_{\psi \in \mathcal{C}} \left\{ \int_{\Omega} \psi(x) d\mu(x) + \int_{\Omega} \psi^*(x) d\nu(x) \right\},$$

où $\psi^*(x) = \sup_{y \in \Omega} \{\langle x, y \rangle - \psi(y)\}$ est le conjugué convexe de ψ , et \mathcal{C} est l'ensemble des "proper" fonctions convexes $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ qui sont semi-continues inférieurement. Si μ admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d , alors, il existe un unique transport optimal $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ qui est de la forme $\gamma = (id, T)\#\mu$ où $T = \nabla\phi$ (le gradient de ϕ) est appelé plan de transport optimal entre μ et ν . L'unicité est à comprendre que si $\nabla\phi\#\mu = \nabla\psi\#\mu$, où $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction convexe semi continue inférieurement, alors $\nabla\phi = \nabla\psi$ μ -p.p. De plus on a

$$d_{W_2}^2(\mu, \nu) = \int_{\Omega} |\nabla\phi(x) - x|^2 d\mu(x).$$

A propos de la mesurabilité de T_θ

La définition de la fonctionnelle $J(\nu)$ dans le problème d'optimisation (4.2), fait apparaître une intégration par rapport à θ de T_θ . Ainsi lorsque l'on veut donner un sens à l'existence du barycentre théorique, il est nécessaire que l'application $(x, \theta) \mapsto T_\theta(x)$ soit mesurable. Ce problème n'apparaissait pas chez [2] pour la définition du barycentre empirique car alors l'intégrale est une simple somme finie.

Soit μ_0 une mesure de référence fixée absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Pour tout $\theta \in \Theta$, $T_\theta(x)$ est le plan de transport optimal de μ_0 sur μ_θ . La Proposition 4.1.1 assure qu'une telle application existe, et que c'est l'unique μ_0 p.p qui puisse être écrite comme le gradient d'une fonction ϕ_θ . A l'aide de l'hypothèse 4.1.2 et du Theorem 1.1 de [100], on peut alors affirmer qu'il existe une fonction $(\theta, x) \mapsto T(\theta, x)$ qui est mesurable pour la tribu $\mathcal{B}(\mathbb{R}^p) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega))$, et telle que pour \mathbb{P}_Θ presque tout $\theta \in \Theta$,

$$T(\theta, x) = T_\theta(x), \text{ pour } \mu_0\text{-p.p } x \in \Omega.$$

En particulier, l'application $(x, \theta) \mapsto T_\theta(x)$ est mesurable pour la tribu complétée pour la mesure $g(\theta)d\theta d\mu_0(x)$ de $\mathcal{B}(\mathbb{R}^p) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{M}_+(\Omega))$ (on rappelle que par hypothèses $d\mathbb{P}_\Theta(\theta) = g(\theta)d\theta$).

Existence et unicité de μ^*

Nous allons ici étudier l'existence et l'unicité du barycentre des mesures aléatoires μ_θ de loi \mathbb{P}_g définies par l'Equation (4.1). Cela revient à étudier la solution (s'il en existe) du problème d'optimisation (4.2).

Remarque 4.1.1 (A propos de l'existence de $J(\nu)$). Soit $\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$. L'intégrale définissant $J(\nu)$ existera dès que $\theta \mapsto d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta)g(\theta)$ sera une application mesurable. La mesurabilité étant assurée par l'hypothèse 4.1.2. De plus, comme Ω est compact (hypothèse 4.1.1), il s'ensuit que pour tout $\theta \in \Theta$, $d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta) \leq 4\delta^2(\Omega)$, où $\delta^2(\Omega) = \sup_{x \in \Omega} \{|x|^2\} < +\infty$. Ainsi, on a $J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Theta} d_{W_2}^2(\nu, \mu_\theta)g(\theta)d\theta \leq 2\delta^2(\Omega) < +\infty$, pour tout $\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$.

Proposition 4.1.2. *Si les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont satisfaites alors le problème d'optimisation (4.2) admet un unique minimiseur.*

La preuve de ce résultat découle d'argument standard. En particulier l'unicité est une conséquence directe de la stricte convexité de l'application $J : \mathcal{M}_+(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$, sous l'hypothèse 4.1.2 : i.e.

$$J(\lambda\mu + (1-\lambda)\nu) < \lambda J(\mu) + (1-\lambda)J(\nu), \text{ pour tout } \lambda \in]0, 1[\text{ et } \mu, \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega) \text{ avec } \mu \neq \nu. \quad (4.8)$$

Cette propriété est une conséquence du Theorem 2.9 dans [7] (ou Lemma 3.2.1 de [190]).

4.1.3 Barycentre pour des mesures de probabilités sur \mathbb{R}

On regarde ici le cas $d = 1$ et on étudie certaines propriétés du barycentre théorique μ^* de mesures aléatoires sur un compact Ω de \mathbb{R} . Le fait remarquable de la dimension 1 est le suivant : il existe une formule explicite pour calculer la distance de Wasserstein. En effet, si μ et ν sont deux éléments de $\mathcal{M}_+(\Omega)$ alors

$$d_{W_2}^2(\nu, \mu) = \int_0^1 |F_\nu^-(x) - F_\mu^-(x)|^2 dx, \quad (4.9)$$

où F_ν^- (resp. F_μ^-) est la fonction quantile de ν (resp. μ). Cette formule explicite pour la distance de Wasserstein permet de caractériser très simplement le barycentre des mesures aléatoires. En particulier, l'Equation (4.4) est toujours vraie si $d = 1$. Cela signifie que, en dimension 1, calculer le barycentre dans l'espace de Wasserstein revient à calculer les espérances (au sens usuel) des plans de transports optimaux d'une mesure de référence (non-aléatoire) μ_0 sur μ_θ .

Théorème 4.1.1 (Bigot, Klein [37]). *Soit μ_0 une mesure fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. Supposons que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont satisfaites. Soit $\mu_\theta = \Phi(\theta)$ une mesure aléatoire où θ est un vecteur aléatoire de Θ de densité g . Soit T_θ le plan de transport optimal de μ_0 vers μ_θ définie pour tout $x \in \Omega$ par $T_\theta(x) = F_{\mu_\theta}^{-1}(F_{\mu_0}(x))$, où $F_{\mu_\theta}^{-1}$ est la fonction quantile de μ_θ et F_{μ_0} la fonction de répartition de μ_0 .*

Alors, le barycentre de μ_θ existe, est unique et vérifie

$$\mu^* = \bar{T} \# \mu_0, \quad (4.10)$$

où $\bar{T} : \Omega \rightarrow \Omega$ est le plan de transport optimal de μ_0 sur μ^* définie par

$$\bar{T}(x) = \mathbb{E}(T_\theta(x)) = \int_{\Theta} T_\theta(x) g(\theta) d\theta, \text{ pour tout } x \in \Omega.$$

De plus, la fonction quantile de μ^* est donnée pour tout $y \in [0, 1]$ par

$$F_{\mu^*}^{-1}(y) = \mathbb{E}\left(F_{\mu_\theta}^{-1}(y)\right) = \int_{\Theta} F_{\mu_\theta}^{-1}(y) g(\theta) d\theta.$$

Ainsi, le barycentre μ^* ne dépend pas du choix μ_0 , et on a

$$\inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}\left(|\bar{T}_\theta(x) - x|^2\right) d\mu^*(x) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_{\Theta} |\bar{T}_\theta(x) - x|^2 g(\theta) d\theta d\mu^*(x), \quad (4.11)$$

où $\bar{T}_\theta = T_\theta \circ \bar{T}^{-1}$.

Nous allons maintenant illustrer ce théorème, en considérant, une construction d'un modèle simple de mesures de probabilités aléatoires sur un intervalle compact $\Omega \subset \mathbb{R}$.

- Fixons $\bar{\mu} \in \mathcal{M}_+(\Omega)$, de densité \bar{f} par rapport à la mesure de Lebesgue et de fonction de répartition (fdr) \bar{F} . On suppose la densité continue sur Ω et à support compact sur un sous-intervalle Ω_0 de Ω .
- Soit $\theta = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) \in]0, +\infty[\times \mathbb{R}$ est vecteur aléatoire de densité g tel que $\mathbf{a}x + \mathbf{b} \in \Omega$ pour tout $x \in \Omega_0$.
- Soit μ_θ la mesure de probabilité aléatoire de densité

$$f_\theta(x) = \frac{1}{\mathbf{a}} \bar{f}\left(\frac{x - \mathbf{b}}{\mathbf{a}}\right), \quad x \in \Omega,$$

où la densité \bar{f} a été prolongée par $\bar{f}(u) = 0$ lorsque $u \notin \Omega$.

Grâce à nos hypothèses, la densité f_θ est à support compact inclus dans un sous-intervalle de Ω . De plus, les fonctions de répartitions et de quantiles de μ_θ sont données par

$$F_{\mu_\theta}(x) = \bar{F}\left(\frac{x - \mathbf{b}}{\mathbf{a}}\right), \quad x \in \Omega \quad \text{et par} \quad F_{\mu_\theta}^{-1}(y) = \mathbf{a}\bar{F}^{-1}(y) + \mathbf{b}, \quad y \in [0, 1].$$

Le Théorème 4.1.1, assure que le barycentre de μ_{θ} est la mesure de probabilité μ^* dont la fonction quantile est donnée par

$$F_{\mu^*}^{-1}(y) = \mathbb{E}(\mathbf{a})\bar{F}^{-1}(y) + \mathbb{E}(\mathbf{b}), \quad y \in [0, 1].$$

Ainsi, μ^* a pour densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}

$$f^*(x) = \frac{1}{\mathbb{E}(\mathbf{a})} \bar{f}\left(\frac{x - \mathbb{E}(\mathbf{b})}{\mathbb{E}(\mathbf{a})}\right), \quad x \in \Omega.$$

De plus, si μ_0 est une mesure fixée de $\mathcal{M}_+(\Omega)$, absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, alors

$$\mu^* = T_0 \# \mu_0, \quad \text{où} \quad T_0(x) = \mathbb{E}(\mathbf{a})\bar{F}^{-1}(F_{\mu_0}(x)) + \mathbb{E}(\mathbf{b}), \quad x \in \Omega.$$

4.1.4 Formulation duale

Il existe deux difficultés majeures qui vont impliquer qu'une généralisation du Théorème 4.1.1 à la dimension $d \geq 2$ n'est pas si évidente que cela.

1. La formule (4.9) donnant une formule explicite de la distance de Wasserstein n'existe qu'en dimension $d = 1$.
2. Le fait que la composition de deux plans de transports optimaux soit encore optimale n'est vrai qu'en dimension $d = 1$.

Cependant, nous allons montrer dans la Section 4.1.5 que l'analogue du Théorème 4.1.1 peut être obtenu en dimension $d \geq 2$ (on va quand même être obligé de faire quelques hypothèses).

Nous allons adapter à notre modèle et à notre problème d'optimisation (4.2), la formulation duale proposée dans [2] pour étudier les propriétés du barycentre empirique. Cette approche permettra d'énoncer les résultats principaux de ce travail (ceux de la Section 4.1.5). Rappelons que le problème d'optimisation (4.2) est

$$(\mathcal{P}) \quad J_{\mathcal{P}} := \inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu), \quad \text{où} \quad J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Theta} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\theta}) g(\theta) d\theta. \quad (4.12)$$

Soit

– $X = C(\Omega, \mathbb{R})$, l'espace des fonctions continues $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ munie de la norme sup

$$\|f\|_X = \sup_{x \in \Omega} \{|f(x)|\}.$$

– $X' = \mathcal{M}(\Omega)$ le dual topologique de X .

– $f^{\Theta} = (f_{\theta})_{\theta \in \Theta} \in L^1(\Theta, X)$ désigne une application

$$\begin{cases} f^{\Theta} : \Theta & \rightarrow & X \\ & \theta & \mapsto & f_{\theta} \end{cases}$$

telle que pour tout $x \in \Omega$

$$\int_{\Theta} |f_{\theta}(x)| d\theta < +\infty.$$

Alors, en nous inspirant de [2], on introduit le problème d'optimisation dual suivant

$$(\mathcal{P}^*) \quad J_{\mathcal{P}^*} := \sup \left\{ \int_{\Theta} \int_{\Omega} S_{g(\theta)} f_{\theta}(x) d\mu_{\theta}(x) d\theta; f^{\Theta} \in L^1(\Theta, X) \text{ telle que } \int_{\Theta} f_{\theta}(x) d\theta = 0, \forall x \in \Omega \right\}, \quad (4.13)$$

où

$$S_{g(\theta)} f(x) := \inf_{y \in \Omega} \left\{ \frac{g(\theta)}{2} |x - y|^2 - f(y) \right\}, \quad \forall x \in \Omega \text{ et } f \in X.$$

On montre dans la suite que les deux problèmes (\mathcal{P}) et (\mathcal{P}^*) sont des problèmes duaux dans le sens où la valeur minimale de $J_{\mathcal{P}}$ pour le problème (\mathcal{P}) est égale à la valeur maximale de $J_{\mathcal{P}^*}$ pour le problème (\mathcal{P}^*) . Cette dualité est l'élément fondamental pour la preuve du Théorème 4.1.2.

Proposition 4.1.3 (Bigot, Klein [37]). *Supposons que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont satisfaites, alors, $J_{\mathcal{P}} = J_{\mathcal{P}^*}$.*

4.1.5 Une caractérisation explicite du barycentre théorique

Nous allons maintenant être en mesure d'étendre les résultats du Théorème 4.1.1 à la dimension $d \geq 2$. Soit $\mu_{\theta} \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ la mesure aléatoire de densité \mathbb{P}_g définie par l'Equation (4.1). Soit μ_0 une mesure de référence fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . Alors, par la Proposition 4.1.1, on sait qu'il existe pour tout $\theta \in \Theta$, un unique plan de transport optimal $T_{\theta} : \Omega \rightarrow \Omega$ tel que $\mu_{\theta} = T_{\theta} \# \mu_0$, où $T_{\theta} = \nabla \phi_{\theta}$ μ_0 -p.p, et $\phi_{\theta} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction convexe semi continue inférieurement. Dans le théorème qui suit, nous énonçons des conditions suffisantes sur l'espérance de T_{θ} sous lesquelles le barycentre de μ_{θ} est donné par $\mu^* = \mathbb{E}(T_{\theta}) \# \mu_0$. Ainsi calculer le barycentre dans l'espace de Wasserstein revient à calculer l'espérance classique des plans optimaux T_{θ} transportant μ_0 sur μ_{θ} . La preuve (que le lecteur pourra trouver dans [37]) repose fortement sur la formulation duale (4.13) du problème d'optimisation (4.2).

Pour tout $\theta \in \Theta$ notons

$$\bar{T}_{\theta} = T_{\theta} \circ \bar{T}^{-1}, \quad (4.14)$$

où $\bar{T} : \Omega \rightarrow \Omega$ l'application définie par $\bar{T}(x) = \mathbb{E}(T_{\theta}(x)) = \int_{\Theta} T_{\theta}(x) g(\theta) d\theta$, $x \in \Omega$. Notons que l'Equation (4.14) n'est valide que si \bar{T}^{-1} est définie. Le théorème qui suit donne des conditions suffisantes assurant que l'existence de \bar{T} comme une application bijective de Ω dans Ω .

Théorème 4.1.2 (Bigot, Klein [37]). *Soit $\theta \in \mathbb{R}^p$ un vecteur aléatoire de densité $g : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ tel que $g(\theta) > 0$ pour tout $\theta \in \Theta$. Soit $\mu_{\theta} = \Phi(\theta)$ une mesure aléatoire de loi \mathbb{P}_g . Soit μ_0 une mesure fixée dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$ admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d . On suppose les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 satisfaites.*

1. Si pour tout $\theta \in \Theta$

$$T_{\theta} \text{ et } \bar{T} \text{ sont des } C^1 \text{ diféomorphismes;} \quad (4.15)$$

2. et si pour tout $\theta \in \Theta$

$$\bar{T}_{\theta} = \nabla \bar{\phi}_{\theta} \text{ où } \bar{\phi}_{\theta} : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ est une fonction convexe s.c.i.,} \quad (4.16)$$

telle que pour tout $x \in \Omega$, la fonction $\theta \mapsto \bar{\phi}_{\theta}(x)$ est intégrable par rapport à la mesure \mathbb{P}_{Θ} et vérifie l'hypothèse de normalisation

$$\int_{\Theta} \bar{\phi}_{\theta}(x) g(\theta) d\theta = \frac{1}{2} |x|^2 \text{ pour tout } x \in \Omega. \quad (4.17)$$

Alors, le barycentre théorique est la mesure $\mu^* \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ donnée par

$$\mu^* = \bar{T} \# \mu_0, \quad (4.18)$$

et le problème d'optimisation (4.2) vérifie

$$\inf_{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)} J(\nu) = \frac{1}{2} \int_{\Theta} d_{W_2}^2(\mu^*, \mu_{\theta}) g(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{E}(|\bar{T}_{\theta}(x) - x|^2) d\mu^*(x). \quad (4.19)$$

Le Théorème 4.1.2 montre que sous certaines conditions, calculer dans l'espace de Wasserstein le barycentre d'une mesure aléatoire μ_{θ} revient à transporter la mesure de référence μ_0 par le transport moyen mesuré par \bar{T} .

La condition (4.15) est vérifiée sous certaines hypothèses de régularité de Ω , μ_{θ} et μ_0 . On peut trouver dans [194], un état de l'art détaillé des conditions suffisantes sous lesquelles (4.15) est vérifiée. Nous présentons dans la section qui suit des exemples pour lesquels une telle condition est vérifiée.

Dans le cas où $\bar{T} = I$ est l'identité, on peut vérifier que les conditions (4.16) et (4.17) sont nécessairement satisfaites. Ainsi, si $\bar{T} = I$ et si la Condition (4.15) est vérifiée, alors le barycentre théorique μ^* est égale à la mesure de référence μ_0 . Dans la section qui suit, nous illustrons cette propriété à l'aide de modèles de déformations pour des densités en utilisant la distance de Wasserstein pour comparer des distributions aléatoires.

Notons que lorsque $\bar{T} = I$, il n'est pas requis dans le Théorème 4.1.2 que l'ensemble des plans de transports optimaux T_θ soit admissible au sens de la Définition 4.2 de [40]. En effet, d'après cette définition une condition nécessaire pour qu'une collection d'application bijective $(T_\theta)_{\theta \in \Theta}$ soit admissible est que $T_\theta \circ T_{\theta'}^{-1}$ reste un plan optimal pour tout $\theta, \theta' \in \Theta$. Dans le cas où $\bar{T} = I$, une telle hypothèse n'est pas nécessaire. Par contre, lorsque $\bar{T} \neq I$, la condition (4.16) n'est pas nécessairement satisfaite puisque la composition $T_\theta \circ \bar{T}^{-1}$ n'est pas toujours un plan optimal.

L'hypothèse (4.17) doit être comprise comme une hypothèse d'identifiabilité. En effet, par définition, on a toujours $\mathbb{E}(\bar{T}_\theta(x)) = \int_\Omega \bar{T}_\theta(x)g(\theta)d\theta = x$ pour tout $x \in \Omega$. Ainsi, parmi toutes les fonctions convexes $\bar{\phi}_\theta$ vérifiant $\bar{T}_\theta = \nabla \bar{\phi}_\theta$, la condition (4.17) implique de choisir celle pour laquelle $\int_\Omega \bar{T}_\theta(x)g(\theta)d\theta = x$.

4.1.6 Une application aux modèles de déformation en statistique

Nous allons maintenant illustrer l'utilité de la notion de barycentre dans l'espace de Wasserstein pour analyser des données. Nous présenterons diverses hypothèses sur \bar{T} qui assurent que les conditions (4.15) et (4.16) sont satisfaites.

Cadre général

Dans de nombreuses applications, les observations sont sous la forme d'un ensemble de n -signaux unidimensionnels ou des images de niveaux de gris $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$ (par exemple en géophysique, imagerie biomédicale ou en théorie du signal pour les neurosciences). Ses données peuvent être considérées comme des variables aléatoires i.i.d. à valeurs dans un espace de fonctions à valeurs réelles définies sur un domaine compact $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ noté $\mathcal{F}(\Omega)$. Dans de nombreux cas, les courbes ou images observées ont une structure commune. Ce qui permet, de faire l'hypothèse que ces observations sont des objets aléatoires variant autour d'une forme de référence. Ainsi, caractériser et estimer cette forme de référence est d'une importance capitale dans de nombreuses applications. Lorsque les données présentent une variabilité géométrique en temps ou en espace, il est fréquemment utilisé la théorie des motifs de Grenander [116, 117, 240, 241] qui permet de modéliser de telles variabilités par l'action d'un groupe de Lie sur un espace de dimension infinie de courbes ou d'images. A partir des idées de Grenander, on peut construire de tels modèles en considérant que les données $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$ sont obtenues par le biais de déformations d'un même motif $h \in \mathcal{F}(\Omega)$ via le modèle dit de déformation

$$\mathbf{X}_i = h \circ \varphi_i^{-1}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.20)$$

où $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ sont des variables aléatoires i.i.d. appartenant à l'ensemble des difféomorphismes réguliers de Ω . En théorie du signal ou en imagerie, il y a eu récemment un intérêt croissant pour l'analyse statistique des modèles déformables (en présence de bruit additif) en utilisant des difféomorphismes aléatoires φ_i (rigides ou non), voir par exemples [5, 32, 33, 35, 38, 112, 183, 6]. Cependant, lorsque les données sont des courbes ou des images, on observe généralement non seulement une variabilité géométrique mais aussi une variabilité dite photométrique (l'intensité des pixels change d'une image à l'autre) qui ne peut pas être capturée par une déformation du domaine Ω par des difféomorphismes du modèle (4.20). Il est alors toujours possible de transformer les données $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$ en un ensemble de n densités aléatoires i.i.d. de probabilités en calculant

$$\mathbf{q}_i(x) = \frac{\widetilde{\mathbf{X}}_i(x)}{\int_\Omega \widetilde{\mathbf{X}}_i(u)du}, \quad x \in \Omega, \quad \text{où } \widetilde{\mathbf{X}}_i(x) = \mathbf{X}_i(x) - \min_{u \in \Omega} \{\mathbf{X}_i(u)\}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Fixons une densité de probabilité $q_0 \in \mathcal{F}(\Omega)$. Considérons maintenant le modèle suivant de déformation de densités

$$\mathbf{q}_i(x) = |\det(D\varphi_i^{-1})(x)| q_0(\varphi_i^{-1}(x)) \quad x \in \Omega, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.21)$$

où $\det(D\varphi_i^{-1})(x)$ est le déterminant de la matrice Jacobienne au point x du difféomorphisme aléatoire φ_i^{-1} . Si $\mu_1, \dots, \mu_n \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ sont les mesures de probabilités aléatoires de densités $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$, et si μ_0 est la mesure de densité q_0 , alors, on peut réécrire (4.21) comme le modèle déformation de mesures suivant

$$\mu_i = \varphi_i \# \mu_0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.22)$$

Dans le modèle (4.22), sous des hypothèses adéquates sur les applications aléatoires $\varphi_1, \dots, \varphi_n$, calculer dans l'espace de Wasserstein les barycentres empiriques des mesures aléatoires μ_1, \dots, μ_n conduit à un estimateur raisonnable et consistant de la mesure de référence μ_0 et donc du motif de référence q_0 . Nous allons présenter maintenant quelques exemples du modèle (4.22). L'apport principal étant de montrer comment le Théorème 4.1.2 peut-être utilisé pour caractériser le barycentre théorique de mesures aléatoires issus du modèle de déformation (4.22).

Une classe paramétrique de difféomorphismes

Soit μ_0 une mesure de référence sur \mathbb{R}^d de densité q_0 (par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d) dont le support est inclus dans un ensemble compact $\Omega_{q_0} \subset \mathbb{R}^d$. On se propose de caractériser le barycentre des mesures aléatoires μ issus du modèle de déformation $\mu = \varphi \# \mu_0$, pour une classe spécifique de difféomorphismes aléatoires $\varphi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. Soit $\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R})$ l'ensemble des matrices symétriques définies positives de tailles $d \times d$ à entrées réelles. Soit

$$\phi : (\mathbb{R}^p, \mathcal{B}(\mathbb{R}^p)) \rightarrow (\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^d)) \quad (4.23)$$

une application mesurable, où $\mathcal{B}(\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^d)$ est la tribu de Borel de $\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^d$. Pour $\theta \in \mathbb{R}^p$, on pose $\phi(\theta) = (A_\theta, b_\theta)$, avec $A_\theta \in \mathbb{S}_d^+(\mathbb{R})$, $b_\theta \in \mathbb{R}^d$, et $T_\theta(x) = A_\theta x + b_\theta$, $x \in \mathbb{R}^d$. Comme la matrice A_θ est un élément de $\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R})$, il est clair que T_θ est le gradient de la fonction convexe

$$\phi_\theta(x) = \frac{1}{2} x' A_\theta x + b_\theta' x, \quad \text{pour } x \in \mathbb{R}^d.$$

Il s'ensuit que pour tout $\theta \in \mathbb{R}^d$, $T_\theta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est un C^1 -difféomorphisme d'inverse donné par

$$T_\theta^{-1}(x) = A_\theta^{-1}(x - b_\theta), \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Soient $\Theta \subset \mathbb{R}^p$ un ensemble compact et $\theta \in \mathbb{R}^p$ un vecteur aléatoire de densité g (par rapport à la mesure de Lebesgue $d\theta$ de \mathbb{R}^p) dont le support est inclus dans Θ . Nous allons étudier le barycentre théorique dans l'espace de Wasserstein des mesures aléatoires μ_θ issues du modèle de déformation :

$$\mu_\theta = T_\theta \# \mu_0. \quad (4.24)$$

L'Equation (4.24) peut s'interpréter comme un modèle semi-paramétrique de densités aléatoires, où T_θ est le plan de transport optimal de μ_0 sur μ_θ . Pour tout $\theta \in \Theta$, nous considérons $\mu_\theta = T_\theta \# \mu_0$. Comme T_θ est un difféomorphisme régulier et comme μ_0 est une mesure de densité q_0 dont le support est inclus dans l'ensemble compact Ω_{q_0} , la densité q_θ de μ_θ est définie par

$$q_\theta(x) = \begin{cases} \det(A_\theta^{-1}) q_0(A_\theta^{-1}(x - b_\theta)) & \text{si } x \in \mathcal{R}(T_\theta), \\ 0 & \text{si } x \notin \mathcal{R}(T_\theta); \end{cases} \quad (4.25)$$

où $\mathcal{R}(T_\theta) = \{T_\theta(y), y \in \Omega_{q_0}\} = \{A_\theta y + b_\theta, y \in \Omega_{q_0}\}$. Si on suppose de plus que l'application $\phi : \Theta \rightarrow \mathbb{S}_d^+(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^d$ est continue alors il existe un ensemble compact $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ tel que $\mathcal{R}(T_\theta) \subset \Omega$ pour tout $\theta \in \Theta$. Ainsi, sous ses hypothèses, la mesure aléatoire μ_θ prend ses valeurs dans $\mathcal{M}_+(\Omega)$. Le corollaire suivant est alors une conséquence du Théorème 4.1.2.

Corollaire 4.1.1. *Si ϕ définie par l'Equation (4.23) est continue et si $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est un ensemble compact vérifiant pour tout $\theta \in \Theta$, $\mathcal{R}(T_\theta) \subset \Omega$. Si de plus*

$$\mathbb{E}(A_\theta) = I \text{ et } \mathbb{E}(b_\theta) = 0,$$

où I est la matrice identité. Alors $\mu_0 = \mu^*$ est le barycentre empirique dans l'espace de Wasserstein des mesures aléatoires $\mu_\theta \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ du modèle de déformation (4.24).

Lorsque la condition $\mathbb{E}(A_\theta) = I$ n'est pas satisfaite, nous définissons pour tout $\theta \in \Theta$, les quantités suivantes

$$\bar{A}_\theta = A_\theta \bar{A}^{-1} \quad \text{et} \quad \bar{b}_\theta = b_\theta - A_\theta \bar{A}^{-1} \bar{b}, \quad (4.26)$$

où $\bar{A} = \mathbb{E}(A_\theta)$ et $\bar{b} = \mathbb{E}(b_\theta)$. Pour tout $\theta \in \Theta$, nous considérons aussi l'application

$$\bar{T}_\theta(x) = T_\theta(\bar{T}^{-1}(x)) = \bar{A}_\theta x + \bar{b}_\theta, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

où $\bar{T}(x) = \mathbb{E}(A_\theta)x + \mathbb{E}(b_\theta)$. Pour pouvoir appliquer le Théorème 4.1.2, il est nécessaire de supposer que \bar{T}_θ est le gradient d'une fonction convexe, cela revient à supposer que $\bar{A}_\theta = A_\theta \bar{A}^{-1}$ est une matrice définie positive. Une condition suffisante pour avoir cette propriété, est d'imposer que le produit $A_\theta \bar{A}^{-1}$ soit commutatif pour tout $\theta \in \Theta$, rappelons que le produit de deux matrices de $\mathbb{S}_d^+(\mathbb{R})$ reste définie positive si et seulement si leur produit commute (voir e.g. [178]). Sous de telles hypothèses, il est alors possible d'appliquer le Théorème 4.1.2 et d'obtenir :

Corollaire 4.1.2. *Supposons que l'application définie par (4.23) est continue et soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un sous ensemble compact de \mathbb{R}^d pour lequel on ait $\mathcal{R}(T_\theta) \subset \Omega$ pour tout $\theta \in \Theta$. Si $A_\theta \bar{A}^{-1}$ est définie positive pour tout $\theta \in \Theta$. Alors*

$$\mu^* = \bar{T} \# \mu_0.$$

est, dans l'espace de Wasserstein, le barycentre empirique des mesures aléatoires $\mu_\theta \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ issues du modèle de déformation (4.24).

4.1.7 Convergence presque sûre du barycentre empirique vers le barycentre théorique

On se replace dans le cadre général de ce chapitre. Nos mesures sont supposées vérifier l'hypothèse 4.1.1 (leur support est compact). Nous rappelons que cette hypothèse implique qu'alors l'espace de Wasserstein $(\mathcal{M}_+(\Omega), d_{W_2})$ est compact. C'est cette propriété qui permet d'obtenir la convergence presque sûre du barycentre empirique.

Soit $\theta_1, \dots, \theta_n$ des variables aléatoires i.i.d. à valeurs dans \mathbb{R}^p de loi \mathbb{P}_Θ . Considérons la fonctionnelle

$$J_n(\nu) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} d_{W_2}^2(\nu, \mu_{\theta_j}), \quad \nu \in \mathcal{M}_+(\Omega), \quad (4.27)$$

et regardons le problème d'optimisation consistant à trouver un barycentre empirique

$$\bar{\mu}_n \in \underset{\nu \in \mathcal{M}_+(\Omega)}{\text{Argmin}} J_n(\nu), \quad (4.28)$$

Les résultats de [2] permettent d'obtenir le lemme qui suit.

Lemme 4.1.1. *Supposons que l'hypothèse 4.1.2 est satisfaite. Alors pour tout $n \geq 1$, il existe un unique minimiseur $\bar{\mu}_n$ de $J_n(\cdot)$ sur $\mathcal{M}_+(\Omega)$.*

On peut alors obtenir le résultat de convergence du barycentre empirique $\bar{\mu}_n$.

Théorème 4.1.3 (Bigot, Klein [37]). *Supposons que les hypothèses 4.1.1 et 4.1.2 sont vérifiées. Soit μ^* le barycentre théorique défini par l'Equation (4.2), et $\bar{\mu}_n$ le barycentre empirique défini par l'Equation (4.28). Alors,*

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} d_{W_2}(\bar{\mu}_n, \mu^*) = 0 \text{ p.s.}$$

4.1.8 Pour dépasser l'hypothèse de compacité

En guise de conclusion, essayons de comprendre ce qui se passe lorsque la mesure aléatoire μ_θ de loi \mathbb{P}_Θ n'a plus son support inclus dans un compact Ω de \mathbb{R}^d .

1. En dimension $d = 1$, si jamais, on peut définir la mesure μ^* de fonction quantile $F_{\mu^*}^{-1}(y) = \mathbb{E} \left(F_{\mu_\theta}^{-1}(y) \right)$ pour tout $y \in [0, 1]$, on s'attend à ce que des agruments similaires à ceux développés dans la preuve du Théorème 4.1.1 pourraient être utilisés pour montrer que μ^* est l'unique barycentre théorique de la mesure aléatoire μ_θ de loi \mathbb{P}_Θ .
2. Cas de la dimension $d \geq 2$. Evidemment là, cela se corse énormément. En effet, les arguments développés pour montrer notre résultat principal pour $d \geq 2$, dépendent très fortement des hypothèses de compacités effectuées (sur les supports des mesures et sur l'ensemble Θ). Ainsi, adapter et étendre nos résultats aux cas non compacts est un sujet très intéressant mais ardu qui fera l'objet de futures investigations.

4.2 Analyse en composantes principales suivant une géodésique dans l'espace de Wasserstein

4.2.1 Introduction

Objectif de ce travail

L'objectif principal de ce travail est de définir une notion d'analyse en composantes principales (PCA) d'une famille (ν_1, \dots, ν_n) de mesures de probabilités sur \mathbb{R} . Lorsque les mesures admettent des densités f_1, \dots, f_n de carré intégrable, l'approche standard est d'utiliser l'analyse en composantes principales fonctionnelles (FPCA) (voir par exemples [81, 207, 229]) sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ muni de son produit scalaire usuel. Cette méthode a déjà été appliquée dans [82, 152] pour analyser les modes principaux de variabilité d'un ensemble de densités.

On rappelle rapidement ce qu'est la PCA standard sur un espace de Hilbert séparable H , muni de son produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de sa norme $\| \cdot \|$. Une PCA des données x_1, \dots, x_n dans H consiste à diagonaliser l'opérateur de covariance empirique

$$Kx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle x_i - \bar{x}_n, x \rangle (x_i - \bar{x}_n), \quad x \in H, \quad \text{où } \bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \text{ est la moyenne euclidienne.}$$

Les vecteurs propres de K , associés aux plus grandes valeurs propres, décrivent les directions principales de variabilités autour de \bar{x}_n . La première direction principale de variation linéaire est définie par la courbe à valeurs dans H définie par $g : \mathbb{R} \rightarrow H$

$$g_t = \bar{x}_n + t\sigma_1 w_1, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (4.29)$$

où $w_1 \in H$ est le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre $\sigma_1 \geq 0$ de K . D'autre part, il est bien connu que la PCA peut-être formulée comme un problème d'optimisation. Il s'agit alors de trouver une suite de sous-espaces affines emboîtés, qui minimisent la somme des normes des projections des résidus. En particulier W_1 est une solution de

$$\min_{v \in H, \|v\|=1} \sum_{i=1}^n d^2(x_i, S_v) = \min_{v \in H, \|v\|=1} \sum_{i=1}^n \|x_i - \bar{x}_n - \langle x_i - \bar{x}_n, v \rangle v\|^2, \quad (4.30)$$

où $S_v = \{\bar{x}_n + tv, t \in \mathbb{R}\}$ est le sous espace affine passant par \bar{x}_n , et de direction $v \in H$, et $d(x, S) = \inf_{x' \in S} \|x - x'\|$ est la distance de $x \in H$ à $S \subset H$.

Nous illustrons cette stratégie sur un ensemble de quatre densités gaussiennes f_1, \dots, f_4 représentées dans la Figure 4.1. Ces quatre densités ont été échantillonnées à partir du modèle (4.31), ce modèle servira de fil rouge tout au long des paragraphes qui suivent afin d'illustrer nos propos. Soit f_0 une densité dans $L^2(\mathbb{R})$ et pour $(a_i, b_i) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$, on considère la mesure de probabilité ν_i de densité

$$f_i(x) := a_i^{-1} f_0(a_i^{-1}(x - b_i)), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.31)$$

Les densités représentées dans la Figure 4.1 sont un exemple d'une réalisation de ce modèle lorsque f_0 est la densité gaussienne centrée réduite et $n = 4$.

Ce type de modèle est utilisé dans de nombreuses applications, nous renvoyons à [37] et à [106] pour quelques exemples. Un des objectifs est de développer une notion de PCA, qui permet d'obtenir de bons résultats pour ce genre de modèles. La première contrainte imposée est la suivante : Les modes de variations principaux doivent d'une part être des densités et d'autre part doivent retranscrire les sources de variabilités des données autour de f_0 (homothétie et translation).

Commençons par analyser la FPCA de ces données. On calcule donc la moyenne empirique \bar{f}_4 , elle est représentée Figure 4.1(e). C'est une densité bi-modale. Ainsi, cette façon de calculer point par point la moyenne empirique des densités ne semble pas être un choix judicieux. En effet, on aimerait que la moyenne de quatre densités uni-modales soit encore une densité uni-modale et pas bi-modale. Dans la Figure 4.2, on représente le premier mode de variation g , donné par (4.29), on observe qu'il est assez peu informatif sur la variabilité des données.

En effet, pour t suffisamment grand, g_t peut prendre des valeurs négatives et n'est pas d'intégrale 1 (voir Figure 4.2(a),(e),(f)). De plus, même pour de petites valeurs de $|t|$, g_t n'a pas la forme typique des densités observées (voir Figure 4.2(c),(d)). Il semble donc que la FPCA de densités dans $L^2(\mathbb{R})$ n'est pas toujours bien appropriée et peut conduire à des modes de variations linéaires qui ne sont pas cohérents avec les sources de variabilités de nos données. Afin de régler ces problèmes, on pourrait par exemple contraindre le premier mode de variation à rester dans l'espace de fonctions positives et d'intégrale 1. Cependant, une telle PCA contrainte serait calculée au travers de la norme $L^2(\mathbb{R})$ et la moyenne Euclidienne \bar{f}_4 resterait inchangée, ce qui ne serait toujours pas satisfaisant. On pense que ces défauts de la FPCA proviennent du fait que la distance Euclidienne dans $L^2(\mathbb{R})$ n'est pas appropriée pour réaliser une PCA de densités.

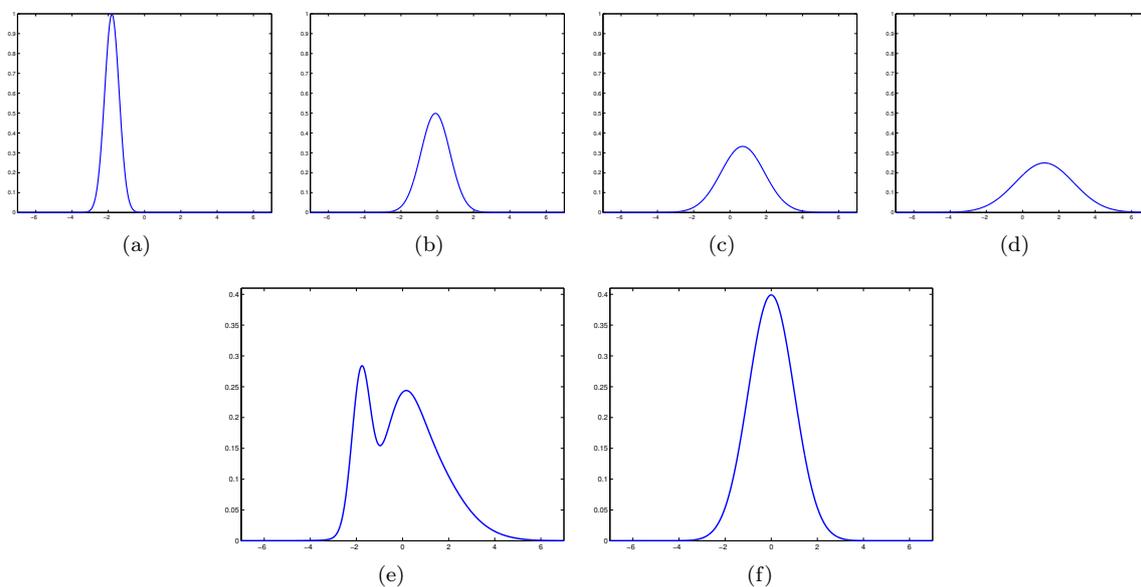


FIGURE 4.1 – (a,b,c,d) Graphes des densités Gaussiennes f_1, \dots, f_4 échantillonnées à partir du modèle (4.31). (e) La moyenne Euclidienne de f_1, \dots, f_4 dans $L^2(\mathbb{R})$. (f) La densité du barycentre $\bar{\nu}_4$ de ν_1, \dots, ν_4 dans l'espace de Wasserstein $W_2(\mathbb{R})$.

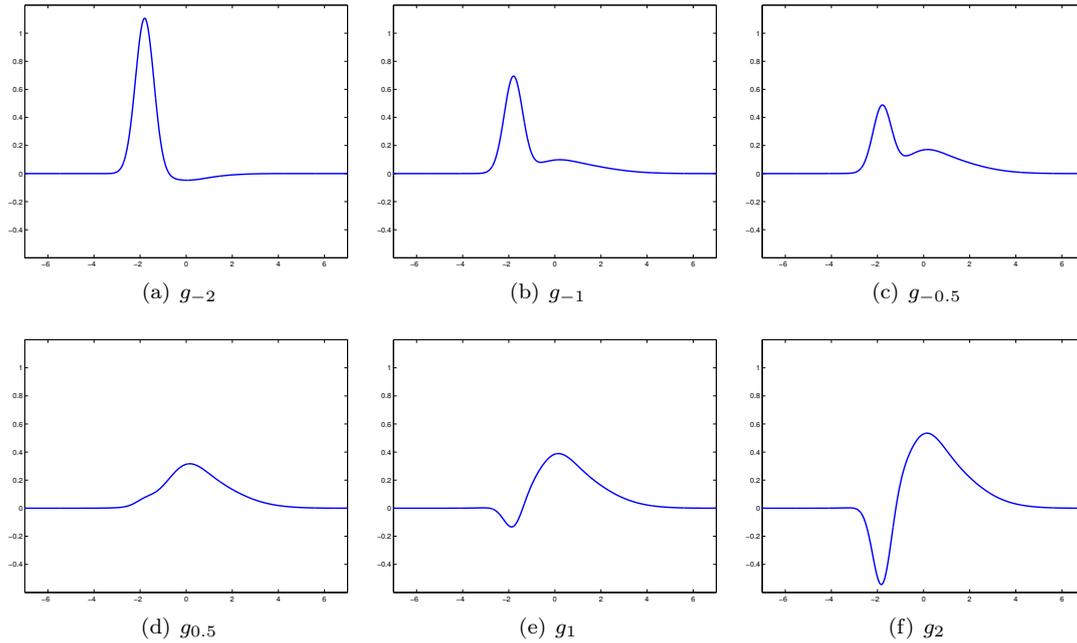


FIGURE 4.2 – Un exemple de FPCA pour des densités. Le premier mode de variation linéaire g_t in $L^2(\mathbb{R})$, pour $-2 \leq t \leq 2$, des densités représentées dans la Figure 4.1 ; voir Equation (4.29).

Contributions principales et organisation de la section

Dans ce travail, nous proposons de considérer que les mesures ν_1, \dots, ν_n appartiennent à l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$ des mesures de probabilités sur Ω , qui admettent un moment d'ordre 2, ici $\Omega = \mathbb{R}$ ou est un intervalle fermé de \mathbb{R} . Cet espace est naturellement muni de la distance de Wasserstein associée au coût quadratique (nous renvoyons à [248] pour plus de détails sur les espaces de Wasserstein). On ne peut pas définir directement une notion de PCA au sens usuel puisque $W_2(\Omega)$ n'est pas un espace linéaire. Néanmoins, nous montrons comment définir une notion de PCA Géodésique (GPCA) en s'appuyant sur la structure Riemannienne formelle de $W_2(\Omega)$ développée par [8]. Nous décrivons cette structure dans la Section 4.2.2. Une première idée dans cette direction est reliée à la moyenne des données (c'est le premier ingrédient dans toute notion de PCA). On propose d'utiliser la notion de moyenne de Fréchet (aussi appelée barycentre) introduite dans [2], dont certaines propriétés ont été présentées dans la Section 4.1 (pour une version plus détaillée nous renvoyons à [37]). Nous pouvons déjà constater (voir la Figure 4.1(f)) que le barycentre des mesures ν_1, \dots, ν_4 , de notre exemple fil rouge, préserve la forme générique des densités. Avant de définir formellement la GPCA sur $W_2(\Omega)$, nous représentons dans la Figure 4.3, le premier mode de variation géodésique \tilde{g} des données présentées dans la Figure 4.1 ; voir Equation (4.38). Comparée aux résultats obtenus pour le mode principal de variation linéaire de g dans $L^2(\mathbb{R})$, donné par l'Equation (4.29) et représenté dans la Figure 4.2, la GPCA donne clairement (au moins sur cet exemple) une meilleure description de la variabilité des données.

Notre approche a beaucoup de points communs avec une notion analogue de PCA pour des données appartenant à une sous variété Riemannienne. De nombreux auteurs s'attèlent à développer une notion de PCA non linéaire pour des données appartenant à une sous-variété Riemannienne courbée (voir entre autres [99, 131, 232]). Ces méthodes sont souvent appelées Analyse géodésique principale (PGA), elles étendent la notion classique de PCA dans les espaces de Hilbert. Malheureusement l'espace de Wasserstein n'est pas une sous-variété Riemannienne, on ne peut donc pas appliquer directement les méthodes existantes pour les sous variétés Riemanniennes.

Toute notre construction d'une notion de GPCA dans l'espace de Wasserstein est basée sur une propriété

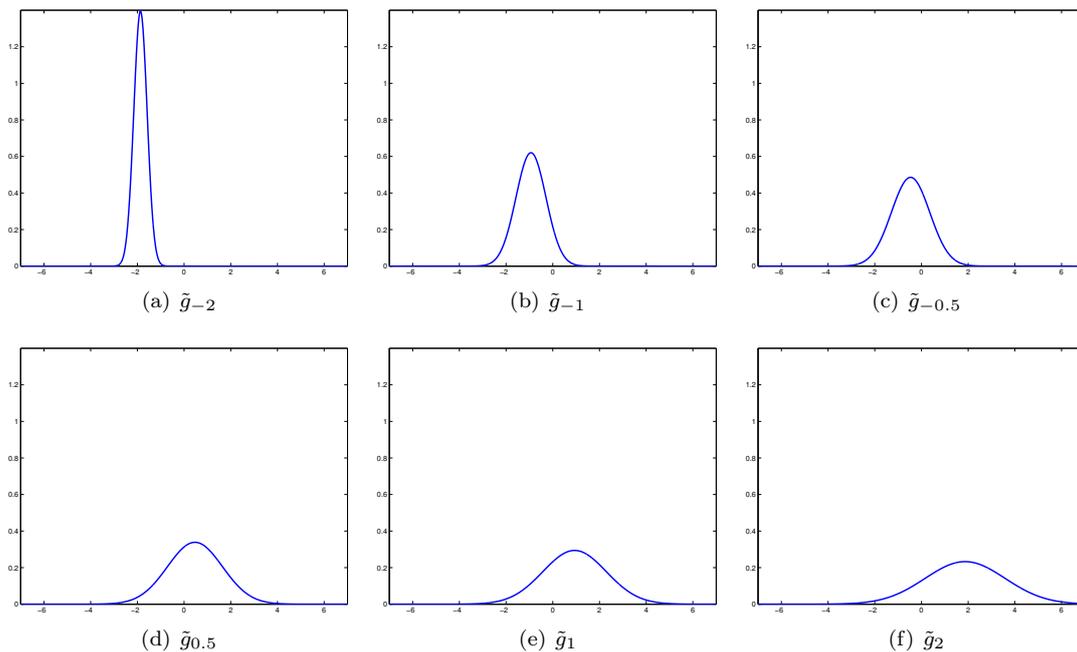


FIGURE 4.3 – Un exemple de GPCA pour des densités. Premier mode de variation géodésique \tilde{g}_t dans $W_2(\mathbb{R})$, pour $-2 \leq t \leq 2$, pour les densités représentées dans la Figure 4.1.

remarquable de l'espace de Wasserstein. Il existe une isométrie entre $W_2(\Omega)$ est un sous-ensemble convexe fermé de l'espace de Hilbert $L^2_\mu(\Omega)$ des fonctions de carré intégrable pour une certaine mesure μ bien choisie (cette isométrie est l'objet du Théorème 4.2.1 qui est finalement la clé de voûte de tout ce travail). Ainsi, nous allons commencer par expliquer comment définir une notion de PCA dans un sous ensemble convexe fermé d'un espace de Hilbert. Cette construction est générale, on l'appliquera ensuite évidemment pour définir la GPCA dans $W_2(\Omega)$, mais elle a son intérêt propre.

Dans ce qui suit, de nombreuses références à des notions de géométries Riemanniennes seront utilisées (géodésique, espace tangent, cartes exponentielles et logarithmiques) afin d'illustrer le rapport entre notre approche et la PGA. Cependant, le point important ici n'est pas la géométrie de $W_2(\Omega)$ mais plutôt l'utilisation de ces notions de géométries pour construire rigoureusement l'isométrie entre $W_2(\Omega)$ et un sous ensemble convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$. La notion de GPCA dans l'espace de Wasserstein ne sera alors qu'une application de ces résultats.

Le reste de cette section est organisée comme suit. Nous construisons l'isométrie entre $W_2(\Omega)$ et un sous ensemble convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$ dans la Section 4.2.2. Nous y rappelons aussi les notions de géométries Riemanniennes que nous utiliserons dans la suite. Nous définissons et analysons la notion générale de PCA convexe (CPCA) dans la Section 4.2.3. Les résultats principaux sur la GPCA sont rassemblés dans la Section 4.2.4. Puis nous présentons dans la Section 4.2.5 une étude numérique sur des données simulées à partir d'un modèle statique simple. Puis dans la Section 4.2.6 nous étudions certaines propriétés de convergence des CPCA et GPCA empiriques, lorsque la taille de l'échantillon tend vers l'infini. Dans la dernière section de conclusion, nous tentons de comparer les différentes notions de PCA et les différences qui existent entre elles. Enfin, nous rappelons certaines notions utilisées dans tout ce chapitre (quantiles, espaces géodésiques, la Γ -convergence et celle de Kuratowski).

4.2.2 A une isométrie près l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$ est un sous-ensemble convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$

La structure pseudo-Riemannienne de $W_2(\Omega)$

Soient $\Omega = \mathbb{R}$ ou un intervalle fermé de \mathbb{R} et $W_2(\Omega)$ l'ensemble des mesures de probabilités sur $(\Omega, \mathcal{B}(\Omega))$ qui admettent un moment d'ordre 2 ($\mathcal{B}(\Omega)$ est la tribu de Borel de Ω). Rappelons qu'en dimension 1, on connaît explicitement le plan de transport optimal T^* qui envoie une mesure de probabilité μ sur une autre ν , il est donné par $T^* = F_\nu^- \circ F_\mu$ et par suite

$$d_{W_2}^2(\mu, \nu) = \int_{\Omega} (F_\nu^- \circ F_\mu(x) - x)^2 d\mu(x). \quad (4.32)$$

L'espace $W_2(\Omega)$ possède une structure Riemannienne formelle décrite par exemple dans [8]. Nous rappelons ici les définitions de bases qui ont leurs analogues dans le monde des sous-variétés Riemanniennes. A partir de maintenant nous fixons une mesure de référence $\mu \in W_2(\Omega)$ de fonction de répartition F_μ supposée continue. En suivant [8], nous définissons l'espace tangent à μ comme l'espace de Hilbert $L^2_\mu(\Omega)$ des fonctions à valeurs réelles de carré μ -intégrable sur Ω , muni du produit scalaire usuel $\langle \cdot, \cdot \rangle_\mu$ et de la norme $\|\cdot\|_\mu$. Nous définissons ensuite les cartes exponentielle et logarithmique au point μ comme suit

Définition 4.2.1. Soit id l'application identité sur Ω . Les cartes exponentielle $\exp_\mu : L^2_\mu(\Omega) \rightarrow W_2(\Omega)$ et logarithmique $\log_\mu : W_2(\Omega) \rightarrow L^2_\mu(\Omega)$ sont définies respectivement par

$$\exp_\mu(v) = (v + \text{id})\#\mu \quad \text{et} \quad \log_\mu(\nu) = F_\nu^- \circ F_\mu - \text{id}. \quad (4.33)$$

Exemple 4.2.1. Nous illustrons ces notions de cartes exponentielle et logarithmique sur notre modèle fil rouge (4.31). Pour $\mu_0 \in W_2(\mathbb{R})$ a.c. et $(a, b) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}$, soit $\nu^{(a,b)}$ la mesure de probabilité de fonction de répartition et densité données par

$$F^{(a,b)}(x) := F_{\mu_0}((x-b)/a), \quad f^{(a,b)}(x) := f_{\mu_0}((x-b)/a)/a, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.34)$$

L'Equation (4.33) implique $\log_\mu(\nu^{(a,b)})(x) = [F^{(a,b)}]^- \circ F_\mu(x) - x$ et $\log_{\mu_0}(\nu^{(a,b)})(x) = (a-1)x + b$. Ainsi si $v(x) = (a-1)x + b$, on a

$$\exp_{\mu_0}(v) = \nu^{(a,b)}. \quad (4.35)$$

Dans le monde des sous-variétés Riemanniennes, la carte exponentielle en un point est un homéomorphisme local d'un voisinage de l'origine dans l'espace tangent à la sous-variété. Malheureusement, ce n'est pas le cas pour notre \exp_μ . En effet, il est possible de trouver des fonctions aussi proches que l'on veut de l'origine de $L^2_\mu(\Omega)$ ayant la même exponentielle voir par exemple [8]. Par contre, nous allons montrer que \exp_μ est une isométrie lorsque l'on restreint l'espace de départ.

Une isométrie entre $W_2(\Omega)$ et un sous espace convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$

Les deux résultats qui suivent, décrivent l'isométrie entre $W_2(\Omega)$ et $V_\mu(\Omega)$ l'image de $W_2(\Omega)$ par la carte logarithmique.

Théorème 4.2.1. La carte exponentielle \exp_μ restreinte à $V_\mu(\Omega) := \log_\mu(W_2(\Omega))$ est un homéomorphisme isométrique d'inverse \log_μ .

Proposition 4.2.1. L'ensemble $V_\mu(\Omega) := \log_\mu(W_2(\Omega))$ est un convexe fermé de $L^2_\mu(\Omega)$.

Remarque 4.2.1. L'espace $V_\mu(\Omega)$ peut être caractérisé comme l'ensemble des fonctions $v \in L^2_\mu(\Omega)$ telle que $T := \text{id} + v$ est μ -p.p. croissante (voir Définition 4.2.17) et telle que $T(x) \in \Omega$, pour tout $x \in \Omega$.

Géodésiques de $W_2(\Omega)$

Une conséquence directe de la Proposition 4.2.1 et du Théorème 4.2.1 est que les géodésiques dans l'espace $W_2(\Omega)$ sont les images par \exp_μ des droites de $V_\mu(\Omega)$. En particulier, étant données deux mesures dans $W_2(\Omega)$, il existe une unique géodésique (chemin le plus court) permettant de passer de l'une à l'autre. Cette propriété est formalisée dans le lemme qui suit.

Lemme 4.2.1. *Soit $\gamma : [0, 1] \rightarrow W_2(\Omega)$ un chemin et soit $v_0 := \log_\mu(\gamma(0))$, $v_1 := \log_\mu(\gamma(1))$. Alors γ est une géodésique si et seulement si pour tout $t \in [0, 1]$, $\gamma(t) = \exp_\mu((1-t)v_0 + tv_1)$.*

Exemple 4.2.2. Illustrons maintenant le Lemme 4.2.1 et revenons à notre exemple fil rouge (4.34). On a

$$v_0(x) := \log_{\mu_0}(\nu^{(1,0)}) = 0 \text{ et } v_1(x) := \log_{\mu_0}(\nu^{(a,b)}) = (a-1)x + b, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Le Lemme 4.2.1 assure que le chemin $\gamma : [0, 1] \rightarrow W_2(\Omega)$, défini par

$$\gamma(t) = \exp_{\mu_0}((1-t)v_0 + tv_1) = \exp_{\mu_0}(t(a-1)x + tb) = \nu^{(a_t, b_t)}, \quad t \in [0, 1],$$

est une géodésique vérifiant $\gamma(0) = \mu_0 = \nu^{(1,0)}$ et $\gamma(1) = \nu^{(a,b)}$, avec $a_t = 1-t+ta$ et $b_t = tb$. De plus, pour chaque $t \in [0, 1]$, la mesure $\gamma(t)$ a pour densité

$$f^{(a_t, b_t)}(x) = a_t^{-1} f_0(a_t^{-1}(x - b_t)), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.36)$$

La Figure 4.4 représente, lorsque μ_0 est la mesure gaussienne centrée réduite, les densités $f^{(a_t, b_t)}$ pour certaines valeurs de $t \in [0, 1]$ et avec $a = 0.5$ et $b = 2$.

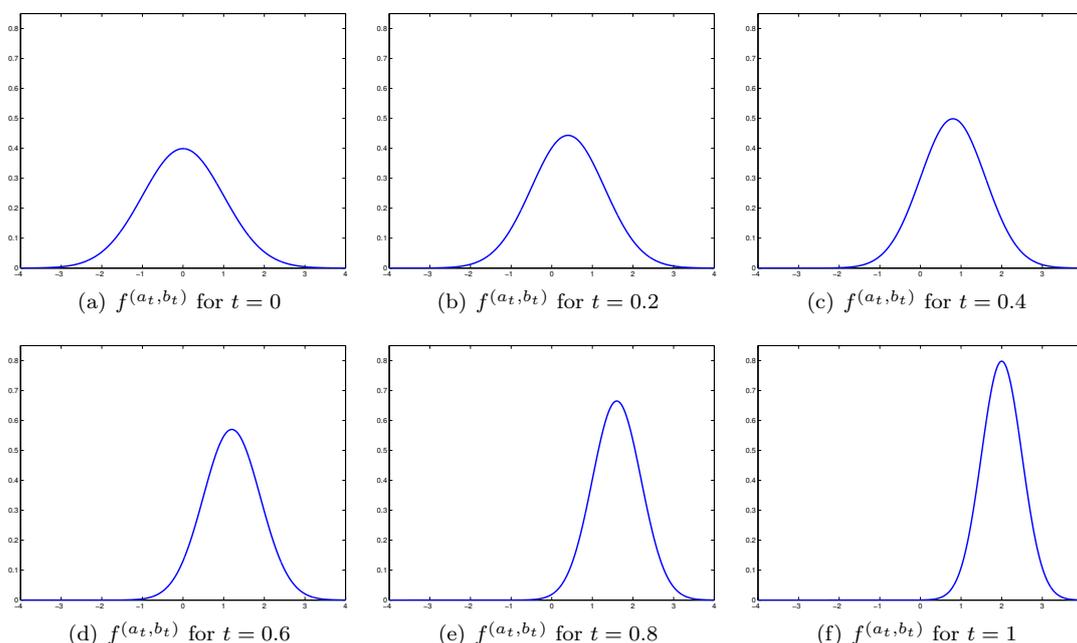


FIGURE 4.4 – Visualisation des densités $f^{(a_t, b_t)}$ associées à la géodésique $\gamma(t) = \nu^{(a_t, b_t)}$ dans W_2 , décrites dans l'Exemple 4.2.2, avec $a = 0.5$ et $b = 2$, et $\mu = \mu_0$ est la mesure Gaussienne standard.

Remarque 4.2.2. Grâce au Lemme 4.2.1, l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$ muni de la distance d_{W_2} est un espace géodésique. On peut même caractériser les sous-espaces de $W_2(\Omega)$ qui restent géodésiques.

Corollaire 4.2.1. *Un sous-ensemble $G \subset W_2(\Omega)$ est géodésique si et seulement si $\log_\mu(G)$ est convexe.*

Définition 4.2.2. Soit $G \subseteq W_2(\Omega)$ un sous-ensemble géodésique de $W_2(\Omega)$. La dimension de G notée $\dim(G)$, est, par définition, la dimension du plus petit sous-espace affine de $L_\mu^2(\Omega)$ contenant $\log_\mu(G)$ ($\dim(G)$ ne dépend pas de la mesure de référence μ).

4.2.3 Analyse en composantes principales convexes CPCA

Nous venons de voir que $W_2(\Omega)$ est isométrique à un sous ensemble convexe fermé $V_\mu(\Omega)$ de l'espace de Hilbert $L_\mu^2(\Omega)$. Comme nous le verrons un peu plus tard (Section 4.2.4) la notion de GPCA dans $W_2(\Omega)$ est fortement liée à celle de PCA contrainte à rester dans $V_\mu(\Omega)$. Il est donc naturel de développer une stratégie générale de PCA contrainte à rester dans des convexes d'un espace de Hilbert. Cette méthode que nous appellerons analyse en composantes principales convexes (CPCA) sera alors applicable bien au delà de la GPCA dans $W_2(\Omega)$. Nous utiliserons les notations suivantes

- H sera un espace de Hilbert séparable, muni de son produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de sa norme $\| \cdot \|$.
- $d(x, y) := \|x - y\|$ et $d(x, E) := \inf_{z \in E} d(x, z)$, for $x, y \in H, E \subset H$.
- X sera un sous-ensemble convexe fermé de H , muni de sa tribu de Borel $\mathcal{B}(X)$.
- \mathbf{x} sera une variable aléatoire de carré intégrable à valeurs dans X , ainsi $\mathbb{E}(\|\mathbf{x}\|^2) < +\infty$, et son espérance sera notée $\mathbb{E}\mathbf{x}$.
- $x_0 \in X$ sera un élément de référence et $k \geq 1$ un entier.

Les composants convexes principaux

Définition 4.2.3. Pour $C \subset X$, soit $K_X(C) = \mathbb{E}(d^2(\mathbf{x}, C))$.

Remarque 4.2.3. Remarquons que $K_X(C)$ est l'espérance du carré des résidus de \mathbf{x} projeté sur C . $K_X(C)$ est nécessairement fini car par hypothèse \mathbf{x} est de carré intégrable. De plus, si $C \subset B$ alors $K_X(C) \geq K_X(B)$, $K_X(C)$ est donc monotone.

Définition 4.2.4. Soient

- (a) $\text{CL}(X)$ l'espace métrique des sous-ensembles fermés et non vide de X muni de la distance de Hausdorff h (voir les Définitions 4.2.19, 4.2.20) ;
- (b) $\text{CC}_k(X)$ la famille des ensembles convexes $C \in \text{CL}(X)$, dont la dimension $\dim(C) \leq k$ (on rappelle que la dimension est ici la dimension du plus petit sous-espace affine contenant C) ;
- (c) $\text{CC}_{x_0, k}(X)$ la famille des ensembles $C \in \text{CC}_k(X)$, contenant x_0 ($x_0 \in C$).

Proposition 4.2.2. *Si X est compact, alors K_X est une application continue sur $\text{CL}(X)$.*

Proposition 4.2.3. *Si X est compact alors $\text{CL}(X)$, $\text{CC}_k(X)$ et $\text{CC}_{x_0, k}(X)$ le sont aussi.*

Nous définissons maintenant deux notions de composants convexes principaux (PCC), l'une emboîtée (NPCC), l'autre globale (GPCC) et nous prouvons leur existence. Le cas emboîté est défini par récurrence, il est motivé par la caractérisation usuelle de la PCA.

Définition 4.2.5. (a) Un (k, x_0) -GPCC de \mathbf{x} est un ensemble $C_k \in \mathcal{G}_{x_0, k}(X) := \text{Argmin}_{C \in \text{CC}_{x_0, k}(X)} K_X(C)$.

(b) Soit $\mathcal{N}_{x_0, 1}(X) = \mathcal{G}_{x_0, 1}(X)$ et $C_1 \in \mathcal{G}_{x_0, 1}(X)$. Pour $k \geq 2$, un (k, x_0) -NPCC de \mathbf{x} est un ensemble

$$C_k \in \mathcal{N}_{x_0, k}(X) := \underset{C \in \text{CC}_{x_0, k}(X), C \supset C_{k-1} \in \mathcal{N}_{x_0, k-1}(X)}{\text{Argmin}} K_X(C).$$

Théorème 4.2.2 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Si X est compact, alors les ensembles $\mathcal{G}_{x_0, k}(X)$ et $\mathcal{N}_{x_0, k}(X)$ ne sont pas vides.*

Remarque 4.2.4. Si $k = 1$, les notions de GPCC et de NPCC coïncident. Ce n'est plus forcément le cas si $k \geq 2$.

Définition 4.2.6. Pour $x_1, \dots, x_n \in X$ fixés, $\mathbf{x}^{(n)}$ est la variable aléatoire de carré intégrable à valeurs dans X dont la loi est caractérisée pour tout $A \in \mathcal{B}(X)$ par $\mathbb{P}(\mathbf{x}^{(n)} \in A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_A(x_i)$. C'est la variable aléatoire dont la loi est la mesure empirique des points x_1, \dots, x_n .

Définition 4.2.7. On définit les GPCC et NPCC empiriques comme dans la Définition 4.2.5 en remplaçant \mathbf{x} par $\mathbf{x}^{(n)}$. La version empirique de K_X est $K_X^{(n)}(C) := \mathbb{E}d^2(\mathbf{x}^{(n)}, C) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^2(x_i, C)$.

CPCA vu comme un problème d'optimisation dans H

Définition 4.2.8. Pour $\mathcal{U} = \{u_1, \dots, u_k\} \subset H$, définissons

- (a) $\text{Sp}(\mathcal{U})$ comme le sous-espace engendré par u_1, \dots, u_k ,
- (b) $C_{\mathcal{U}} = (x_0 + \text{Sp}(\mathcal{U})) \cap X \in \mathcal{CC}_{x_0, k}(X)$ et
- (c) $H_X(\mathcal{U}) := K_X(C_{\mathcal{U}})$.

Lorsque $\mathcal{U} = \{u\}$ on notera $\text{Sp}(u)$, $H_X(u)$ et C_u .

Nous allons maintenant voir que les GPCC (resp. les NPCC) peuvent-être vues comme les solutions d'un problème d'optimisation dans H^k .

Proposition 4.2.4 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soient $\mathcal{U}^* = \{u_1^*, \dots, u_k^*\}$ un minimiseur de H_X parmi les ensembles orthonormés $\mathcal{U} = \{u_1, \dots, u_k\} \subset H$, alors $C_{\mathcal{U}^*} \in \mathcal{G}_{x_0, k}(X)$.*

Proposition 4.2.5 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soient $u_1^*, \dots, u_k^* \in H$ telle que*

- $u_1^* \in \text{Argmin}_{u \in H, \|u\|=1} H_X(u)$
- et pour $j = 2, \dots, k$, $u_j^* \in \text{Argmin}_{u \in \text{Sp}(u_1^*, \dots, u_{j-1}^*)^\perp, \|u\|=1} H_X(u)$,

alors $C_{\{u_1^*, \dots, u_k^*\}} \in \mathcal{N}_{x_0, k}(X)$.

Remarque 4.2.5. La version empirique de H_X est $H_X^{(n)}(\mathcal{U}) := K_X^{(n)}(C_{\mathcal{U}}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^2(x_i, C_{\mathcal{U}})$. Un minimiseur $\mathcal{U}^* = \{u_1^*, \dots, u_k^*\}$ de $H_X^{(n)}(\mathcal{U})$ conduira à la construction du GPCC empirique.

La proposition qui suit donne une condition suffisante assurant que la PCA standard dans H est une solution du problème CPCA. Soit $x \in H$ et C un sous-ensemble convexe fermé de H , la projection de x dans C est noté $\Pi_C x$.

Proposition 4.2.6 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soit $\tilde{\mathcal{U}} = \{\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_k\} \subset H$ un ensemble orthormé de vecteurs propres associés aux k plus grandes valeurs propres de l'opérateur de covariance $Ky = \mathbb{E}(\mathbf{x} - x_0, y)(\mathbf{x} - x_0)$, $y \in H$.*

Si $\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})} \mathbf{x} \in X$ p.s., alors $C_{\tilde{\mathcal{U}}} \in \mathcal{G}_{x_0, k}(X)$.

Remarque 4.2.6. (a) On peut présenter ce dernier résultat comme suit (c'est pas vraiment rigoureux comme présentation, mais cela donne quand même l'idée). Si les données sont suffisamment concentrées autour du point de référence x_0 , alors la CPCA dans X est obtenue très simplement à partir de la PCA standard dans H . En particulier, s'il existe une boule $B(x_0, r)$ centrée en x_0 et de rayon $r > 0$, telle que presque sûrement $\mathbf{x} \in B(x_0, r) \subset X$, alors les hypothèses de la Proposition 4.2.6 sont vérifiées. En effet, $\|\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})} \mathbf{x} - x_0\| = \|\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})}(\mathbf{x} - x_0)\| \leq \|\mathbf{x} - x_0\| \leq r$ et alors $\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})} \mathbf{x} \in X$.

(b) La condition de concentration des données dans une boule de rayon $r > 0$ est contraignante. Cependant, il semble difficile d'énoncer une condition plus faible assurant $\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})} \mathbf{x} \in X$ p.s..

(c) En remplaçant \mathbf{x} par $\mathbf{x}^{(n)}$, nous obtenons la version empirique de la Proposition 4.2.6. Dans ce cas, si $\tilde{\mathcal{U}} = \{\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_k\} \subset H$ sont les vecteurs propres orthonormés associés aux k plus grandes valeurs propres de l'opérateur de covariance $Ky = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle x_i - x_0, y \rangle (x_i - x_0)$, $y \in H$ et si $\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{\mathcal{U}})} x_i \in X$, pour $i = 1, \dots, n$, alors $G_{\tilde{\mathcal{U}}}$ est le GPCC empirique.

(d) Il paraît assez naturel de prendre pour point de référence $x_0 \in X$ (jusqu'à maintenant il était arbitraire), le point $\mathbb{E}(\mathbf{x})$ (ou $\bar{x}_n := \mathbb{E}(\mathbf{x}^{(n)})$ pour la version empirique).

4.2.4 L'analyse en composantes principales géodésiques (GPCA)

On se place maintenant dans l'espace $W_2(\Omega)$ muni de la tribu de Borel $\mathcal{B}(W)$ pour la distance de Wasserstein. On notera par ν les variables aléatoires à valeurs dans $W_2(\Omega)$ de carré intégrable, c'est-à-dire telle que $\mathbb{E}(d_{W_2}^2(\nu, \lambda)) < +\infty$, pour un (et donc pour tout) $\lambda \in W_2(\Omega)$. Comme précédemment, nous supposons que la mesure $\mu \in W_2(\Omega)$ n'a pas d'atome (sa fonction de répartition F_μ est continue).

Moyennes de Fréchet

Une notion naturelle de moyenne dans $W_2(\Omega)$ est celle de moyenne de Fréchet étudiée dans [37] dans un cadre un peu plus général. Dans ce qui suit, nous définissons et donnons quelques propriétés de la moyenne de Fréchet ν^* de ν . Nos résultats concernent la dimension un (on étudie $W_2(\mathbb{R})$). La dimension supérieure est bien plus ardue et nous renvoyons à [2, 37] pour plus de détails.

Commençons par remarquer que si \mathbf{u} est une variable aléatoire à valeurs dans $L_\mu^2(\Omega)$, vérifiant $\mathbb{E}(\|\mathbf{u}\|_\mu) < +\infty$, alors sa moyenne $\mathbb{E}(\mathbf{u})$ est donnée pour tout $x \in \mathbb{R}$ par $(\mathbb{E}(\mathbf{u}))(x) = \mathbb{E}(\mathbf{u}(x))$. On a alors $\|\mathbb{E}(\mathbf{u})\|_\mu \leq \mathbb{E}(\|\mathbf{u}\|_\mu) < \infty$, ainsi $\mathbb{E}(\mathbf{u}) \in L_\mu^2(\Omega)$. De plus si $\mathbb{P}(\mathbf{u} \in V_\mu(\Omega)) = 1$, alors $\mathbb{E}(\mathbf{u}) \in V_\mu(\Omega)$.

Proposition 4.2.7.

- (i) Il existe un unique $\nu^* \in \mathcal{W} := \arg \min_{\nu \in W_2(\Omega)} \mathbb{E}d_{W_2}^2(\nu, \nu)$, appelé moyenne de Fréchet de ν .
- (ii) $\nu^* = \exp_\mu(\mathbb{E}(\mathbf{v}))$, où $\mathbf{v} = \log_\mu(\nu)$.
- (iii) $F_{\nu^*}^- = \mathbb{E}(F_\nu^-)$, où F_ν^- est la fonction de répartition aléatoire de ν .
- (iv) Si F_ν est continue alors F_{ν^*} l'est aussi.

Remarque 4.2.7. Il est ici intéressant de remarquer que le (ii) de la Proposition 4.2.7 implique que $\exp_\mu(\mathbb{E}(\log_\mu(\nu)))$ ne dépend pas de μ .

Géodésiques principales

Dans cette partie, nous présentons l'analogie des définitions et des résultats présentés dans la Section 4.2.3 ; k sera un entier strictement positif et $\nu_0 \in W_2(\Omega)$ une mesure de référence.

Définition 4.2.9. Pour $\nu \in W_2(\Omega)$, $G \subset W_2(\Omega)$, on définit $d_{W_2}(\nu, G) = \inf_{\lambda \in G} d_{W_2}(\nu, \lambda)$ et $K_W(G) := \mathbb{E}d_{W_2}^2(\nu, G)$.

Définition 4.2.10. Soient

- (a) $\text{CL}(W)$ l'espace métrique des sous-ensemble fermés et non vide de $W_2(\Omega)$, muni de la distance de Hausdorff h_{W_2} ;
- (b) $\text{CG}_{\nu_0, k}(W) = \{G \in \text{CL}(W) \mid \nu_0 \in G, G \text{ ensemble géodésique et } \dim(G) \leq k\}$, $k \geq 1$.

Les notions de Géodésiques principales globales (GPG) et emboîtées (NPG) de ν par rapport à ν_0 sont présentées dans ce qui suit.

Définition 4.2.11. (a) Un (k, ν_0) -GPG de ν est un ensemble $G_k \in \mathcal{G}_{\nu_0, k}(W) := \text{Argmin}_{G \in \text{CG}_{\nu_0, k}(W)} K_W(G)$.

(b) Un (k, ν_0) -NPG de ν est un ensemble $G_k \in \text{Argmin}_{G \in \text{CG}_{\nu_0, k}(W), G \supset G_{k-1}} K_W(G)$, $k \geq 2$, avec $G_1 \in \mathcal{G}_{\nu_0, k}(W)$.

Théorème 4.2.3 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Si Ω est compact alors $\mathcal{G}_{\nu_0, k}(W)$ et $\mathcal{N}_{\nu_0, k}(W)$ ne sont pas vides.*

La moyenne de Fréchet empirique et les géodésiques principales

Définition 4.2.12. Etant donnés n mesures $\nu_1, \dots, \nu_n \in W_2(\Omega)$, on note $\nu^{(n)}$ la variable aléatoire à valeurs dans $W_2(\Omega)$ dont la loi est définie pour tout $A \in \mathcal{B}(W)$ par $\mathbb{P}(\nu^{(n)} \in A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_A(\nu_i)$.

Définition 4.2.13. La moyenne de Fréchet empirique de $\nu_1, \dots, \nu_n \in W_2(\Omega)$, est notée ν_n^* , elle est défini au travers de la Proposition 4.2.7, comme la moyenne de Fréchet de $\nu^{(n)}$, ν_n^* est aussi l'unique élément de $\text{Argmin}_{\nu \in W_2(\Omega)} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{W_2}^2(\nu_i, \nu)$.

Proposition 4.2.8 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soient $\nu_1, \dots, \nu_n \in W_2(\Omega)$, alors on a*

$$F_{\nu_n^*}^- = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F_{\nu_i}^- \quad (4.37)$$

Remarque 4.2.8. La formule (4.37) est connue en statistique sous l'appellation de moyennisation quantile (voir [255, 106]). Une caractérisation détaillée de ν_n^* peut être trouvée dans [2], pour des mesures supportées par \mathbb{R}^d , $d \geq 1$.

Définition 4.2.14. Les GPG et NPG empiriques sont définies par la Définition 4.2.11 en remplaçant ν par $\nu^{(n)}$.

Remarque 4.2.9. (a) Comme précédemment un choix naturel pour ν_0 est la moyenne de Fréchet ν^* , qui est sans atomes (voir la Proposition 4.2.7(iv)).

(b) Dans le cas empirique K_W est donné par $K_W^{(n)}(G) := \mathbb{E}(d_{W_2}^2(\nu^{(n)}, G)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{W_2}^2(\nu_i, G)$.

GPCA vu comme CPCA dans $V_\mu(\Omega)$

Souvenons nous que les ensembles géodésiques dans $W_2(\Omega)$ sont les images par la carte exponentielle \exp_μ , des ensembles convexes dans $V_\mu(\Omega)$ (relire avec attention le Corollaire 4.2.1). Ainsi la GPCA dans $W_2(\Omega)$ peut être reformulée comme une CPCA dans $V_\mu(\Omega)$. On applique donc la CPCA à $H = L_\mu^2(\Omega)$, $X = V_\mu(\Omega)$, $x_0 = \log_\mu(\nu_0)$ et $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$. Dans ce contexte $K_X(C) = \mathbb{E}d_\mu^2(\mathbf{x}, C)$ et $C \subset V_\mu(\Omega)$. La proposition qui suit montre que la recherche d'un GPG dans $W_2(\Omega)$ est équivalent à la recherche d'un GPCC dans $V_\mu(\Omega)$.

Proposition 4.2.9 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soient $\mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$ l'ensemble des GPG de ν et $\mathcal{G}_{x_0,k}(V_\mu(\Omega))$ l'ensemble des GPCC de $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$. Alors $\mathcal{G}_{\nu_0,k}(W) = \exp_\mu(\mathcal{G}_{x_0,k}(V_\mu(\Omega)))$.*

Proposition 4.2.10 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Soient $\mathcal{N}_{\nu_0,k}(W)$ l'ensemble des NPG de ν et $\mathcal{N}_{x_0,k}(V_\mu(\Omega))$ l'ensemble des NPCC de $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$, alors $\mathcal{N}_{\nu_0,k}(W) = \exp_\mu(\mathcal{N}_{x_0,k}(V_\mu(\Omega)))$.*

4.2.5 Exemples de GPCA dans $W_2(\mathbb{R})$

Nous commençons par présenter un exemple où les données sont concentrées. On pourra alors appliquer la Proposition 4.2.6. Dans ce cas le problème consistant à trouver des GPG se réduit à un simple problème de PCA sur les logarithmes (nous renvoyons ici à la Remarque 4.2.6(a)). Puis dans la Section 4.2.5, nous nous intéressons à des données qui ne sont plus concentrées, si bien que l'on ne pourra plus dériver la GPG à partir d'une PCA standard.

Cas des données concentrées

On considère l'ensemble des probabilités ν_1, \dots, ν_4 , de densités respectives f_1, \dots, f_4 , qui ont déjà été présentées dans la Figure 4.1. Ces mesures proviennent de notre modèle fil rouge (4.34), avec μ_0 la mesure gaussienne centrée réduite et les valeurs des a_i et b_i données dans la Table 4.1.

i	1	2	3	4
a_i	0.4	0.8	1.2	1.6
b_i	-1.8	-0.1	0.7	1.2

TABLE 4.1 – Valeurs des paramètres pour les données concentrées.

La moyenne de Fréchet de ν_4^* de ν_1, \dots, ν_4 est calculée en utilisant la formule de moyennisation quantile (4.37). A partir de cette formule, nous obtenons la densité g_4^* de ν_4^* (voir Figure 4.1(f)), elle est donnée par

$$g_4^*(x) = f^{(\bar{a}_4, \bar{b}_4)}(x) = f_{\mu_0}((x - \bar{b}_4)/\bar{a}_4) / \bar{a}_4 = f_{\mu_0}(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

où $\bar{a}_4 = 1$ et $\bar{b}_4 = 0$ sont les moyennes arithmétiques des paramètres a_i, b_i . On voit donc qu'ici $\nu_4^* = \mu_0$. Nous observons que les mesures ν_1, \dots, ν_4 sont concentrées autour de leur moyenne de Fréchet, dans le sens où leurs moyenne et variance ne sont pas trop éloignées de celles de ν_4^* (voir Figure 4.1).

On peut alors appliquer les Propositions 4.2.6 et 4.2.9 pour calculer la première GPG empirique avec $\mu = \nu_0 = \mu_0$. Soit w_1 le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de l'opérateur de covariance empirique $Kv = \sum_{i=1}^4 \langle v_i, v \rangle v_i / 4$, $v \in L_{\mu_0}^2(\mathbb{R})$ où

$$v_i(x) = \log_{\mu_0}(\nu_i)(x) = (a_i - 1)x + b_i, \quad i = 1, \dots, 4; \quad x \in \mathbb{R}.$$

Comme les fonctions v_i appartiennent à $A \subseteq L_{\mu_0}^2(\mathbb{R})$, le sous-espace des fonctions affines engendrées par l'identité et la fonction constante égale à 1 (c'est deux fonctions sont bien orthonormales dans $L_{\mu_0}^2(\mathbb{R})$), l'opérateur K peut-être identifié à la matrice de taille 2×2 , $M = \sum_{i=1}^4 V_i' V_i / 4$ avec $V_i = (a_i - 1, b_i)' \in \mathbb{R}^2$, $1 \leq i \leq 4$. Par suite, $w_1 \in A$ et $w_1(x) = \alpha_1 x + \beta_1$, où $W_1 := (\alpha_1, \beta_1)' = (0.36, 0.93)' \in \mathbb{R}^2$ est le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de M . Autrement dit, calculer w_1 revient juste à calculer le premier vecteur propre associé à la PCA standard des vecteurs $V_i \in \mathbb{R}^2$, qui représentent les pentes et les ordonnées à l'origine de nos fonctions v_i . Dans la Figure 4.5, nous avons représenté les vecteurs V_i par des cercles, ainsi que l'espace vectoriel engendré par W_1 par des pointillés, ce qui correspond à la première direction principale de variation de nos données.

Les fonctions affines $u(x) = \alpha x + \beta$ de $V_{\mu_0}(\mathbb{R})$ sont représentées par des points $(\alpha, \beta)' \in \mathbb{R}^2$, avec $\alpha \geq -1$ (c'est la région à droite de la ligne verticale en pointillés dans la Figure 4.5). En regardant les projections des V_i dans l'espace engendré par W_1 , on voit que, $\Pi_{\text{Sp}(w_1)} v_i \in V_{\mu_0}(\mathbb{R})$, pour $1 \leq i \leq 4$. Les Propositions 4.2.6 et 4.2.9 assurent alors que l'ensemble de mesures de probabilités

$$G_1 = \{ \nu_{1,t} := \exp_{\mu_0}(tw_1) \mid t \in \mathbb{R}, 1 + t\alpha_1 \geq 0 \},$$

est la première GPG empirique. Grâce aux Equations (4.34) et (4.35), on sait que chaque mesure $\nu_{1,t} \in G_1$ a pour densité

$$g_{1,t}(x) = f_{\mu_0}((x - b_{1,t})/a_{1,t})/a_{1,t}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.38)$$

avec $a_{1,t} = 1 + t\alpha_1$ et $b_{1,t} = t\beta_1$. Dans la Figure 4.3, nous avons représenté le premier mode de variation géodésique $g_{1,t}$ des densités de la Figure 4.1, pour $-2 \leq t \leq 2$. Comme nous l'avons déjà mentionné la GPCA dans $W_2(\Omega)$ donne une bien meilleure interprétation de la variabilité des données comparé aux résultats donnés par le premier mode de variation linéaire des densités dans $L_{\mu_0}^2(\mathbb{R})$ (voir la Figure 4.2).

Cas de variables qui ne sont pas concentrées

Nous présentons maintenant un exemple pour lequel la PCA standard des logarithmes dans $L_{\mu}^2(\mathbb{R})$ ne conduit pas à une solution de GPCA dans $W_2(\Omega)$. Les mesures ν_1, \dots, ν_4 sont définies comme dans le paragraphe précédent, mais pour des valeurs différentes des paramètres a_i, b_i . Ils sont donnés Table 4.2. Nous avons toujours $\bar{a}_4 = 1$, $\bar{b}_4 = 0$ et $\nu_4^* = \mu_0$. La Figure 4.6, montre que, contrairement à l'exemple précédent, ν_1, \dots, ν_4 sont maintenant bien moins concentrées autour de ν_4^* .

i	1	2	3	4
a_i	0.2	0.2	0.2	3.4
b_i	-3	-1	1	3

TABLE 4.2 – Valeurs des paramètres pour les données non concentrées .

Comme pour les données concentrées, on commence par mettre en œuvre une PCA standard sur les logarithmes dans $V_{\mu_0}(\mathbb{R})$. Dans la Figure 4.7, nous représentons les vecteurs V_i et l'espace linéaire engendré par W_1 . A partir des projections des vecteurs V_i sur l'espace engendré par W_1 , on voit que $\Pi_{\text{Sp}(w_1)} v_1 \notin V_{\mu_0}(\mathbb{R})$. Si bien que la condition $\Pi_{x_0 + \text{Sp}(\tilde{u})} \mathbf{x} \in X$ p.s. de la Proposition 4.2.6 n'est pas vérifiée. On ne peut donc pas conclure que G_1 est un premier GPG.

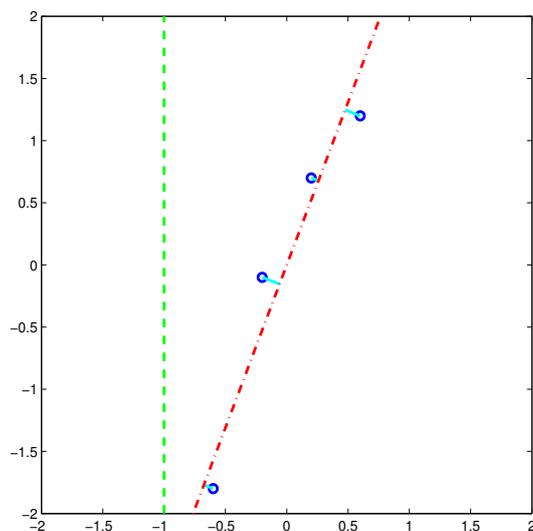


FIGURE 4.5 – Représentation bi-dimensionnelle des fonctions affines $u(x) = \alpha x + \beta$ dans $L^2_{\mu_0}(\mathbb{R})$. Les axes verticaux représentent respectivement la pente et l’abscisse à l’origine α, β . Les points à droite de la ligne verticale $\alpha = -1$, correspondent aux fonctions affines dans $V_{\mu_0}(\mathbb{R})$. Les cercles représentent les vecteurs $V_i = (a_i - 1, b_i)'$, associés aux fonctions $v_i(x) = (a_i - 1)x + b_i$, pour $1 \leq i \leq 4$. Ces fonctions correspondent aux densités représentées dans la Figure 4.1. La ligne en pointillés est l’espace linéaire engendré par le premier vecteur propre W_1 obtenue par la PCA standard des vecteurs V_1, \dots, V_4 .

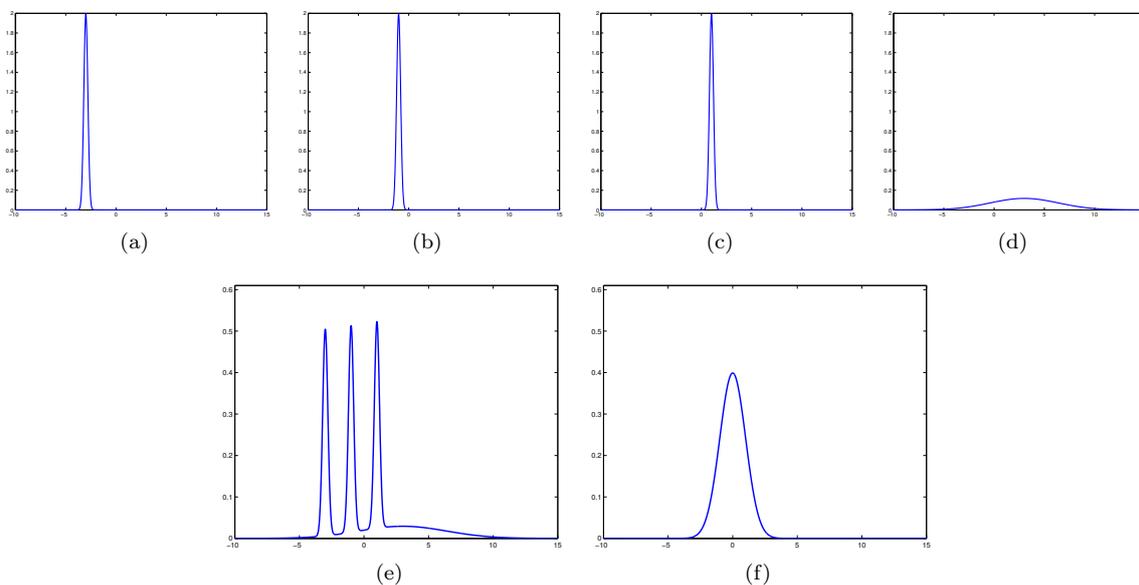


FIGURE 4.6 – Les densités gaussiennes issues du modèle (4.34), de moyennes et variances données dans la Table 4.2. (e) La moyenne empirique des densités dans $L^2(\mathbb{R})$. (f) La densité du barycentre $\nu_4^* \in W_2(\Omega)$ de ν_1, \dots, ν_4 , de densités f_1, \dots, f_4 .

Maintenant, afin de montrer que G_1 n’est effectivement pas un GPG, il suffit de trouver $G_1^* \in \text{CG}_{\mu_0,1}(W)$, tel que $K_W^{(n)}(G^*) < K_W^{(n)}(G_1^*)$. Pour ce faire, nous mettons en oeuvre une CPCA de v_1, \dots, v_4 , avec

$X = A \cap V_{\mu_0}(\mathbb{R})$ et $x_0 = 0$ comme point de référence. D'après la Proposition 4.2.4, cela revient à résoudre

$$\min_{u \in A, \|u\|_{\mu_0}=1} H_X^{(n)}(u) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{\mu_0}^2(v_i, \text{Sp}(u) \cap X). \quad (4.39)$$

Par ailleurs, en posant $Y = \{(\alpha, \beta)' \in \mathbb{R}^2 \mid \alpha \geq -1\}$, le problème d'optimisation (4.39) est équivalent à

$$\min_{U \in \mathbb{R}^2, \|U\|=1} H_Y^{(n)}(U) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^2(V_i, \text{Sp}(U) \cap Y), \quad (4.40)$$

où $V_i = (a_i - 1, b_i)' \in \mathbb{R}^2$, $1 \leq i \leq 4$. Nous avons numériquement trouvé un unique minimiseur $W_1^* = (\alpha_1^*, \beta_1^*)$ de (4.40), si bien que $w_1^*(x) = \alpha_1^* x + \beta_1^*$ est l'unique minimiseur de (4.39).

Si $G_1^* := \{\nu_{1,t}^* := \exp_{\mu_0}(t w_1^*) \mid t \in \mathbb{R}, 1 + t \alpha_1^* \geq 0\} \in \text{CG}_{\mu_0,1}(W)$, on voit que $G_1^* \neq G_1$ et $K_W^{(n)}(G_1^*) < K_W^{(n)}(G_1)$. En effet, à partir de la Figure 4.7, on peut remarquer que non seulement $W_1^* \neq W_1$ mais aussi que $H_Y^{(n)}(W_1^*) < H_Y^{(n)}(W_1)$.

Remarque 4.2.10. Il faut bien noter ici que G_1^* n'est pas forcément un premier GPG empirique. En effet, G_1^* est un minimiseur de $K_W^{(n)}(G)$ sur les ensembles $G \in \text{CG}_{\mu_0,1}(W)$ vérifiant $G \subset \{\nu^{(a,b)} \mid (a,b) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}\}$. Le fait de savoir si G_1^* est ou pas un premier GPG empirique reste une question ouverte.

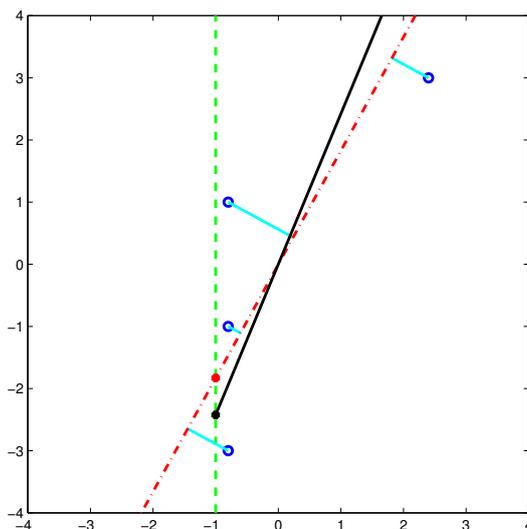


FIGURE 4.7 – Même interprétation que pour la Figure 4.5. La ligne en pointillés est l'espace linéaire engendré par le premier vecteur propre W_1 de la PCA standard de V_1, \dots, V_4 . La ligne pleine est l'ensemble convexe $\text{Sp}(W_1^*) \cap Y$ où $W_1^* = (\alpha_1^*, \beta_1^*)$ est le minimiseur de (4.40). Le point de la ligne pleine est la projection de $V_1 = (0.2, -3)$ sur $\text{Sp}(W_1^*) \cap Y$, le point sur la ligne en pointillés est la projection de V_1 sur $\text{Sp}(W_1) \cap Y$.

4.2.6 Etude de la convergence

Consistance de la CPCA empirique

Les notations utilisées ici sont celles de la Section 4.2.3; toutes les limites seront prises pour $n \rightarrow \infty$. Soient $x_0 = \mathbb{E}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ des copies i.i.d. de \mathbf{x} et $\bar{\mathbf{x}}_n := \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i / n$ leur moyenne empirique. On sait par la loi forte des grands nombres dans un espace de Hilbert (voir [167]) que $\bar{\mathbf{x}}_n \rightarrow x_0$ p.s.. Soit $\mathbf{K}_X^{(n)}(C) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d^2(\mathbf{x}_i, C)$ la version empirique de $K_X^{(n)}$. Le Théorème 4.2.4 affirme que, pour une certaine

topologie (que nous préciserons un peu plus tard), la GPCC empirique de $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ converge vers la GPCC de \mathbf{x} (le résultat analogue pour la NPCC est omis).

Considérons $\mathcal{G}_{x_0,k}(X)$ l'ensemble des GPCC de \mathbf{x} , avec pour point de référence $x_0 = \mathbb{E}(\mathbf{x})$ et $\mathcal{G}_{n,k}(X) := \text{Argmin}_{C \in \text{CC}_{\bar{\mathbf{x}}_n,k}(X)} \mathbf{K}_X^{(n)}(C)$ l'ensemble aléatoire des GPCC empiriques de $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ avec pour point de référence $\bar{\mathbf{x}}_n$ (ces notions ont été définies aux Définitions 4.2.5 et 4.2.7). Commençons par définir, la notion de convergence d'ensemble avec laquelle nous allons travailler.

Définition 4.2.15. On dira que les GPCC empiriques sont consistants et on notera alors $\mathcal{G}_{n,k}(X) \rightarrow \mathcal{G}_{x_0,k}(X)$ p.s., si pour tout choix mesurable de $C_n \in \mathcal{G}_{n,k}(X), n \geq 1$, et $C \in \mathcal{G}_{x_0,k}(X)$, on a

- (a) $\mathbf{K}_X^{(n)}(C_n) \rightarrow \mathbf{K}_X(C)$ p.s., et
- (b) les points d'accumulations de (C_n) appartiennent à $\mathcal{G}_{x_0,k}(X)$ p.s..

Le lemme qui suit montre que les indicatrices de $\text{CC}_{x_n,k}(X)$ (notés $\chi_{n,k}$) Γ -converge vers l'indicatrice $\text{CC}_{x,k}(X)$ (notée χ_k) lorsque $x_n \rightarrow x \in X$. Les notions de Γ -convergence et d'indicatrice utilisées ici sont rappelées dans la Section 4.2.8.

Lemme 4.2.2. *Soit $x_n \in X, n \geq 1$, avec $x_n \rightarrow x \in X$, si X est compact alors $\Gamma\text{-lim}_{n \rightarrow \infty} \chi_{n,k} = \chi_k$.*

Théorème 4.2.4 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Si X est compact alors $\mathcal{G}_{n,k}(X) \rightarrow \mathcal{G}_{x_0,k}(X)$ p.s.*

Consistance de la GPCA empirique

Nous reprenons ici les notations de la Section 4.2.4, avec comme mesure de référence $\nu_0 = \nu^*$, la moyenne de Fréchet de ν . Soient ν_1, \dots, ν_n des copies i.i.d. de ν et ν_n^* leur moyenne de Fréchet et $\mathbf{x} = \log_\mu(\nu)$, $\mathbf{x}_i = \log_\mu(\nu_i), i = 1, \dots, n$ et $x_0 = \log_\mu(\nu_0)$. Nous prenons la version empirique $\mathbf{K}_W^{(n)}(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{W_2}^2(\nu_i, G)$ du coût $\mathbf{K}_W^{(n)}$.

Proposition 4.2.11. *thm[Bigot, Gouet, Klein, López [36]] $d_{W_2}(\nu_n^*, \nu_0) \rightarrow 0$ a.s.*

Remarque 4.2.11. Le résultat de la Proposition 4.2.11 est une conséquence de la loi forte des grands nombres de Ziezold's [256].

Nous rappelons que si Ω est compact alors $W_2(\Omega)$ l'est aussi. Dans ce cas $\text{CL}(W)$ est compact (ceci peut-être vu en utilisant le Théorème 4.2.1 et la Proposition 4.2.3). Par suite si Ω est compact, toute suite $G_n \in \mathcal{G}_{n,k}(W), n \geq 1$, possède une sous suite qui converge dans $\text{CL}(W)$.

Soit $\mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$ l'ensemble des GPG de ν , pour la mesure de référence $\nu_0 = \nu^*$. Soit

$$\mathcal{G}_{n,k}(W) := \text{Argmin}_{G \in \text{CG}_{\nu_n^*,k}(W)} \mathbf{K}_W^{(n)}(G)$$

l'ensemble aléatoire des GPG empiriques de ν_1, \dots, ν_n , pour la mesure de référence ν_n^* , et

$$\mathcal{G}_{n,k}(V_\mu(\Omega)) := \text{Argmin}_{C \in \text{CC}_{\bar{\mathbf{x}}_n,k}(V_\mu(\Omega))} \mathbf{K}_X^{(n)}(C).$$

Nous définissons maintenant la notion de convergence que nous allons utiliser par la suite.

Définition 4.2.16. On dira que les GPG empirique sont consistants et on notera alors $\mathcal{G}_{n,k}(W) \rightarrow \mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$ p.s., si pour tout $G_n \in \mathcal{G}_{n,k}(W), n \geq 1$, et tout $G \in \mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$, on a à la fois

- (a) $\mathbf{K}_W^{(n)}(G_n) \rightarrow \mathbf{K}_W(G)$ a.s., et
- (b) les points d'accumulation de (G_n) appartiennent p.s. à $\mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$.

Théorème 4.2.5 (Bigot, Gouet, Klein, López [36]). *Si Ω est compact alors $\mathcal{G}_{n,k}(W) \rightarrow \mathcal{G}_{\nu_0,k}(W)$ p.s.*

4.2.7 A propos de la GPCA dans $W_2(\Omega)$ et de la PCA dans les sous variétés Riemanniennes

Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction, de nombreuses PCA non-linéaires ont déjà été proposées dans la littérature pour l'analyse de données de sous-variétés Riemanniennes courbées [99, 131]. Pour ce faire, il existe au moins deux approches très populaires que nous rappelons :

1. faire une PCA standard des données projetées dans l'espace tangent à leur moyenne de Fréchet, puis relever la PCA dans la sous-variété ;
2. faire une analyse en géodésiques principales (PGA), c'est-à-dire une PCA le long des géodésiques.

Commençons par rappeler brièvement le fonctionnement de ces deux méthodes qui conduisent en général à des résultats différents pour les sous-variétés courbées [99, 131, 232].

Soit y_1, \dots, y_n des points d'une sous variété Riemannienne complète \mathcal{M} qui possède une distance géodésique $d_{\mathcal{M}}$. Afin de définir une analyse de type PCA dans \mathcal{M} ; on a en premier lieu besoin d'une notion de moyenne. Il a été suggéré par [99] que la bonne notion de moyenne dans ce cadre est la notion de moyenne de Fréchet. Cette notion est définie comme un élément $z \in \mathcal{M}$ (pas nécessairement unique) minimisant $\sum_{i=1}^n d_{\mathcal{M}}^2(y, y_i)$ c'est-à-dire que

$$z \in \underset{y \in \mathcal{M}}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{\mathcal{M}}^2(y, y_i).$$

Nous renvoyons à [25] pour plus de détails sur les moyennes de Fréchet dans les sous-variétés Riemanniennes. Soit maintenant $T_z\mathcal{M}$ l'espace tangent à \mathcal{M} au point z . Si v est un vecteur de l'espace tangent $T_z\mathcal{M}$, alors il existe une unique géodésique $\gamma_v(t)$ ayant v comme vitesse initiale ($t \in \mathbb{R}$ est le paramètre de temps). La carte exponentielle Riemannienne $\exp_z : T_z\mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$, définie par $\exp_z(v) = \gamma_v(1)$ est alors un difféomorphisme d'un voisinage de zéro et son application réciproque est la carte logarithmique Riemannienne notée \log_z .

(1) La PCA par une linéarisation dans l'espace tangent Dans cette approche les données y_1, \dots, y_n sont projetées sur l'espace tangent $T_z\mathcal{M}$ à l'aide de la carte logarithmique. On a alors en main $x_i = \log_z(y_i)$, $i = 1, \dots, n$. On procède alors à une PCA standard des x_1, \dots, x_n dans l'espace tangent linéaire $(T_z\mathcal{M}, \langle \cdot, \cdot \rangle, \|\cdot\|)$, ce qui revient à calculer la première composante principale v^{lin} , qui n'est autre que le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de l'opérateur de covariance

$$Kv = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle x_i - \bar{x}_n, v \rangle (x_i - \bar{x}_n), \quad v \in T_z\mathcal{M},$$

où $\bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$. Finalement v^{lin} est renvoyée dans \mathcal{M} à l'aide de la carte exponentielle \exp_z . On obtient alors $w^{lin} = \exp_z(v^{lin})$, qui représente une première notion de direction principale de la variabilité géodésique. Un défaut majeur de ce type de PGA est que les distances ne sont en général pas préservées dans l'étape de projection (i.e. $\|x_i - x_j\| \neq d_{\mathcal{M}}(y_i, y_j)$).

(2) PGA dans \mathcal{M} La notion de PCA le long des géodésiques de \mathcal{M} est motivée par la formulation (4.30), qui caractérise la PCA standard. Dans un premier temps on calcule

$$v^{geo} = \underset{v \in T_z\mathcal{M}, \|v\|=1}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_{\mathcal{M}}^2(y_i, G_v),$$

où $G_v = \{\exp_z(tv), t \in \mathbb{R}\}$ et $d_{\mathcal{M}}(y, G) = \inf_{y' \in G} d_{\mathcal{M}}(y, y')$ pour $y \in \mathcal{M}$ et $G \subset \mathcal{M}$. Puis dans un second temps, on projette l'élément $v^{geo} \in T_z\mathcal{M}$ sur \mathcal{M} , en calculant $w^{geo} = \exp_z(v^{geo})$. Cela conduit à une nouvelle notion de direction principale de variabilité géodésique des données. En général, on a $w^{lin} \neq w^{geo}$ avec égalité lorsque \mathcal{M} est un espace de Hilbert.

Finalement, la PCA par linéarisation dans l'espace tangent et la PCA le long des géodésiques peuvent conduire à des résultats réellement différents. Une analyse détaillée des différences entre ces deux approches

peut-être trouvée dans [232].

Dans cette partie, nous avons étudié l'analyse de données issues de l'espace de Wasserstein $W_2(\Omega)$, qui même s'il n'est pas une sous-variété Riemannienne possède une pseudo-structure Riemannienne suffisamment riche pour pouvoir y définir une notion de PCA géodésique. A l'aide de l'analogie des cartes exponentielle et logarithmique, nous avons introduit la version correspondante de la PCA standard dans l'espace tangent, avec retour dans $W_2(\Omega)$.

Notre approche possède une originalité qu'il est important de souligner. On peut procéder à une PCA dans l'espace tangent sous certaines contraintes de convexités, ce qui est équivalent à la PCA géodésique dans $W_2(\Omega)$. Cela a motivé la définition de la PCA convexe (voir Section 4.2.3), qui est une méthode général pour analyser des données d'un sous-ensemble fermé et convexe d'un espace de Hilbert. La CPCA appliquée aux logarithmes des données est intéressante car elle est plus simple que la PCA géodésique dans $W_2(\Omega)$ tout en restant plus complexe que la PCA standard. Il est aussi bon de noter que si les données sont suffisamment concentrées; les deux approches fournissent le même résultat.

La terminologie de PCA géodésique (GPCA) a été utilisée précédemment par Huckemann et al. dans [131] pour généraliser la PCA à des sous-variétés Riemannienne. Leur approche à des points communs avec la PGA introduite par [99].

4.2.8 Appendice

Fonctions croissantes et quantiles

Nous rappelons ici quelques faits bien connus sur les fonctions croissantes et sur les quantiles (pour plus de détails voir [93], [216]). Dans cette partie μ et ν sont des mesures de probabilités sur $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ et F_ν est la fonction de répartition (càd-làg) de ν et $L^2(0, 1)$ l'espace des fonctions de carrés intégrables par rapport à la mesure de Lebesgue sur $(0, 1)$.

Définition 4.2.17. Soit $A \subseteq \mathbb{R}$ et $T : A \rightarrow \mathbb{R}$.

- (a) T est croissante sur $B \subseteq A$ si $\forall x, y \in B, x < y$ implique $T(x) \leq T(y)$.
- (b) T est μ -p.p.croissante s'il existe $B_\mu \in \mathcal{B}(\Omega)$, avec $B_\mu \subseteq A$, $\mu(B_\mu) = 1$ et T croissante sur B_μ (on considère ici que μ est une mesure de probabilité sur A).

Remarque 4.2.12. Notons qu'une fonction μ -p.p. croissante n'a pas forcément une version croissante sur A .

Lemme 4.2.3. Soit $T \in L^2(0, 1)$ p.p. croissante. Alors, il existe $\nu \in W_2(\mathbb{R})$ tel que $T = F_\nu^-$ p.p.

Proposition 4.2.12. Soit Ω un intervalle de \mathbb{R} , alors, l'ensemble des fonctions quantiles $\{F_\nu^- | \nu \in W_2(\Omega)\}$ est un convexe fermé convexe de $L^2(0, 1)$.

La K -convergence

Nous présentons ici le concept de convergence approprié à la convergence d'ensembles convexes d'un espace métrique (X, d) .

Définition 4.2.18. Soient $C, C_n \subset X, n \geq 1$. On dit que la suite d'ensembles $(C_n)_n$ converge vers C pour la topologie de Kuratowski et sera noté $K\text{-lim}_{n \rightarrow \infty} C_n = C$, si

- (i) Pour tout $x \in C$, il existe $x_n \in C_n, n \geq 1$, telle que $x_n \rightarrow x$ et
- (ii) pour tout $x_n \in C_n, n \geq 1$, et pour tout point d'accumulation x de $(x_n)_n$, $x \in C$.

Définition 4.2.19. – La distance de $x \in X$ à $B \subseteq X$ est définie par $d(x, B) := \inf_{x' \in B} d(x, x')$.

– La distance de $A \subseteq X$ à B est définie par $d(A, B) := \sup_{x \in A} d(x, B)$.

– La distance de Hausdorff entre A et B est définie par

$$h(A, B) := \max\{d(A, B), d(B, A)\}. \quad (4.41)$$

Remarque 4.2.13 (Voir [199, 21]). La notion de convergence d'ensemble pour la distance de Hausdorff est plus forte que celle au sens de Kuratowski. Néanmoins ces deux notions coïncident lorsque X est compact.

Définition 4.2.20. On définit l'espace métrique $\text{CL}(X)$ comme l'ensemble de tous les ensembles convexes fermés et non vides de X , muni de la distance de Hausdorff h .

Proposition 4.2.13. Pour tout $x \in X$ l'application $d(x, \cdot)$ est continue sur $\text{CL}(X)$.

Lemme 4.2.4. Soient $B, C, B_n, C_n \subset X$, avec pour tout $n \geq 1$ $B_n \subset C_n$, si $K\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} B_n = B$ et si $K\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} C_n = C$, alors $B \subset C$.

La Γ -convergence (voir [16, 80])

Définition 4.2.21. Soit $F, F_n : X \mapsto \overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{+\infty, -\infty\}, n \geq 1$. On dit que la suite de fonction $(F_n)_n$ Γ -converge vers F et on notera $\Gamma\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} F_n = F$ si pour tout $x \in X$, on a

- (i) $F(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} F_n(x_n)$, pour tout $(x_n)_n \subset X, n \geq 1$, avec $x_n \rightarrow x$, et si
- (ii) il existe une suite $(x_n)_n \subset X, n \geq 1$, avec $x_n \rightarrow x$, telle que $F(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x_n)$.

Définition 4.2.22. L'indicatrice de $A \subset X$ est la fonction $\chi_A : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie par $\chi_A(x) = 0$, if $x \in A$, et $\chi_A(x) = +\infty$, si $x \notin A$.

Lemme 4.2.5 (voir [16], Proposition 4.15.). Soit $A, A_n \subset X, n \geq 1$. Alors $K\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ si et seulement si $\Gamma\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \chi_{A_n} = \chi_A$.

Chapitre 5

Deux exemples de bornes de risques minimax en statistique mathématique

En statistique, dans toute procédure de classification, il est crucial de quantifier la qualité de l'estimateur obtenu. On commence généralement par montrer qu'il est consistant puis souvent qu'il est asymptotiquement normal. On peut se poser des questions de qualités à distance finie et tenter d'y répondre à l'aide d'inégalités de concentration. Une question naturelle est de se demander si on a obtenu le meilleur estimateur possible. Evidemment, il n'existe pas de réponse universelle à cette question. Il existe plusieurs notions d'optimalité en statistique, on peut penser par exemple à l'efficacité asymptotique ou de celle liée aux bornes minimax. Dans ce chapitre, nous étudions deux problèmes distincts. Tout d'abord, nous nous intéressons au problème classique de la classification binaire supervisée ; nous étudions l'algorithme des plus proches voisins, pour lequel, nous expliquons comment et sous quelles hypothèses, cet algorithme atteint des vitesses de classification minimax. Ces résultats ont été obtenus en collaboration avec Sébastien Gadat et Clément Marteau, le lecteur pourra se rapporter à l'article correspondant [105]. Ensuite, nous nous intéressons à un problème d'estimation de l'intensité d'un processus ponctuel de Poisson. Nous proposons une procédure d'estimation basée sur les ondelettes de Meyer et montrons que cette procédure atteint elle aussi des vitesses minimax. Ces résultats ont été obtenus en collaboration avec Jérémie Bigot, Sébastien Gadat et Clément Marteau, le lecteur pourra se rapporter à l'article correspondant [34].

5.1 Etude de la méthode de classification des plus proches voisins dans des espaces de dimensions finis

Dans cette section, nous présentons un bref résumé des résultats obtenus avec Sébastien Gadat et Clément Marteau. Pour plus de détails et pour les preuves des résultats, nous invitons le lecteur à lire l'article correspondant [105].

5.1.1 Introduction

On s'intéresse ici au problème de la classification supervisée binaire. Il s'agit de prédire le label $Y \in \{0, 1\}$ d'une variable observée $X \in \mathbb{R}^d$. Afin de prédire le label Y de X , on suppose que l'on dispose d'un échantillon d'apprentissage $\mathcal{S}_n = \{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)\}$, où les couples (X_i, Y_i) sont i.i.d. de loi commune $\mathbb{P}_{X,Y}$. Cet échantillon d'apprentissage permet de mieux comprendre la loi jointe du couple (X, Y) et de donner ainsi une prédiction pertinente du label. La fonction de régression η définie par

$$\eta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x], \forall x \in \mathbb{R}^d$$

joue un rôle central. Etant donné $x \in \mathbb{R}^d$, la valeur $\eta(x)$ est la probabilité de donner au label Y la valeur 1 sachant que $\{X = x\}$. Evidemment, la fonction η est en pratique inconnue, si bien que les règles de

prédiction ne pourront être basées que sur l'échantillon d'apprentissage \mathcal{S}_n .

Il existe de nombreux algorithmes pour traiter ce problème de classification, nous renvoyons aux travaux [47, 87] pour une introduction complète aux problèmes de classification supervisée. On peut diviser les procédures de classifications existantes en au moins trois familles.

- *Les approches basées sur des considérations entropiques (Empirical Risk Minimization (ERM))* : Etant donné un classifieur, l'erreur de mauvaise classification peut être estimée empiriquement à l'aide de l'échantillon d'apprentissage. L'algorithme ERM choisit alors (parmi une famille de candidats) le classifieur qui minimise le risque empirique. Il existe plusieurs études [186, 20, 17, 172] qui fournissent une description presque complète de leur performance statistique. Dans un contexte similaire, des procédures d'aggrégations initiées par [104], ont été analysées en profondeur par [163].
- *Les approches basées sur des considérations géométriques ou sur la théorie de l'information* : Par exemple le classifieur communément appelé support vector machine (SVM) a été intensivement étudié. Il présente un coût de calcul faible et possède d'excellentes performances statistiques (voir entre autres [245, 234, 39]). Les méthodes construites à partir d'arbres de classification ou de régression sont basées sur une partition dyadique de l'espace. elles ont été introduites par [52] et fortement améliorées par [9] et par [51]. Ces méthodes ont été théoriquement développées par [28].
- *Les règles Plug-in* : L'idée principale est d'essayer de copier le classifieur de Bayes en injectant un estimateur de la fonction η . On renvoie à [120] pour avoir une vision d'ensemble sur ces méthodes et à [29] et [17] pour des résultats théoriques récents.

L'algorithme des plus proches voisins appartient aux deux dernières classes de méthodes présentées ci-dessus. Il correspond à un estimateur plug-in ayant une interprétation géométrique simple. Cet algorithme a été énormément étudié ces dernières années, il a été introduit dans les travaux de [97] et [74]. on peut également citer [235, 118, 119, 88, 86] pour leurs contributions significatives sur l'étude de cette méthode. Dernièrement, cet algorithme a été à nouveau étudié d'un point de vue de la statistique mathématique, par exemple [67] examine le cas des espaces métriques généraux et identifie l'importance de l'hypothèse dites de Besicovitch, [123] s'intéresse à l'influence de l'entier k sur l'excès de risque tandis que [224] présente une amélioration de l'algorithme classique.

La plupart des résultats obtenus pour les classifieurs de type ERM, SVM ou plug-in, sont basés sur des considérations de complexité (dimension de Vapnik, entropie métrique). Dans ce travail, on utilisera plutôt le comportement asymptotique des probabilités de petites boules (voir [169] et les références citées dans ce travail). Ces probabilités peuvent être vues comme la quantité duale de l'entropie (voir [168]). Nous allons aussi nous intéresser à la situation plus complexe où les densités ne seront plus minorées sur leur support (cas par exemple des mesures à support non compacts). L'étude de ce cas plus complexe nécessitera, l'introduction d'hypothèses de *régularité* et de *masse minimale* (voir la section 5.1.2 pour plus de détails). En particulier, en tenant compte d'hypothèses de régularité de la fonction η , il est possible d'améliorer la prédiction du label Y . En effet, il est bien connu (voir par exemple [119]), que la vitesse de classification associée est comparable à celle obtenue en estimation et est donc supérieure à \sqrt{n}^{-1} . Cependant, il a été prouvé dans [186] que de meilleures vitesses peuvent être obtenues sous une hypothèse supplémentaire dites de *marge*. Cette hypothèse prend en compte le comportement de la loi de (X, Y) au voisinage de la frontière $\{\eta = 1/2\}$.

Dans ce travail, nous allons donc étudier l'algorithme des plus proches voisins sous hypothèses de marge et lorsque la loi marginale de X n'est pas forcément à support compact ou minorée. Nos contributions peuvent se résumer en trois catégories.

Vitesse de convergence pour des densités minorées Le premier résultat concerne, l'optimalité du classifieur des plus proches voisins Φ_n dans le cas où les densités sont à support compact. On montre, dans ce cas, que l'algorithme des plus proches voisins atteint la vitesse de convergence minimax pour l'excès de risque obtenue par [17] (voir le Théorème 5.1.2 ci-dessous). En particulier sous des hypothèses plus ou moins

classiques sur la distribution F du couple (X, Y) on montre que

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq Cn^{-\frac{1+\alpha}{2+d}},$$

α représente ici le paramètre de marge, d la dimension du problème et $\mathcal{R}(\Phi)$ l'erreur de mauvaise classification étant donné un classifieur Φ (Φ^* est le classifieur de Bayes et Φ_n celui des plus proches voisins).¹ Nos résultats sont une généralisation de ceux obtenus dans [123], ces derniers ne prennent pas en compte la marge α .

Vitesse de convergence pour des densités générales Dans un second temps, on étudie le comportement du classifieur des plus proches voisins lorsque la densité marginale μ de X n'est plus minorée sur son support. Cette classe de modèle est fondamentale car elle contient entre autre les densités à support non compact. Afin de pouvoir traiter ces modèles, on introduit une hypothèse supplémentaire permettant de contrôler la *queue* des distributions et on montre alors que

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq Cn^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

On verra dans la suite que pour obtenir de telles majorations, on doit permettre au nombre de voisins k choisit de dépendre de la position de X . Notons que la condition portant sur la *queue* de distribution de X permet de décrire le comportement de la densité μ dans un voisinage de $\{\mu = 0\}$.

Bornes inférieures Finalement, nous obtenons des bornes inférieures pour le problème de classification supervisée. Ces bornes généralisent (dans un contexte légèrement différent) celles obtenues par [17]. On montre que l'hypothèse de queue est fondamentale pour assurer la consistance uniforme dans le cas non-compact. On montre ensuite, comment sont liées les bornes inférieures et supérieures.

La suite de ce chapitre est organisé de la façon suivante. La Section 5.1.2 donne la description précise du problème de classification et de l'algorithme des plus proches voisins qui sera étudié par la suite. Nous étudions dans la Section 5.1.3 le cas des densités minorées et on montre alors que la vitesse de convergence minimax est atteinte sous des hypothèses relativement faibles. L'étude du cas général est proposée dans la Section 5.1.4.

Nous utiliserons dans la suite les notations suivantes :

- $\mathbb{P}_{X,Y}$ est la loi du couple (X, Y) ;
- \mathbb{P}_X la loi de X que l'on suppose absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue de densité μ ;
- $\mathbb{P}_{\otimes^n} = \otimes_{i=1}^n \mathbb{P}_{(X_i, Y_i)}$ et $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{(X,Y)} \otimes \mathbb{P}_{\otimes^n}$;
- $\mathbb{E}[\cdot]$, $\mathbb{E}_X[\cdot]$ et $\mathbb{E}_{\otimes^n}[\cdot]$ sont les espérances prises respectivement par rapport aux mesures \mathbb{P} , \mathbb{P}_X et \mathbb{P}_{\otimes^n} ;
- pour toutes suites de réels $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(b_n)_{n \in \mathbb{N}}$, on écrira $a_n \lesssim b_n$ (resp. $a_n \sim b_n$) s'il existe une constante $C \geq 1$ telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$ on ait $a_n \leq Cb_n$ (resp. $b_n/C \leq a_n \leq Cb_n$).

5.1.2 Cadre statistique et le classifieur des plus proches voisins

Le problème de la classification supervisée

On s'intéresse au problème de la classification binaire supervisée (on renvoie à [87] pour une introduction complète à ce problème). On suppose que l'on dispose d'un échantillon i.i.d. $\mathcal{S}_n := (X_i, Y_i)_{i=1 \dots n} \in (\Omega \times \{0, 1\})^n$, dont la distribution est \mathbb{P}_{\otimes^n} et où Ω est un ouvert contenant $\text{Supp}(\mu)$ le support de μ . Etant donné, une nouvelle donnée X , notre objectif est de prédire son label Y . Pour ce faire, nous utilisons un classifieur qui fournit une règle de décision. Formellement un classifieur est une application mesurable Φ de \mathbb{R}^d dans $\{0, 1\}$. Etant donné un classifieur Φ son erreur de mauvaise classification est donnée par

$$\mathcal{R}(\Phi) = \mathbb{P}(\Phi(X) \neq Y).$$

1. Ce résultat a été parallèlement établi dans le travail récent [224]

Evidemment, les classifieurs les plus intéressants sont ceux associés à la plus petite erreur possible. Dans ce contexte, on sait (voir *e.g.*, [47]) que le classifieur dit de Bayes noté Φ^* , défini par

$$\Phi^*(X) = \mathbf{1}_{\{\eta(X) > \frac{1}{2}\}}, \text{ où } \eta(x) := \mathbb{E}[Y|X = x], \forall x \in \Omega, \quad (5.1)$$

minimise l'erreur de mauvaise classification, *i.e.*,

$$\mathcal{R}(\Phi^*) \leq \mathcal{R}(\Phi), \forall \Phi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \{0, 1\}.$$

Le classifieur Φ^* fournit la meilleure règle de décision possible dans le sens où il conduit à la plus petite erreur de mauvaise classification. Malheureusement Φ^* dépend de la fonction de régression η qui est inconnue (elle dépend de la distribution de (X, Y)). Ainsi Φ^* peut être vu comme un repère (souvent appelé oracle dans la communauté des statisticiens), le jeu consistant maintenant à construire un classifieur Φ qui se rapproche le plus possible et le plus vite possible (en terme d'erreur de classification) de Φ^* . En particulier l'excès de risque (parfois nommé *regret*) défini par

$$\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*),$$

joue un rôle crucial. Dans la suite, on va s'intéresser aux propriétés statistiques du classifieur des plus proches voisins (un peu de patience sa définition formelle arrive bientôt) construit à partir de l'échantillon \mathcal{S}_n . On focalisera notre étude sur les propriétés asymptotiques de l'excès de risque au travers du paradigme **minimax**. Etant donné un ensemble \mathcal{F} de distributions possible pour (X, Y) , le risque minimax est défini par

$$\delta_n(\mathcal{F}) := \inf_{\Phi} \sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*)],$$

ici l'infimum est pris sur tous les classifieurs \mathcal{S}_n mesurables. Un classifieur Φ_n est dit minimax sur l'ensemble \mathcal{F} si il existe une constante C pour laquelle

$$\sup_{F \in \mathcal{F}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq C\delta_n(\mathcal{F}).$$

L'ensemble \mathcal{F} sera précisé un peu plus loin, il dépendra du comportement de (μ, η) sur \mathbb{R}^d . Ce comportement sera précisé aux travers d'hypothèses de régularité de marge et de masse minimale.

La règle des plus proches voisins

Dans ce travail, on concentre nos efforts sur le classifieur des plus proches voisins qui est peut-être une des procédures qui a été la plus étudiée. On se place dans $(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|)$ où $\|\cdot\|$ est une distance de référence (pas forcément la distance euclidienne). Une fois récupéré notre échantillon \mathcal{S}_n et fixé un point $x \in \mathbb{R}^d$, on commence par réordonner notre échantillon $(X_{(j)}(x), Y_{(j)}(x))_{1 \leq j \leq n}$ en fonction des distances $\|X_i - x\|$, concrètement

$$\|X_{(1)}(x) - x\| \leq \|X_{(2)}(x) - x\| \leq \dots \leq \|X_{(n)}(x) - x\|.$$

Dans ce contexte $X_{(m)}(x)$ est le m -ième plus proche voisin de x pour la distance $\|\cdot\|$ et $Y_{(m)}(x)$ est son label. Fixons maintenant un nombre de voisins k dans \mathbb{N} , le principe de l'algorithme des plus proches voisins est de construire une règle de décision basée sur les k -plus proches voisins de l'entrée X . Le classifieur \mathcal{S}_n -mesurable $\Phi_{n,k}$ est donné par

$$\Phi_{n,k}(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(X) > \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Pour tout $x \in \Omega$, le terme $\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(x)$ est en fait un estimateur de la fonction de régression $\eta(x)$. En particulier $\Phi_{n,k}$ peut se réécrire de la façon suivante

$$\Phi_{n,k}(X) = \mathbf{1}_{\{\hat{\eta}_n(X) > 1/2\}} \quad \text{où} \quad \hat{\eta}_n(x) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Y_{(j)}(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (5.3)$$

Ainsi, cette procédure peut être vue comme une procédure dite *plug-in*. L'entier k joue le rôle de *paramètre de régularisation*. Si k est trop petit, le classifieur $\Phi_{n,k}$ n'utilisera pour prendre sa décision qu'une petite partie des voisins de X ce qui conduira à une variance élevée lors de la procédure de classification. Inversement si k est trop grand, on introduira un biais, dû au fait que l'on prendra une décision basée sur des observations qui sont trop éloignées de X . Le choix de k est crucial, il gouvernera la qualité de notre procédure. En particulier $k = k_n$ dépendra de n et tendra vers l'infini avec n . Il est maintenant temps d'introduire les hypothèses qui permettent d'exhiber la valeur optimale paramètre k_n .

Hypothèses

Il est bien connu qu'aucune prédiction valable n'est possible sans hypothèses sur les distributions (voir [87]). Nous allons donc restreindre la classe des distributions de (X, Y) autorisées.

Comme l'algorithme des plus proches voisins est un algorithme de classification *plug-in*, il est raisonnable de penser que des propriétés de régularités de la fonction η permettront d'améliorer le processus de classification. Lorsque η est régulière, les valeurs respectives de $\eta(x_1)$ et de $\eta(x_2)$ sont comparables dès que x_1, x_2 sont suffisamment proches. Autrement dit, on peut inférer le signe de $\eta(x) - \frac{1}{2}$ à partir de ceux des voisins de x .

hypothèse A1 (Régularité) *La fonction de régression η appartient à l'ensemble des fonctions Hölder de paramètre 1 et de rayon L (η est L -Lipschitz). Cet espace est noté $\mathcal{C}^{1,0}(\Omega, L)$, il correspond à l'ensemble des fonctions vérifiant*

$$\forall (x_1, x_2) \in \Omega^2, \quad |\eta(x_1) - \eta(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|.$$

Remarque 5.1.1. Il pourrait être tentant de considérer des classes de fonctions plus générales. Cependant, l'algorithme standard des plus proches voisins interdit d'utiliser des indices de régularités supérieurs à 1. Une procédure alternative a été proposée dans [224] : l'idée étant de pondérer les $(Y_{(j)})_{j=1..k}$ à l'aide d'une suite de poids judicieusement choisie. Cette modification complique assez fortement l'analyse statistique et risque donc de déformer les idées que nous développons. Nous avons donc décidé de fixer la régularité de η à 1 (*i.e.* on restreint donc notre étude à $\mathcal{C}^{1,0}(\Omega, L)$).

Nous empruntons notre deuxième hypothèse à [242], elle intervient aussi dans le modèle d'analyse discriminante lisse² [186]).

hypothèse A2 (hypothèse de marge) *Pour tout $\alpha > 0$, il existe une constante $C > 0$ telle que*

$$\mathbb{P}_X \left(0 < \left| \eta(X) - \frac{1}{2} \right| < \epsilon \right) \leq C\epsilon^\alpha, \quad \forall \epsilon > 0.$$

On écrira alors $(\mu, \eta) \in \mathbf{M}_\alpha$.

Le classifieur de Bayes dépend du signe de $\eta(X) - 1/2$. Intuitivement, il semble aisé de deviner le comportement du classifieur lorsque la masse de l'ensemble $\{\eta = 1/2\}$ est petite. Inversement, le processus de décision risque d'être bien plus ardu lorsque $\eta(X)$ est proche de $1/2$ avec grande probabilité. L'hypothèse de marge permet de quantifier la proximité de $\eta(x)$ à $1/2$.

Dans toute la suite, $\mathcal{F}_{L,\alpha}$ désigne l'ensemble des distributions vérifiant à la fois les hypothèses **A1** et **A2**, plus précisément :

$$\mathcal{F}_{L,\alpha} := \left\{ \mathbb{P}_{(X,Y)} : \mathbb{P}_X(dx) = \mu(x)dx \text{ et } \mathcal{L}(Y|X) \sim \mathcal{B}(\eta(X)) \text{ avec } \eta \in \mathcal{C}^{1,0}(\Omega, L) \text{ et } (\mu, \eta) \in \mathbf{M}_\alpha \right\}.$$

Reste maintenant à introduire la dernière hypothèse concernant la distribution marginale de la variable X .

2. smooth discriminant analysis

Hypothèse de masse minimale

hypothèse A3 (hypothèse de masse minimal forte) *Il existe $\kappa > 0$ tel que la densité marginale μ de X vérifie $\mu \in \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ où*

$$\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa) := \left\{ \mathbb{P}_X : \mathbb{P}_X(dx) = \mu(x)dx \mid \exists \delta_0 > 0, \forall \delta \leq \delta_0, \forall x \in \Omega : \mathbb{P}_X(X \in B(x, \delta)) \geq \kappa \mu(x) \delta^d \right\}.$$

Cette hypothèse assure que \mathbb{P}_X possède une masse suffisante sur chaque boule $B(x, \delta)$, la borne inférieure étant contrebalancée par la valeur de la densité en x . En un certain sens les distributions de $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ permettent l'obtention de prédictions fiables de la fonction de régression η . L'hypothèse de masse minimale forte **A3** peut être vue comme un raffinement de l'hypothèse dite de Besicovitch (nous renvoyons à *e.g.*, [84] pour une version de l'hypothèse de Besicovitch utilisée dans un cadre d'estimation ponctuelle ou à [67] pour une présentation générale de cette hypothèse). Notons que l'hypothèse de Besicovitch introduite dans [67] assure que η vérifie la propriété suivante de μ -continuité

$$\forall \epsilon > 0, \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathbb{P}_X \left\{ x : \frac{1}{\mu(B(x, \delta))} \int_{B(x, \delta)} |\eta(z) - \eta(x)| d\mu(z) > \epsilon \right\} = 0. \quad (5.4)$$

Dans notre cadre, comme η est L -Lipschitz (hypothèse **A1**), on peut vérifier que pour tout $x \in \Omega$

$$\int_{B(x, \delta)} |\eta(z) - \eta(x)| \mu(z) dz \leq L \int_{B(x, \delta)} |x - z| \mu(z) dz \leq L \delta \mu(B(x, \delta)).$$

Ce qui implique que la partie droite de (5.4) disparaît dès que $\delta \leq \epsilon/L$. On verra dans la suite que l'hypothèse **A3** est nécessaire pour obtenir des estimés quantitatifs dans un contexte général.

Remarquons que notre hypothèse **A3** ressemble beaucoup à l'hypothèse de densité forte (*Strong Density Assumption*) utilisée dans [17] lorsque la densité μ est minorée sur son support. Dans le cadre présenté dans [17], le support possède des propriétés géométriques dites de (c_0, r_0) -régularité. Ce cadre est au cœur de l'étude présentée dans la Section 5.1.3. L'hypothèse **A3** rappelle aussi la notion d'ensembles standard (standard sets) utilisés dans [64] pour l'estimation de support compact. Nous présentons maintenant quelques exemples de lois qui vérifient l'hypothèse **A3**.

Exemple 5.1.1.

- Dans \mathbb{R}^d , les mesures gaussiennes dont la matrice de covariance n'est pas dégénérée vérifient $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$.
- Les lois de Laplace et celles de Cauchy appartiennent à l'ensemble $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$.

Typiquement, les distributions ne vérifiant pas l'hypothèse **A3** possèdent des oscillations importantes dans la queue de leur distribution (lorsque μ est proche de 0). Dans un tel contexte, on peut considérer alors l'ensemble $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$,

$$\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa) := \left\{ \mathbb{P}_X : \mathbb{P}_X(dx) = \mu(x)dx \mid \exists (\rho, C) \in]0; +\infty[^2, \right. \\ \left. \exists \delta_0 > 0, \forall \delta \leq \delta_0 : \forall x \in \Omega : \mu(x) \geq e^{-C\delta^{-\rho}} \implies \mathbb{P}_X(B(x, \delta)) \geq \kappa \mu(x) \delta^d \right\}.$$

Bien que l'ensemble $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$ soit moins contraignant que $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$, les propriétés statistiques de la règle des plus proches voisins sont les mêmes pour ces deux ensembles de lois. $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$ possède en plus l'avantage d'être caractérisable à l'aide d'un critère analytique explicite (voir la Proposition 5.1.2). Ce n'est malheureusement plus le cas pour l'hypothèse uniforme $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ (il est en effet bien plus difficile d'assurer la borne inférieure sur tout l'espace Ω).

Bien que tous les résultats doivent pouvoir être établis sous l'hypothèse plus faible $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$, nous nous contenterons de la version forte, l'hypothèse **A3**. Dans la Section 5.1.3, on montre l'optimalité de l'algorithme

des plus proches voisins lorsque les densités sont minorées, que les hypothèses de régularité et de marge sont satisfaites et lorsque k judicieusement choisi. Dans la Section 5.1.4, nous verrons que $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ n'est pas encore suffisante pour obtenir des classifieurs consistant lorsque les densités ne sont plus à support compact. On aura besoin d'une hypothèse supplémentaire.

5.1.3 Cas des densités uniformément minorées

consistance minimax de la règle des plus proches voisins

Dans cette partie, on regarde le cas particulier où la densité marginale μ est uniformément minorée par une constante strictement positive μ_- . On obtient alors la borne supérieure suivante

Théorème 5.1.1. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons satisfaites les hypothèses **A1-A3**. Soit $k_n = \lfloor n^{\frac{2}{2+d}} \rfloor$, alors le classifieur des plus proches voisins Φ_{n, k_n} vérifie*

$$\sup_{\mathbb{P}_{X, Y} \in \mathcal{F}_{L, \alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)^{\mu_-}} [\mathcal{R}(\Phi_{n, k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{1+\alpha}{2+d}},$$

où $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)^{\mu_-}$ est l'ensemble des densités de $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ qui sont uniformément minorées par μ_- sur leur support.

Le Théorème 5.1.1 établit une vitesse de convergence pour la règle des plus proches voisins. Implicitement, on s'est restreint ici au cas des observations à support compact, cette restriction est présente dans de nombreuses études (voir entre autres [120], [47], [186] ou [123]). Il est important de noter que notre contexte est compatible avec le cadre considéré dans [17].

Définition 5.1.1 (hypothèse de densité forte (Strong Density Assumption (SDA)), [17]). La distribution marginale de X vérifie l'hypothèse de densité forte si

- elle admet une densité μ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d ,
- il existe deux constantes $(\mu_-, \mu_+) \in]0, +\infty[^2$ pour lesquelles la densité μ vérifie

$$\mu_- \leq \mu(x) \leq \mu_+, \quad \forall x \in \text{Supp}(\mu);$$

- le support de μ est (c_0, r_0) -régulier c'est-à-dire : qu'il existe deux constantes strictement positives c_0 et r_0 telles que pour tout $x \in \Omega$

$$\lambda[\text{Supp}(\mu) \cap B(x, r)] \geq c_0 \lambda[B(x, r)], \forall r \leq r_0.$$

Proposition 5.1.1. *Lorsque la densité est uniformément minorée par une constante strictement positive, les hypothèses SDA et **(A3)** sont équivalentes.*

On peut donc utiliser les résultats de vitesse minimax obtenus dans [17] et énoncer

Théorème 5.1.2 (Théorème 3.3, [17]). *Si les hypothèses **A1-A3** sont vérifiées et s'il existe $\mu_- > 0$ telle que $\mu(x) > \mu_-$ pour tout $x \in \Omega$. Alors la vitesse de classification minimax est minorée et vérifie*

$$\inf_{\Phi} \sup_{\mathbb{P}_{X, Y} \in \mathcal{F}_{L, \alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)^{\mu_-}} [\mathcal{R}(\Phi) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim n^{-\frac{1+\alpha}{2+d}}.$$

Grâce à ce théorème, on peut donc conclure que la règle des plus proches voisins atteint la vitesse de convergence minimax lorsque μ est uniformément minorée.

5.1.4 Cas général pour les espaces de dimension finie

L'hypothèse de queues

Les résultats précédents ne s'appliquent qu'aux problèmes de classifications binaires supervisées pour des entrées à supports compacts et à densités uniformément minorées sur ce support. Ce cadre n'est pas satisfaisant car il ne recouvre pas de nombreuses distributions classiques (par exemple les distributions Gaussiennes, de Laplace, de Cauchy et de Pareto sont exclues). Ainsi ces contraintes paraissent assez peu réalistes. On va donc maintenant étudier le cas où la densité marginale μ de X n'est plus minorée. Le problème est alors le suivant : nous devons maintenant prédire des labels à des endroits où il n'y a "pas" d'observations. Pour pouvoir faire face à ce problème, nous introduisons une nouvelle hypothèse.

hypothèse A4 (hypothèse de queue) *Il existe une fonction ψ croissante dans un voisinage de 0 vérifiant $\psi(\epsilon) \rightarrow 0$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0$ et telle que*

$$\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} := \{ \mathbb{P}_X : \exists \epsilon_0 \in \mathbb{R}_+^* : \forall \epsilon < \epsilon_0, \mathbb{P}_X(\{\mu < \epsilon\}) \leq \psi(\epsilon) \}.$$

$\mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$ correspond au cas particulier $\psi = Id$.

L'objectif de cette hypothèse est d'assurer que l'ensemble où μ est petit possède une petite masse. Dans la Section 5.1.4 nous montrons que l'hypothèse de queue **A4** est incontournable. Puis dans la Section 5.1.4, nous étudions les performances de la règle des plus proches voisins dans ce cadre.

Exemple 5.1.2. Commençons par présenter quelques familles de densités appartenant $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$.

- les distributions de Laplace appartiennent à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$;
- les distributions Gamma $\Gamma(k, \theta)$ appartiennent à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$ avec $\psi(\epsilon) = \epsilon \log(\epsilon^{-1})^{k-1}$;
- les lois de Pareto de paramètre (x_0, k) appartiennent à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$ avec $\psi(\epsilon) = \epsilon^{k/(k+1)}$;
- les lois de Cauchy à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$ avec $\psi(\epsilon) = \sqrt{\epsilon}$;
- les lois Gaussiennes réelles γ_{m,σ^2} de moyenne m et variance σ^2 à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$ avec $\psi(\epsilon) = \epsilon \log(\epsilon^{-1})^{-1/2}$.

Résultats de non consistance universelle

Justifions maintenant l'introduction des ensembles $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ et $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$. Nous allons montrer ici qu'il n'est pas possible d'obtenir des résultats de consistance uniforme si une des deux hypothèses **A3** ou **A4** n'est pas vérifiée.

Théorème 5.1.3. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons que la loi $\mathbb{P}_{X,Y}$ appartienne à l'ensemble $\mathcal{F}_{L,\alpha}$ alors*

- i) Il n'existe pas de règle de classification universellement consistante si les hypothèses **A1-A3** sont satisfaites et **A4** ne l'est pas. En effet, pour tout n , pour toute règle Φ_n et tout $\epsilon < 4^{-\alpha}$, il existe une distribution $\mathbb{P}_{(X,Y)}^n$ dans $\mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ telle que*

$$\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*) \geq \epsilon.$$

- ii) Il n'existe pas de règle de classification universellement consistante si les hypothèses **A1, A2, A4** sont satisfaites et **A3** ne l'est pas. En effet, pour tout n ; pour toute règle Φ_n et tout $\epsilon < 4^{-\alpha}$, il existe une distribution $\mathbb{P}_{(X,Y)}^n$ dans $\mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$ telle que*

$$\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*) \geq \epsilon.$$

Le premier résultat *i)* nous dit que même si l'hypothèse de masse minimale **A3** est satisfaite par la densité de X , il n'est pas possible d'espérer obtenir un résultat de consistance uniforme sur toute la classe de densités considérées. En un certain sens, le support de la variable X semble être trop grand pour pouvoir obtenir de bonnes prédictions sans conditions supplémentaires. L'hypothèse de queues **A4** permettra de compenser ce problème de support. Ce genre de problème a déjà été observé dans des problèmes

d'estimations de densités. On renvoie à [210] et aux références qui y sont citées pour une description plus détaillée de ce problème. Le second résultat *ii*) montre que l'hypothèse de masse minimale **A3** est elle aussi incontournable lorsque les densités ne sont plus à support compact. Cette observation est cohérente avec les études précédentes de [118] et de [86]. Finalement, si le lecteur se donne la peine d'aller lire les preuves de l'article [105] il se rendra compte que tous les résultats de non convergence sont obtenus par constructions d'un réseau de fonctions de régressions η qui oscillent autour de $1/2$ dans un voisinage de l'ensemble $\{\mu = 0\}$. Ainsi, en un certain sens le Théorème 5.1.3 contribue à la compréhension de certaines questions posées dans [60] sur le comportement de la règle des plus proches voisins lorsque η est oscillante.

Vitesse de convergence minimax

Nous sommes maintenant en mesure de décrire précisément la vitesse de convergence minimax lorsque **A2**, **A3** et **A4** sont satisfaites.

Borne minimax inférieure

Théorème 5.1.4. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons que les hypothèses **A1-A3** sont satisfaites et que l'hypothèse **A4** l'est pour $\psi = Id$. Alors*

$$\inf_{\Phi_n} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa) \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim n^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

Le cas général pour des fonctions ψ autres que l'identité sera traité dans le Théorème 5.1.7. Remarquons que l'on retrouve ici la vitesse obtenue par [17] pour les densités à support compact sous l'hypothèse *Mild Density Assumption* pour le cas particulier $\psi = Id$. Cela implique, que dans le cas non compact même avec l'hypothèse supplémentaire sur la queue la vitesse ne peut pas être meilleure que celle obtenue dans le cadre des densités à support compact.

Une borne supérieure pour la règle des plus proches voisins

Lorsque la densité n'est plus uniformément minorée sur son support, l'entier k_n sera choisi de sorte à contrebalancer la probabilité des petites boules dans la queue de distribution. Par exemple lorsque $\psi = Id$, on montre qu'un bon choix pour k_n est

$$k_n := \lfloor n^{\frac{2}{3+\alpha+d}} \rfloor.$$

On peut remarquer que cette valeur diffère notablement de celle de la section précédente.

Théorème 5.1.5. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons que les hypothèses **A1-A3** sont satisfaites et que l'hypothèse **A4** l'est pour $\psi = Id$. Alors si $k_n := \lfloor n^{\frac{2}{3+\alpha+d}} \rfloor$ on a*

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{(1+\alpha)}{(3+\alpha+d)}}.$$

Ces résultats montrent que le prix à payer pour sortir du cas compact est une dégradation de la vitesse de $n^{-(1+\alpha)/(2+d)}$ à au moins $n^{-(1+\alpha)/(2+\alpha+d)}$ (voir par exemple Théorème 5.1.4 lorsque $\psi(\epsilon) \sim \epsilon$). Remarquons que la borne supérieure obtenue ne colle pas à la borne inférieure qui était $n^{-(1+\alpha)/(2+\alpha+d)}$. A ce stade pour obtenir la bonne majoration, il est nécessaire de changer légèrement la construction de nos plus proches voisins. C'est l'objet du paragraphe suivant.

Borne minimax supérieure pour obtenir une règle des plus proches voisins quasi-optimale

La borne supérieure obtenue au Théorème 5.1.5 peut être améliorée si on change la façon de construire le paramètre de régularisation k_n . Jusqu'à présent le nombre k_n de voisins utilisés pour choisir le label de X était le même quelque soit la position de X dans l'espace. Nous allons maintenant faire dépendre ce k_n de

la position x . Cette dépendance reposera fortement sur la valeur de la densité μ au point x . Formellement, pour tout $j \in \mathbb{N}$, on définit

$$\Omega_{n,0} := \left\{ x \in \mathbb{R}^d : \mu(x) \geq n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}} \right\},$$

et

$$\Omega_{n,j} = \left\{ x \in \mathbb{R}^d : \frac{n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}}}{2^j} \leq \mu(x) < \frac{n^{\frac{-\alpha}{2+\alpha+d}}}{2^{j+1}} \right\}.$$

On pose alors $k_{n,0} = \lfloor n^{\frac{2}{2+\alpha+d}} \log(n) \rfloor$ et pour tout $j \in \mathbb{N}$, on utilisera

$$k_n(x) = \lfloor k_{n,0} 2^{-2j/(2+d)} \rfloor \vee 1 \quad \text{lorsque } x \in \Omega_{n,j}. \quad (5.5)$$

En accord avec l'équation (5.5), le nombre de voisins concernés dépend de la position spatiale. Une telle construction par tranches successives peut-être interprétée comme une sélection spatiale adaptative de la fenêtre de lissage. Cette fenêtre est plus petite aux points $x \in \mathbb{R}^d$ pour lesquelles $\mu(x)$ est petite. Cette idée est à rapprocher de celle développée dans [113] pour un problème d'estimation adaptative minimax de densités.

Théorème 5.1.6. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons les hypothèses A1-A3 satisfaites et que l'hypothèse de queue A4 est satisfaite pour $\psi = Id$. Alors si k_n est choisi en accord avec l'équation (5.5), le classifieur des plus proche voisin Φ_{n,k_n}^* vérifie*

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}^*) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim n^{-\frac{(1+\alpha)}{(2+\alpha+d)}} (\log n)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{d}}.$$

Respirons trente secondes et comparons la borne supérieure du Théorème 5.1.6 à la borne inférieure du Théorème 5.1.4. Elles sont égales (enfin presque, il y a un petit logarithme en trop dans la borne supérieure). Il doit être possible de se débarrasser de ce terme logarithme à l'aide d'un nouveau découpage. Ainsi, on peut avancer que le taux minimax exacte lorsque l'hypothèse de queue dépend de $\psi = Id$ est

$$\inf_{\Phi} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},Id} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}^*) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \sim n^{-\frac{1+\alpha}{2+\alpha+d}}.$$

Généralisations

Nous allons maintenant présenter des extensions des résultats précédents (bornes supérieures et inférieures) pour des queues de distribution générales. Nous essaierons aussi de démystifier un peu l'hypothèse de masse minimale $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)$.

Effet de la queue : de $\mathcal{P}_{\mathcal{T},Id}$ à $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$

Théorème 5.1.7. [Gadat, Klein, Marteau [105]] *Supposons que les hypothèses A1-A4 sont satisfaites. Pour toute queue \mathcal{T} paramétrisée par une fonction ψ , on a*

i) Borne inférieure : la vitesse de classification vérifie :

$$\inf_{\Phi_n} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim \epsilon_{n,\alpha,d}^{1+\alpha},$$

où $\epsilon_{n,\alpha,d}$ est solution de

$$n^{-1} = \{\epsilon_{n,\alpha,d}\}^{2+d} \times \psi^{-1}(\{\epsilon_{n,\alpha,d}\}^\alpha). \quad (5.6)$$

ii) Borne supérieure : la règle des plus proches voisins vérifie

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \leq C \nu_{n,\alpha,d}^{1+\alpha}$$

avec $k_n = \nu_{n,\alpha,d}^{-2}$ et où $\nu_{n,\alpha,d}$ est solution de :

$$n^{-1} = \psi^{-1}(\{\nu_{n,\alpha,d}\}^{1+\alpha}) \{\nu_{n,\alpha,d}\}^{2+d}. \quad (5.7)$$

Il serait ici encore possible de faire dépendre k_n de la position x .

A propos de l'hypothèse de masse minimale $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$ Comme les minoration de $\mu(B(x, \delta))$ ne sont utiles que pour des points x pour lesquels $\mu(x)$ est suffisamment grand, nous obtenons des vitesses similaires lorsque l'on remplace l'hypothèse $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ par son affaiblissement $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$.

Corollaire 5.1.1. *Si **A1, A2, A4** sont satisfaites et si $P_{(X,Y)} \in \widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$, alors*

$$\sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} \cap \widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_{n,k_n}) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \lesssim \nu_{n,\alpha,d}^{1+\alpha},$$

avec $k_n = \nu_{n,\alpha,d}^{-2}$ et où $\nu_{n,\alpha,d}$ est solution de $n^{-1} = \psi^{-1}(\{\nu_{n,\alpha,d}\}^{1+\alpha})\{\nu_{n,\alpha,d}\}^{2+d}$.

Il est difficile de décrire la condition $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ à l'aide d'une condition analytique simple (principalement à cause de la nature uniforme de $\mathfrak{M}_{mma}(\Omega, \kappa)$ sur Ω). A l'inverse (ce qui l'avantage énormément), $\widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$ est plus appréhendable. Ecrivons la densité μ comme une exponentielle

$$\mu(x) = e^{-\varphi(x)}, \forall x \in \mathbb{R}^d.$$

Proposition 5.1.2. *Si $\varphi \in \mathcal{C}^1(\Omega)$ et s'il existe $a > 0$ telle que*

$$\lim_{x:\mu(x) \rightarrow 0} \frac{\|\nabla\varphi(x)\|}{\varphi(x)^a} = 0,$$

alors il existe κ pour lequel $\mu = e^{-\varphi} \in \widetilde{\mathfrak{M}}_{mma}(\Omega, \kappa)$.

Illustration sur des exemples typiques

Nous présentons ici un modèle pour lequel nous sommes capable d'exhiber des bornes supérieures et inférieures explicites. Nous ferons ensuite une étude numérique pour illustrer l'importance de l'hypothèse de queue et on finira par une comparaison entre la règle des plus proches voisins standard et celle pour laquelle le nombre de voisins k_n dépend de la position x .

Quelques vitesses explicites Nous analysons ici l'influence de la fonction ψ dans $\mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi}$, ainsi que celle du paramètre de marge sur la vitesse de convergence au travers de différents modèles. Soient Z une variable aléatoire positive et a, b deux réels; X est alors donné par

$$X = \epsilon Z + Yb + (1 - Y)a, \tag{5.8}$$

où ϵ est une variable valant plus ou moins 1 indépendante de Z , Y est le label de l'observation de loi de Bernoulli $\mathcal{B}(1/2)$ indépendante de ϵ et de Z . La table 5.1 illustre les vitesses obtenues pour différentes situations.

Loi de Z	queue ψ	Marge	$k_n \sim n^\beta$	Borne supérieure
Gauss	$\psi(\epsilon) \propto \epsilon \log(1/\epsilon)^{r/2-1}$	$\alpha = 1$	$\beta = 2/(4+d)$	$n^{-2/(4+d)} \log(n)^{\beta(r)}$
Laplace	$\psi(\epsilon) \propto \epsilon$	$\alpha = 1$	$\beta = 2/(4+d)$	$n^{-2/(4+d)}$
Gamma	$\psi(\epsilon) \propto \epsilon \log(1/\epsilon)^{k-1}$	$\alpha = 1$	$\beta = 2/(4+d)$	$n^{-2/(4+d)} \log(n)^{\beta(k)}$
Cauchy	$\psi(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$	$\alpha = 1$	$\beta = 1/(3+d)$	$n^{-2/(3+d)}$
Power-Pareto	$\psi(\epsilon) \propto \epsilon^{p/(p+1)}$	$\alpha = 1 \wedge p$	$\beta = \frac{2(p+1)}{p(3+\alpha+d)+2+d}$	$n^{\frac{-4(p+1)}{p(3+\alpha+d)+2+d}}$

TABLE 5.1 – Vitesses de convergence.

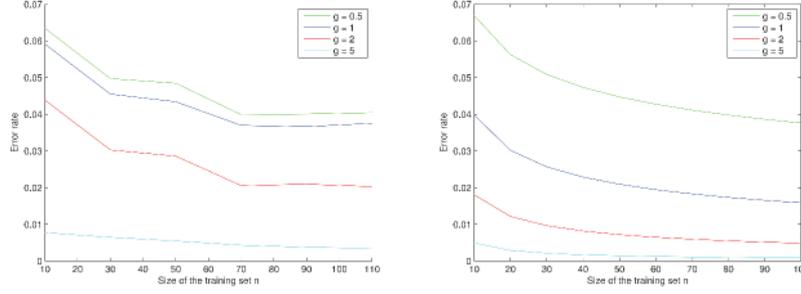


FIGURE 5.1 – Exemples de vitesses empiriques observées et bornes supérieures théoriques données par (5.7) pour diverses valeurs de g .

Une étude numérique pour des queues polynomiales Afin d'illustrer les Equations (5.6) et (5.7), on considère des lois à queues polynomiales

$$\mathbb{P}_X(\mu(X) < \epsilon) = \psi(\epsilon) \sim \epsilon^g \quad \text{lorsque } \epsilon \rightarrow 0^+,$$

pour un certain $g > 0$. Dans ce cas la borne supérieure du classifieur du plus proche voisin est donnée par

$$\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*) \lesssim n^{-\frac{(1+\alpha)}{1+\alpha+\frac{2+d}{g}}}.$$

La borne inférieure dérivée de l'équation est

$$\inf_{\Phi_n} \sup_{\mathbb{P}_{(X,Y)} \in \mathcal{F}_{L,\alpha} \cap \mathcal{P}_{\mathcal{T},\psi} \cap \mathfrak{M}_{mma}(\Omega,\kappa)} [\mathcal{R}(\Phi_n) - \mathcal{R}(\Phi^*)] \gtrsim n^{-\frac{(1+\alpha)}{\alpha+\frac{2+d}{g}}}.$$

On remarque que la vitesse de classification est fortement détériorée lorsque g est petit. Inversement, si les queues sont très fines, la vitesse obtenue peut être aussi proche que l'on veut de n^{-1} . Nous illustrons ce phénomène à l'aide d'une famille de loi \mathcal{P}_g , pour laquelle le paramètre $g > 0$ influence la taille de la queue. On définit maintenant la fonction de répartition de Z par

$$\forall t \geq 0 \quad F_g(t) = 1 - \frac{1}{(t+1)^g}.$$

Alors, le classifieur de Bayes est donné par

$$\Phi^*(X) = \mathbf{1}_{\{X > (a+b)/2\}}.$$

Dans cet exemple, la marge α est égale à 1 et η est L -Lipschitz. Prenons $k_n = \lfloor n^{2/5} \rfloor + 1$. La Figure 5.1 représente les excès de risques obtenus par le classifieur des plus proches voisins et les dégradations successives de la convergence lorsque g décroît vers 0 (à gauche, nous présentons la performance empirique de la règle et à droite la borne supérieure théorique donnée dans le Théorème 5.1.5). Ces expérimentations numériques sont en accord avec le résultat théorique du Théorème 5.1.7.

Comparaison entre la méthode standard des plus proches voisins et celle spatialisée Nous comparons numériquement les résultats obtenus par la méthode standard (décrite dans le Théorème 5.1.5) et celle spatialisée (décrite dans la Section 5.1.4 et dans le Théorème 5.1.6). Les résultats obtenus (présentés dans la Table 5.2) montrent que la version spatialisée est toujours plus efficace. Cette observation numérique est en adéquation avec les résultats théoriques (Théorèmes 5.1.5 et 5.1.6).

Loi de Z	$n = 100$			$n = 500$			$n = 1000$		
Gauss, $a = 1, \sigma = 2$	19.2.6	18.1.6	6%	16.4.5	13.9.5	15%	15.4.5	12.5	22%
Cauchy, $a = \frac{1}{2}, \gamma = \frac{1}{2}$	2.6.2	1.9.2	26%	1.4.1	1.2.1	14%	0.9.05	0.8.05	6%
Cauchy, $a = \frac{1}{2}, \gamma = 1$	4.4.3	3.6.2	18%	3.1.3	2.2.2	28%	2.3.2	1.4.2	37%
Power, $a = \frac{1}{2}, \gamma = 1$	3.8.3	3.3	20%	2.7.2	2.1.2	22%	1.9.2	1.5.1	19%
Power, $a = \frac{1}{2}, \gamma = 2$	2.2	1.7.2	13%	1.2.2	1.0.1	15%	0.7.1	0.6.1	14%

TABLE 5.2 – Excès de risque moyen multiplié par 100 (Gauche : algorithme standard ; Milieu : algorithme spatialisé ; Droite : pourcentage d'amélioration).

5.2 Estimation de l'intensité de Processus non homogènes de Poissons à partir de trajectoires shiftées

Dans cette Section, nous présentons un bref résumé des résultats obtenus avec Jérémie Bigot, Sébastien Gadat et Clément Marteau. Pour plus de détails et pour les preuves des résultats, nous invitons le lecteur à lire l'article correspondant [34].

5.2.1 Introduction

Les processus de Poisson ont été intensivement étudiés d'un point de vue de la statistique mathématique durant les dernières décennies. De tels processus sont bien adaptés pour modéliser de nombreux phénomènes. En particulier, ils sont utilisés en génômie, en biologie et en imagerie. Dans la littérature, l'estimation de l'intensité d'un processus de Poisson non-homogène est devenue à la mode. Par exemple, le problème de l'estimation de l'intensité à partir d'une unique trajectoire a été étudié à l'aide de méthodes de sélections de modèles par [211], à l'aide de méthodes de seuillage par [89, 154, 212, 252, 154, 11, 24]. En imagerie les processus de Poisson modélisent parfois le bruit, ainsi le problème de débruitage de bruit poissonnien a été considéré par [91, 253]. Trouver des estimateur optimaux de l'intensité poissonnienne a été considéré en utilisant le point de vu minimax dans [66, 211, 212, 252] ou en utilisant la méthode de Stein dans [200]. Dans tous ces travaux, l'intensité λ du processus observé est de la forme $\lambda(t) = \kappa\lambda_0(t)$ où la fonction à estimer est l'intensité d'échelle λ_0 et κ est un réel strictement positif, représentant un temps d'observation que l'on laisse s'échapper à l'infini afin d'étudier les propriétés asymptotiques. Dans ce travail, le cadre est légèrement différent. Dans beaucoup d'applications, les données peuvent être modélisées par des processus de Poisson indépendants dont les intensités (celles ci peuvent différer d'un processus à l'autre) sont in-homogènes. Bien que non homogène les intensités ont néanmoins une forme similaire. Le modèle le plus simple décrivant de tels phénomènes est le suivant : on suppose que les intensités $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ des processus de Poissons N^1, \dots, N^n sont des versions shiftées aléatoirement $\lambda_i(\cdot) = \lambda(\cdot - \tau_i)$ d'une intensité commune inconnue λ , les variables τ_1, \dots, τ_n sont ici i.i.d. Ainsi la densité à estimer λ est la même (à une translation aléatoire près) pour tous les processus observés. Ce genre de modèle se retrouve en biologie dans certaines études de l'ADN, nous renvoyons à l'introduction de l'article [34] pour plus de détails sur le modèle biologique correspondant ainsi qu'aux travaux [180, 79, 251].

Décrivons maintenant plus précisément notre modèle.

- Soit τ_1, \dots, τ_n des variables i.i.d. de densité (par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}) commune g connue.
- Soit $\lambda : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}_+$ une application à valeurs réelles (si nécessaire, on supposera que λ est étendue hors de l'intervalle $[0, 1]$ en la supposant 1-périodique).
- On suppose que conditionnellement à τ_1, \dots, τ_n , les processus ponctuels N^1, \dots, N^n sont des processus de Poisson sur l'espace mesuré $([0, 1], \mathcal{B}([0, 1]), dt)$ d'intensités respectives $\lambda_i(t) = \lambda(t - \tau_i)$ pour $t \in [0, 1]$, dt désigne ici la mesure de Lebesgue.
- Ainsi, conditionnellement à τ_i , N^i est un ensemble mesurable de points dans $[0, 1]$, on note alors $dN_t^i =$

$dN^i(t)$ la mesure aléatoire discrète $\sum_{T \in N^i} \delta_T(t)$ pour $t \in [0, 1]$, où δ_T est la mesure de Dirac au point T . Pour plus de détails sur les processus de Poisson non-homogène, on renvoie à [145]. L'objectif de ce travail est d'étudier l'estimation de λ d'un point de vu minimax lorsque le nombre n de processus observés tend vers l'infini. Comme λ est 1-périodique, on peut supposer que les shifts aléatoires τ_i sont définis modulo 1, et par suite, sans perte de généralités, on suppose aussi que g à son support inclus dans l'intervalle $[0, 1]$. Notre résultat principal est qu'estimer λ correspond à un problème de déconvolution où la densité g des shifts aléatoires τ_1, \dots, τ_n est un opérateur de convolution qui doit être inversé. Ainsi, estimer λ , fait parti des problèmes inverses poissoniens. La présence des shifts aléatoires complique notoirement la construction des bornes minimax supérieures et inférieures. En particulier, pour obtenir une borne inférieure les méthodes classique (comme par exemple celle du cube d'Assouad [193]) doivent être finement adaptées afin de prendre en compte l'effet des shifts. La borne supérieure est obtenue à l'aide des ondelettes de Meyer qui sont bien adaptées pour traiter des problèmes de déconvolution [141].

La suite du travail est organisée de la façon suivante. Dans la Section 5.2.2, nous décrivons les liens entre l'estimation de λ et les approches standard des problèmes de déconvolutions. On présentera alors la construction d'un estimateur linéaire non adaptatif de l'intensité λ . La Section 5.2.3 regroupe les résultats de bornes inférieure minimax sur des boules de Besov. Nous construisons ensuite un estimateur adaptatif dans la Section 5.2.4. Dans la Section 5.2.5, nous illustrons les performances de nos estimateurs à l'aide de simulations numériques.

5.2.2 Un problème de déconvolution

Transformation de Fourier des données

Pour chaque processus ponctuel observé, la présence de shift aléatoire complique l'estimation de l'intensité λ . En effet, pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$ et tout $f \in L^2_{\mathbb{T}}([0, 1])$ on a

$$\mathbb{E} \left[\int_0^1 f(t) dN_t^i | \tau_i \right] = \int_0^1 f(t) \lambda(t - \tau_i) dt, \quad (5.9)$$

évidemment $\mathbb{E}[\cdot | \tau_i]$ est l'espérance conditionnelle par rapport à la variable τ_i . Par suite

$$\mathbb{E} \int_0^1 f(t) dN_t^i = \int_0^1 f(t) \int_{\mathbb{R}} \lambda(t - \tau) g(\tau) d\tau dt = \int_0^1 f(t) (\lambda \star g)(t) dt.$$

On remarque donc que l'intensité moyenne des processus shiftés aléatoirement est la convolution $\lambda \star g$ de λ et de la densité des shifts g . Cette remarque permet de faire une analogie avec le problème classique de déconvolution dont on sait que c'est un problème inverse. Cette analogie est renforcée, lorsqu'on procède à la transformée de Fourier de nos observations.

Soit $(e_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ la base de Fourier complexe sur $[0, 1]$ i.e. $e_\ell(t) = e^{i2\pi\ell t}$ pour tout $\ell \in \mathbb{Z}$ et $t \in [0, 1]$. Pour $\ell \in \mathbb{Z}$, considérons

$$\theta_\ell = \int_0^1 \lambda(t) e_\ell(t) dt \text{ et } \gamma_\ell := \int_0^1 g(t) e_\ell(t) dt.$$

Ce sont les coefficients de Fourier de l'intensité λ et de la densité g . Alors pour $\ell \in \mathbb{Z}$, on définit y_ℓ par

$$y_\ell := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int_0^1 e_\ell(t) dN_t^i. \quad (5.10)$$

Appliquons l'Equation (5.9) avec $f = e_\ell$, on obtient alors

$$\mathbb{E} [y_\ell | \tau_1, \dots, \tau_n] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int_0^1 e_\ell(t) \lambda(t - \tau_i) dt = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e^{-i2\pi\ell\tau_i} \theta_\ell = \tilde{\gamma}_\ell \theta_\ell,$$

où

$$\tilde{\gamma}_\ell := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e^{i2\pi\ell\tau_i}, \quad \forall \ell \in \mathbb{Z}. \quad (5.11)$$

Ainsi, l'estimation de l'intensité $\lambda \in L^2_+([0, 1])$, peut-être vue comme l'estimation des coefficients de Fourier $(\theta_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ de λ à partir de la suite

$$y_\ell = \tilde{\gamma}_\ell \theta_\ell + \xi_{\ell,n}, \tag{5.12}$$

où les variables aléatoires $\xi_{\ell,n}$ sont centrées, définies par

$$\xi_{\ell,n} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\int_0^1 e_\ell(t) dN_t^i - \int_0^1 e_\ell(t) \lambda(t - \tau_i) dt \right] \text{ pour tout } \ell \in \mathbb{Z}.$$

Le modèle (5.12) est très proche du modèle standard des problèmes inverses linéaires. En effet, en utilisant la décomposition en valeurs singulières de l'opérateur considéré, le modèle standard d'un problème inverse mal posé est (nous renvoyons pour plus de détails à [65] et à sa bibliographie)

$$c_\ell = \gamma_\ell \theta_\ell + z_\ell, \tag{5.13}$$

où les γ_ℓ sont les valeurs propres d'un opérateur linéaire connu et z_ℓ est un bruit additif. Le problème dans le modèle (5.13) est de retrouver les coefficients θ_ℓ à partir des observations c_ℓ . Une famille d'estimateur pour le modèle (5.13) peut s'écrire sous la forme

$$\hat{\theta}_\ell = \delta_\ell \frac{c_\ell}{\gamma_\ell},$$

où $\delta = (\delta_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ est une suite de réels de $[0, 1]$ appelée filtre (voir [65] pour plus de détails).

Finalement l'Equation (5.12) peut être vue comme un problème inverse linéaire avec un bruit poissonnien pour lequel l'opérateur aléatoire à inverser a pour valeurs propres les $\tilde{\gamma}_\ell$ (définies par l'Equation (5.11)) qui sont des variables aléatoires non observées. Néanmoins, comme la densité g des shifts est supposée connue et comme $\mathbb{E}\tilde{\gamma}_\ell = \gamma_\ell$ avec $\tilde{\gamma}_\ell \approx \gamma_\ell$ pour n suffisamment grand (sera évidemment précisé un peu plus tard), une estimation des coefficients de Fourier de f est possible à l'aide d'une étape de déconvolution de la forme

$$\hat{\theta}_\ell = \delta_\ell \frac{y_\ell}{\gamma_\ell}, \tag{5.14}$$

où $\delta = (\delta_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ est un filtre à choisir judicieusement.

Dans toute la suite, nous ferons l'hypothèse suivante sur g .

Hypothèse 5.2.1. Les coefficients de Fourier de g décroissent à une vitesse polynomiale *i.e.* il existe $\nu > 0$ et deux constantes (pouvant dépendre de ν) $C \geq C' > 0$ pour lesquelles on a $C'|\ell|^{-\nu} \leq |\gamma_\ell| \leq C|\ell|^{-\nu}$ pour tout $\ell \in \mathbb{Z}$.

Un premier estimateur linéaire par seuillage spectral

Cette partie permet d'accentuer le lien qui existe entre notre modèle et un problème de déconvolution. Etant donné un filtre $(\delta_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ et grâce à l'Equation (5.14), on peut considérer un estimateur linéaire de λ défini par

$$\hat{\lambda}_\delta(t) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \hat{\theta}_\ell e_\ell(t) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \delta_\ell \gamma_\ell^{-1} y_\ell e_\ell(t), \quad t \in [0, 1]. \tag{5.15}$$

Son risque quadratique dans le domaine de Fourier est

$$\mathcal{R}(\hat{\lambda}_\delta, \lambda) := \mathbb{E} \left(\sum_{\ell \in \mathbb{Z}} |\hat{\theta}_\ell - \theta_\ell|^2 \right).$$

La proposition qui suit illustre de quelle manière la qualité (en terme de risque quadratique) de l'estimateur $\hat{\lambda}_\delta$ est liée au choix du filtre δ .

Proposition 5.2.1. *Pour tout filtre δ , le risque de $\hat{\lambda}^\delta$ se décompose de la manière suivante*

$$\mathcal{R}(\hat{\lambda}^\delta, \lambda) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} |\theta_\ell|^2 (\delta_\ell - 1)^2 + \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \frac{\delta_\ell^2}{n} |\gamma_\ell|^{-2} \|\lambda\|_1 + \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \frac{\delta_\ell^2}{n} |\theta_\ell|^2 (|\gamma_\ell|^{-2} - 1). \quad (5.16)$$

où $\|\lambda\|_1 = \int_0^1 \lambda(t) dt$.

Remarquons ici que le risque quadratique de n'importe quel estimateur linéaire dans le modèle (5.12) est composé de trois termes. Les deux premiers termes de la décomposition (5.16) du risque correspondent aux termes classiques de biais et de variance. Le troisième terme correspond à l'erreur commise lorsque l'on procède à l'inversion de l'opérateur en utilisant non pas les vraies valeurs propres non observées $(\tilde{\gamma}_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$ mais $(\gamma_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}}$.

Introduisons maintenant l'ensemble des fonctions sur lequel les vitesses minimax seront atteintes. Il s'agit de boules dans des espaces de Sobolev, considérons donc pour un paramètre de régularité $s > 0$ l'espace

$$H_s(A) = \left\{ \lambda \in L_+^2([0, 1]); \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} (1 + |\ell|^{2s}) |\theta_\ell|^2 \leq A \text{ et } \lambda(t) \geq 0 \text{ pour tout } t \in [0, 1] \right\},$$

où $\theta_\ell = \int_0^1 e^{-2i\ell\pi t} \lambda(t) dt$.

On ne considère dans la suite que des filtres de projections, pour $M \in \mathbb{N}$, on définit $\delta^M = (\delta_\ell)_{\ell \in \mathbb{Z}} = (\mathbb{1}_{\{|\ell| \leq M\}})_{\ell \in \mathbb{Z}}$. La Proposition 5.2.1, implique

$$\mathcal{R}(\hat{\lambda}^{\delta^M}, \lambda) = \sum_{\ell > M} |\theta_\ell|^2 + \frac{1}{n} \sum_{|\ell| < M} (|\gamma_\ell|^{-2} \|\lambda\|_1 + |\theta_\ell|^2 (|\gamma_\ell|^{-2} - 1)). \quad (5.17)$$

Il reste donc à choisir correctement le paramètre de seuillage M . Ce choix permettra d'obtenir le comportement asymptotique du risque de $\hat{\lambda}^{\delta^M}$ (défini par l'Equation (5.15)).

Proposition 5.2.2. *[Bigot, Gadat, Klein, Marteau [34]] Supposons que f appartienne à $H_s(A)$ pour un $s > 1/2$ et un $A > 0$, et que g vérifie l'hypothèse (5.2.1). Si $M = M_n$ est le plus grand entier vérifiant $M_n \leq n^{\frac{1}{2s+2\nu+1}}$, alors lorsque $n \rightarrow +\infty$ on a*

$$\sup_{\lambda \in H_s(A)} \mathcal{R}(\hat{\lambda}^{\delta^M}, \lambda) = \mathcal{O}\left(n^{-\frac{2s}{2s+2\nu+1}}\right).$$

Cette proposition montre que sous l'hypothèse 5.2.1, le risque quadratique $\mathcal{R}(\hat{\lambda}^{\delta^M}, \lambda)$ a une décroissance polynomiale. La vitesse de convergence se détériore lorsque le problème devient de plus en plus mal posé (i.e. lorsque ν augmente). Un tel comportement est classique pour les problèmes de déconvolution (voir par exemple [193, 141]).

Quoi qu'il en soit le choix de $M = M_n$ dans la Proposition 5.2.2 dépend à priori de la régularité s de l'intensité λ et malheureusement cette régularité est inconnue. L'estimateur de seuillage proposé est donc non adaptatif et par suite il est d'un intérêt limité pour les applications. La borne de la Proposition 5.2.2 n'est valable que pour des fonctions régulières puisque les boules des espaces de Sobolev ne sont pas bien appropriées pour modéliser des intensités λ qui auraient des singularités. On retrouve ici les limites classiques des techniques de l'analyse de Fourier pour les problèmes de déconvolution, elle n'est pas bien adaptée pour estimer par exemple des intensités qui auraient des pics. Afin d'obtenir des estimateurs qui soient à la fois adaptatifs et qui permettent de traiter le cas de fonctions non régulières nous proposons dans la Section 5.2.4 de construire un estimateur en utilisant une décomposition en ondelettes non linéaires. Nous serons alors capable de donner des majorations du risque quadratique de cet estimateur sur des boules de Besov.

5.2.3 Borne inférieure pour le risque minimax sur des boules de Besov

– Soit $L_+^2([0, 1])$ l'ensemble des fonctions positives de carré intégrable pour la mesure de Lebesgue dt . Le carré de la norme d'une fonction λ de $L_+^2([0, 1])$ est $\|\lambda\|_2^2 = \int_0^1 |\lambda(t)|^2 dt$.

- Soit $\Lambda \subset L^2_+([0, 1])$ une classe de fonctions régulières et $\hat{\lambda}_n \in L^2_+([0, 1])$ un estimateur de l'intensité $\lambda \in \Lambda$ (i.e. une application mesurable des processus aléatoires N^i , $i = 1, \dots, n$ à valeurs dans l'espace $L^2_+([0, 1])$).
- Le risque quadratique d'un estimateur $\hat{\lambda}_n$ est défini par

$$\mathcal{R}(\hat{\lambda}_n, \lambda) := \mathbb{E} \|\hat{\lambda}_n - \lambda\|_2^2.$$

- Le risque minimax est alors

$$\mathcal{R}_n(\Lambda) = \inf_{\hat{\lambda}_n} \sup_{\lambda \in \Lambda} \mathcal{R}(\hat{\lambda}_n, \lambda),$$

où l'infimum est pris sur tous les estimateurs possible construits à partir de N^1, \dots, N^n .

Dans la suite, nous allons donner des bornes supérieures et inférieures pour $\mathcal{R}_n(\Lambda)$ lorsque la classe de fonctions Λ est une boule de Besov et nous construirons un estimateur adaptatif qui atteint une vitesse de convergence minimax (enfin presque à un terme logarithmique près).

Ondelettes de Meyer et boules de Besov

Soit ψ (resp. ϕ) l'ondelette périodique de Meyer mère (resp. l'ondelette d'échelle) sur l'intervalle $[0, 1]$ (voir par exemple [193, 141] pour une définition précise). On peut alors décomposer une intensité $\lambda \in L^2_+([0, 1])$ comme suit

$$\lambda(t) = \sum_{k=0}^{2^{j_0}-1} c_{j_0,k} \phi_{j_0,k}(t) + \sum_{j=j_0}^{+\infty} \sum_{k=0}^{2^j-1} \beta_{j,k} \psi_{j,k}(t),$$

où $\phi_{j_0,k}(t) = 2^{j_0/2} \phi(2^{j_0}t - k)$, $\psi_{j,k}(t) = 2^{j/2} \psi(2^j t - k)$, $j_0 \geq 0$ est le niveau de résolution et

$$c_{j_0,k} = \int_0^1 \lambda(t) \phi_{j_0,k}(t) dt, \quad \beta_{j,k} = \int_0^1 \lambda(t) \psi_{j,k}(t) dt,$$

sont les coefficients d'échelles et d'ondelettes de λ . Il est bien connu que les espaces de Besov peuvent être caractérisés grâce aux coefficients d'ondelettes (voir par exemple [179]). Soit $s > 0$ le paramètre de régularité et $1 \leq p, q \leq \infty$ deux entiers. Supposons que $s > 1/p - 1/2$. Les boules de Besov $B_{p,q}^{s,+}(A)$ de rayon $A > 0$ ne contenant que des fonctions positives sont définies par

$$B_{p,q}^{s,+}(A) = \left\{ f \in L^2_+([0, 1]) : \left(\sum_{k=0}^{2^{j_0}-1} |c_{j_0,k}|^p \right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{j=j_0}^{+\infty} 2^{j(s+\frac{1}{2}-\frac{1}{p})q} \left(\sum_{k=0}^{2^j-1} |\beta_{j,k}|^p \right)^{\frac{q}{p}} \right)^{\frac{1}{q}} \leq A \right\}.$$

Les sommes sont respectivement remplacées par des maximum si $p = \infty$ ou si $q = \infty$. Le paramètre s est fortement relié à la régularité de la fonction f . Remarquons que si $p = q = 2$ et si s n'est pas un entier les boules de Besov sont équivalentes aux boules de Sobolev. Lorsque $1 \leq p < 2$, l'espace $B_{p,q}^{s,+}(A)$ contient des fonctions qui possèdent des irrégularités locales.

Une borne inférieure pour le risque minimax

Nous commençons par énoncer un résultat donnant une minoration du risque minimax pour la reconstruction dans l'espace $B_{p,q}^{s,+}(A)$.

Théorème 5.2.1. [Bigot, Gadat, Klein, Marteau [34]] *Supposons que g satisfasse l'hypothèse 5.2.1. Soit $1 \leq p \leq \infty$, $1 \leq q \leq \infty$, $A > 0$ et supposons que $s > 2\nu + 1$. Alors, il existe une constante $C_0 > 0$ (indépendante de n) telle que pour n suffisamment grand*

$$\mathcal{R}_n(B_{p,q}^{s,+}(A)) = \inf_{\hat{\lambda}_n} \sup_{\lambda \in B_{p,q}^{s,+}(A)} \mathcal{R}(\hat{\lambda}_n, \lambda) \geq C_0 n^{-\frac{2s}{2s+2\nu+1}},$$

où l'infimum est pris sur l'ensemble de tous les estimateurs $\hat{\lambda}_n \in L_+^2([0, 1])$ de l'intensité λ (i.e l'ensemble des applications mesurables des processus N^i , $i = 1, \dots, n$ à valeurs dans $L_+^2([0, 1])$).

Ainsi le Théorème 5.2.1 montre que sous l'hypothèse 5.2.1 le risque minimax $\mathcal{R}_n(B_{p,q}^{s,+}(A))$ est minorée par la suite $n^{-\frac{2s}{2s+2\nu+1}}$. Cette suite décroît vers 0 à une vitesse polynomiale et elle est détériorée lorsque ν croît (c'est-à-dire lorsque le problème devient de plus en plus mal posé). Comme dit précédemment ce phénomène est bien connu pour les problèmes standard de déconvolution (voir [193, 141]). Remarquons que notre condition $s \geq 2\nu + 1$ force une régularité minimale et exclus de notre étude le cas dit creux (voir [124] pour plus de détails). La preuve (le lecteur très motivé pourra la trouver dans l'article [34]) repose d'une part sur une formule de Girsanov pour les processus de Poisson qui requiert une régularité minimale (ce qui explique la condition $s \geq 2\nu + 1$) et d'autre part sur une utilisation non standard des techniques dites du cube d'Assouad (voir par exemple [193]).

5.2.4 Estimation adaptative dans les espaces de Besov

Nous allons maintenant construire un estimateur qui s'adapte automatiquement à la régularité inconnue s en utilisant les ondelettes de Meyer.

Une étape de déconvolution pour estimer les coefficients d'échelles et d'ondelettes

Les ondelettes de Meyer ont la propriété remarquable de rester dans des bandes dans le domaine de Fourier, ce qui leurs permettent d'être extrêmement bien adaptées aux problèmes de déconvolutions. Plus précisément chaque $\phi_{j,k}$ et $\psi_{j,k}$ sont à supports compacts dans la famille de Fourier dans le sens où

$$\phi_{j_0,k} = \sum_{\ell \in D_{j_0}} c_\ell(\phi_{j_0,k}) e_{\ell}, \quad \psi_{j,k} = \sum_{\ell \in \Omega_j} c_\ell(\psi_{j,k}) e_{\ell},$$

avec

$$c_\ell(\phi_{j_0,k}) := \int_0^1 e^{-2i\ell\pi t} \phi_{j_0,k}(t) dt, \quad c_\ell(\psi_{j,k}) := \int_0^1 e^{-2i\ell\pi t} \psi_{j,k}(t) dt,$$

et où D_{j_0} et Ω_j sont des sous-ensembles finis d'entiers tel qu'il existe une constante $C > 0$ indépendante de j pour laquelle $\#D_{j_0} \leq C2^{j_0}$, $\#\Omega_j \leq C2^j$ et

$$\Omega_j \subset [-2^{j+2}c_0, -2^j c_0] \cup [2^j c_0, 2^{j+2}c_0] \quad (5.18)$$

avec $c_0 = 2\pi/3$. Alors le théorème de Dirichlet assure que les coefficients d'échelles et d'ondelettes de λ vérifient

$$c_{j_0,k} = \sum_{\ell \in D_{j_0}} c_\ell(\phi_{j_0,k}) \theta_\ell, \quad \beta_{j,k} = \sum_{\ell \in \Omega_j} c_\ell(\psi_{j,k}) \theta_\ell. \quad (5.19)$$

A partir de là, on peut injecter l'estimateur $\hat{\theta}_\ell = \gamma_\ell^{-1} y_\ell$ de chaque θ_ℓ (voir Equation (5.12)) dans (5.19) et construire ainsi des estimateurs des coefficients d'échelles et d'ondelettes en définissant

$$\hat{c}_{j_0,k} = \sum_{\ell \in \Omega_{j_0}} c_\ell(\phi_{j_0,k}) \hat{\theta}_\ell \quad \text{et} \quad \hat{\beta}_{j,k} = \sum_{\ell \in \Omega_j} c_\ell(\psi_{j,k}) \hat{\theta}_\ell. \quad (5.20)$$

Estimation par seuillage dur

On propose d'utiliser un estimateur non linéaire obtenu par seuillage dur. On le définit comme suit

$$\hat{\lambda}_n^h = \sum_{k=0}^{2^{j_0(n)}-1} \hat{c}_{j_0,k} \phi_{j_0,k} + \sum_{j=j_0(n)}^{j_1(n)} \sum_{k=0}^{2^j-1} \hat{\beta}_{j,k} \mathbb{1}_{\{|\hat{\beta}_{j,k}| \geq \hat{s}_j(n)\}} \psi_{j,k}. \quad (5.21)$$

Dans la formule définissant notre estimateur, $\hat{s}_j(n)$ est un seuil aléatoire de coupure possible qui dépend de la résolution j . Les entiers $j_0 = j_0(n)$ et $j_1 = j_1(n)$ désignent quant à eux la résolution la plus grossière et la résolution la plus finie. On choisira un peu plus tard la façon dont on les fera dépendre de n .

Nous introduisons maintenant des notations utiles pour la suite, pour tout $j \in \mathbb{N}$, on définit

$$\sigma_j^2 = 2^{-j} \sum_{\ell \in \Omega_j} |\gamma_\ell|^{-2} \text{ et } \epsilon_j = 2^{-j/2} \sum_{\ell \in \Omega_j} |\gamma_\ell|^{-1}, \tag{5.22}$$

et pour tout $\gamma > 0$,

$$\tilde{K}_n(\gamma) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n K_i + \frac{4\gamma \log n}{3n} + \sqrt{\frac{2\gamma \log n}{n^2} \sum_{i=1}^n K_i + \frac{5\gamma^2 (\log n)^2}{3n^2}}, \tag{5.23}$$

où $K_i = \int_0^1 dN_t^i$ est le nombre (aléatoire) de points du processus de comptage N^i pour $i = 1, \dots, n$. On introduit aussi la classe des fonctions d'intensités bornées.

$$\Lambda_\infty = \{ \lambda \in L_+^2([0, 1]); \|\lambda\|_\infty < +\infty \text{ et } \lambda(t) \geq 0 \text{ pour tout } t \in [0, 1] \},$$

où $\|\lambda\|_\infty = \sup_{t \in [0, 1]} \{ |\lambda(t)| \}$.

Théorème 5.2.2. [Bigot, Gadat, Klein, Marteau [34]] *Supposons que l'hypothèse 5.2.1 est satisfaite par g . Soit $1 \leq p \leq \infty$, $1 \leq q \leq \infty$ et $A > 0$. Soit $p' = \min(2, p)$ et supposons que $s > 1/p'$ et $(s + 1/2 - 1/p')p > \nu(2 - p)$. Soit $\delta > 0$ et supposons que l'estimateur non-linéaire $\hat{\lambda}_n^h$ (5.21) est construit avec pour niveau de coupure aléatoire*

$$\hat{s}_j(n) = 4 \left(\sqrt{\sigma_j^2 \frac{2\gamma \log n}{n} (\|g\|_\infty \tilde{K}_n(\gamma) + \delta)} + \frac{\gamma \log n}{3n} \epsilon_j \right), \text{ pour } j_0(n) \leq j \leq j_1(n), \tag{5.24}$$

avec $\gamma \geq 2$, et où σ_j^2 et ϵ_j sont définis par l'Equation (5.22). Soit $j_0(n)$ le plus grand entier pour lequel $2^{j_0(n)} \leq \log n$ et $j_1(n)$ le plus grand entier pour lequel $2^{j_1(n)} \leq \left(\frac{n}{\log n}\right)^{\frac{1}{2\nu+1}}$. Alors, lorsque $n \rightarrow +\infty$,

$$\sup_{\lambda \in B_{p,q}^{s,+}(A) \cap \Lambda_\infty} \mathcal{R}(\hat{\lambda}_n^h, \lambda) = \mathcal{O} \left(\left(\frac{\log n}{n} \right)^{\frac{2s}{2s+2\nu+1}} \right).$$

Le Théorème 5.2.2 montre que sous l'hypothèse 5.2.1 le risque quadratique de l'estimateur non linéaire $\hat{\lambda}_n^h$ décroît à une vitesse polynomiale en n , une fois de plus cette vitesse est détériorée lorsque ν augmente (le lien entre l'estimation de l'intensité de processus de Poisson et l'analyse des problèmes inverses persiste). Contrairement à l'estimateur linéaire $\hat{\lambda}^{\delta^M}$ (dont on a étudié les propriétés asymptotiques dans la Proposition 5.2.2), l'estimateur non linéaire $\hat{\lambda}_n^h$ est adaptatif par rapport à la régularité inconnue s . En effet l'estimateur $\hat{\lambda}_n^h$ ne dépend nullement de la valeur de s , les choix des valeurs de seuillages aléatoires $\hat{s}_j(n)$, et de résolution maximale j_1 n'en dépendent pas non plus. De plus, l'espace de Besov $B_{p,q}^{s,+}(A)$ peut contenir des fonctions possédant des irrégularités locales. On n'est donc maintenant en mesure d'estimer des intensités qui ne sont plus globalement régulières.

Dans la Section 5.2.3, nous avons montré que la vitesse $n^{-\frac{2s}{2s+2\nu+1}}$ était une borne inférieure pour la décroissance du risque minimax pour une collection importante de boule de Besov. Ainsi notre estimateur non linéaire construit à partir d'ondelettes est optimal à un facteur logarithmique près. Ce terme logarithmique n'est pas étonnant, il est classiquement présent lorsque l'on fait du débruitage à l'aide d'ondelettes. Il correspond au prix à payer pour obtenir par cette méthode des estimateurs adaptatifs. Il est possible d'améliorer un peu notre estimateur en utilisant une méthode de du seuillage par blocs utilisée par [71].

Nous avons restreint notre étude à la situation où $(s + 1/2 - 1/p')p > \nu(2 - p)$ et $s > 1/p'$, cette situation est communément appelée le cas dense dans la littérature. Il serait également possible d'obtenir des bornes supérieures pour les autres cas. Cependant, comme la borne inférieure établie dans la Section 5.2.3 ne serait alors plus valide, nous avons décidé de ne pas considérer le cas sparse.

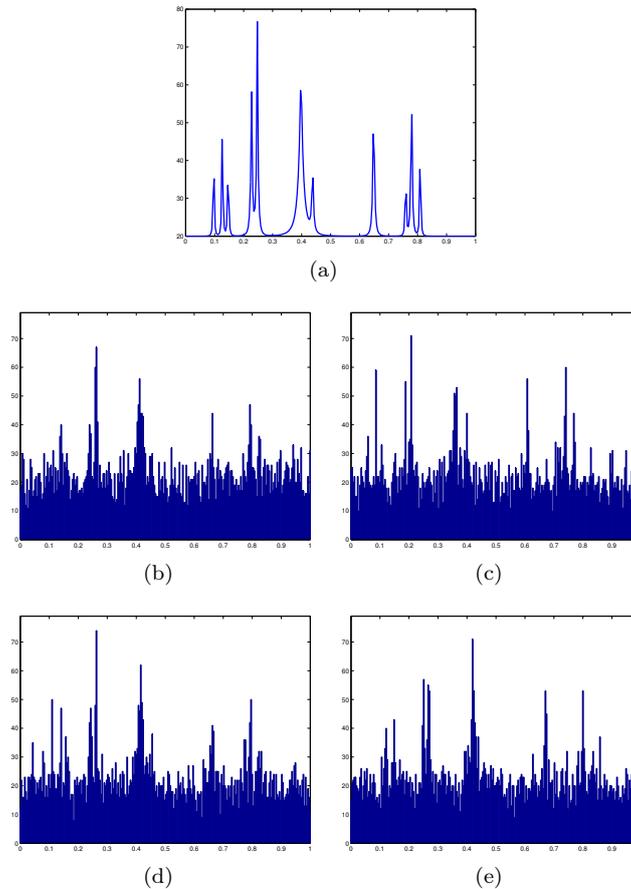


FIGURE 5.2 – Intensité et données . Première ligne : (a) l'intensité inconnue λ . seconde et troisième lignes : 4 réalisations indépendantes des processus de Poisson N^i shiftés aléatoirement $\lambda_i(\cdot) = \lambda(\cdot - \tau_i)$, $i = 1, 2, 3, 4$ sous la forme de vecteurs de comptage de longueur $T = 256$ (b) y_1 , (c) y_2 , (d) y_3 , (e) y_4 .

5.2.5 Simulations numériques

Nous présentons dans cette partie des simulations numériques illustrant les performances de l'estimateur non-linéaire. Nous avons utilisé pour ce faire les toolbox Wavelab [56] et WaveD algorithm développées par [206] pour une déconvolution rapide à l'aide des ondelettes de Meyer.

- Nous avons pris pour intensité inconnue λ la fonction test présentée dans la Figure 5.2 (a). Nous avons ensuite simulé des shifts aléatoires τ_1, \dots, τ_n de lois de Laplace de densité $g(t) = \frac{1}{2\mu} \exp(-\frac{|t|}{\mu})$ pour $\mu = 0.03$. Pour un shift fixé, nous simulons ensuite une réalisation du processus ponctuel de Poisson N^i d'intensité $\lambda_i(\cdot) = \lambda(\cdot - \tau_i)$. Pour cela nous procédons comme suit :
 - On commence par subdiviser l'intervalle d'observation $[0, 1]$ en T intervalles de longueurs égales, $I_m = [m/T, (m+1)/T[$, pour $m = 0, \dots, T-1$ avec $T = 256$.
 - On simule sur chaque sous intervalle I_m un processus de Poisson indépendant d'intensité $\lambda_i(m/T) = \lambda(m/T - \tau_i)$, pour $m = 0, \dots, T-1$ (une procédure similaire a été proposé dans [24]).
 En un sens, pour chaque intensité shiftée $\lambda_i(\cdot) = \lambda(\cdot - \tau_i)$, les données sont sous la forme d'un vecteur de comptage $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}_+^T$ de longueur $T = 256$ auquel on peut appliquer l'algorithme WaveD développé par [206].
- Nous avons présenté dans Les Figures 5.2 (b,c,d,e) quatre réalisations indépendantes de tels processus pour se faire une idée des données que nous traitons.

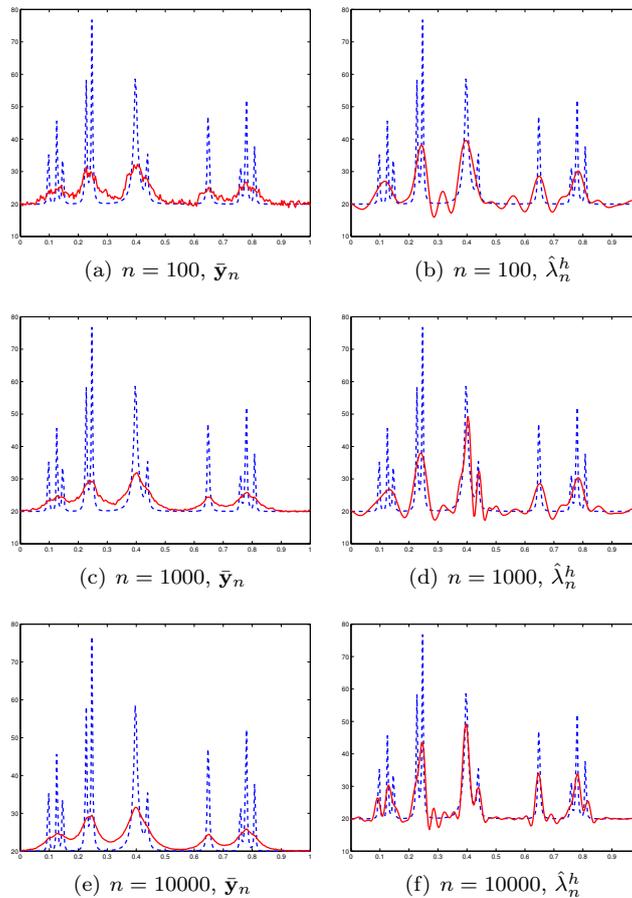


FIGURE 5.3 – Comparaison entre deux estimateurs de la densité inconnue λ (la courbe en pointillée) pour trois tailles d'échantillons. Première ligne : $n = 100$. Seconde ligne : $n = 1000$. Troisième ligne : $n = 10000$. Première colonne : résultats obtenus par moyennisation des données $\bar{\mathbf{y}}_n$. Seconde colonne : résultats obtenus en utilisant l'estimateur non-linéaire $\hat{\lambda}_n^h$.

Dans la figure 5.3(a,c,e), nous présentons pour trois tailles d'échantillons ($n = 100$, $n = 1000$ et $n = 10000$), ce qui se passe lorsque l'on se contente de simplement moyenniser les données brutalement. Cela revient à considérer $\bar{\mathbf{y}}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i$ comme estimateur de l'intensité inconnue λ . Il est assez clair que cette méthode ne conduit pas à un estimateur consistant. En effet la moyennisation conduit à l'estimation de $\lambda \star g$ et non à celle de λ comme nous l'avons expliqué dans la Section 5.2.2. Dans la Figure 5.3(b,d,f), nous présentons pour trois valeurs de tailles d'échantillons ($n = 100$, $n = 1000$ et $n = 10000$), les résultats obtenus lorsque l'on utilise l'estimateur non-linéaire $\hat{\lambda}_n^h$ défini par l'Equation (5.21). Les résultats sont satisfaisants et en tout cas bien meilleurs que ceux obtenus par simple moyennisation des données.

5.2.6 Discussion

Dans ce travail, nous avons considéré le problème de l'estimation adaptative d'une intensité inhomogène à partir de l'observation de n processus de Poisson indépendants ayant une intensité commune λ qui est aléatoirement shiftée. Nous avons établi un parallèle entre ce modèle et un problème inverse dans lequel la densité g des shifts aléatoires joue le rôle d'un opérateur de convolution. Nos résultats reposent sur l'hypothèse que la fonction g est connue. C'est malheureusement un fait bien connu (voir par exemple [177])

que, dans les problèmes classiques de déconvolution, si le noyau de convolution g est inconnu, il n'est pas possible, après une étape de régularisation, d'obtenir des vitesses de convergence convenable.

Au lieu de supposer g connu, on pourrait s'amuser à construire des estimateurs des shifts non observés τ_1, \dots, τ_n puis de moyenniser les processus observés après les avoir recalés en utilisant les estimateurs des shifts. Ainsi, de nombreuses stratégies ont été proposées afin de calculer des estimateurs $\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_n$ des shifts non observés τ_1, \dots, τ_n (voir par exemple [226, 225, 254]). Un estimateur de l'intensité λ peut être alors calculé en alignant et moyennant les processus observés. Plus précisément, si $\hat{\lambda}_i(\cdot)$ est un estimateur des intensités shiftés $\lambda(\cdot - \tau_i)$, obtenu par une procédure de régularisation appliquée au processus N^i , alors un estimateur de λ est (à l'aide d'une étape d'alignement) défini par

$$\hat{\lambda}_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{\lambda}_i(t + \hat{\tau}_i), \quad t \in [0, 1].$$

Néanmoins, comme le montre le Théorème 5.2.3 et le Théorème 5.2.4, une estimation de λ à partir d'une étape d'alignement conduit à des estimateurs non consistants. En effet, un premier résultat obtenu sous des hypothèses relativement faible sur λ et g assure qu'il n'est pas possible de construire des estimateurs consistant des shifts aléatoires τ_1, \dots, τ_n dans le sens où

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{\tau}_i - \tau_i)^2 \right) \neq 0$$

pour tout estimateur $(\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_n) \in [0, 1]^n$.

Théorème 5.2.3. [Bigot, Gadat, Klein, Marteau [34]] Si $\lambda \in L_+^2([0, 1])$ est continûment différentiable et vérifie

$$\lambda_0 := \inf_{t \in [0, 1]} \{\lambda(t)\} > 0.$$

Si la densité g des shifts aléatoires est à support compact $[\tau_{\min}, \tau_{\max}] \subset [0, 1]$ et vérifie $\lim_{\tau \rightarrow \tau_{\min}} g(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow \tau_{\max}} g(\tau) = 0$. Si g est absolument continue et est telle que

$$\int_0^1 \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \log g(\tau) \right)^2 g(\tau) d\tau < +\infty.$$

Alors, si $(\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_n) \in [0, 1]^n$ sont des estimateurs des shifts aléatoires (τ_1, \dots, τ_n) , on a

$$\mathbb{E} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{\tau}_i - \tau_i)^2 \right) \geq \frac{1}{\int_0^1 \left| \frac{\partial}{\partial t} \lambda(t) \right|^2 dt + \int_0^1 \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \log g(\tau) \right)^2 g(\tau) d\tau} > 0. \quad (5.25)$$

L'inégalité (5.25) montre qu'il n'est pas possible de construire des estimateurs consistants des shifts aléatoires τ_1, \dots, τ_n . Ce résultat de non consistance sur l'estimation des shifts implique qu'une estimation consistante de λ à l'aide d'une étape d'alignement n'est pas possible. En effet, considérons le cas d'un lissage idéal des données avec $\hat{\lambda}_i(t) = \lambda(t - \tau_i)$, $t \in [0, 1]$ ce qui conduirait à l'estimateur idéal

$$\bar{\lambda}_n(t) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda(t - \tau_i + \hat{\tau}_i), \quad t \in [0, 1],$$

où $(\tau_1, \dots, \tau_n) \in [0, 1]^n$ sont des estimateurs calculés à partir des données N^1, \dots, N^n . Alors, on montre que $\bar{\lambda}_n$ n'est pas consistant pour estimer λ .

Théorème 5.2.4. [Bigot, Gadat, Klein, Marteau [34]] On se place sous les hypothèses du Théorème 5.2.3. On suppose de plus que $\lambda \in L_+^2([0, 1])$ est telle que

$$\theta_1 := \int_0^1 \lambda(t) e^{-i2\pi t} dt \neq 0.$$

Soit $(\hat{\tau}_1, \dots, \hat{\tau}_n) \in [0, 1]^n$ des estimateurs des shifts (τ_1, \dots, τ_n) vérifiant les contraintes $\sum_{i=1}^n \hat{\tau}_i = 0$ et $\tau_{\min} \leq \hat{\tau}_i \leq \tau_{\max}$ pour tout $i = 1, \dots, n$. Supposons que la densité g soit de moyenne nulle et de variance finie i.e. $\int_0^1 \tau g(\tau) d\tau = 0$ et $\int_0^1 \tau^2 g(\tau) d\tau < +\infty$. Supposons qu'il existe $0 < \delta < 3$ tel que $\tau_{\max} - \tau_{\min} := \frac{\delta}{4\pi}$, et considérons l'estimateur idéal

$$\bar{\lambda}_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda(t - \tau_i + \hat{\tau}_i), \quad t \in [0, 1].$$

Alors,

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left(\int_0^1 |\bar{\lambda}_n(t) - \lambda(t)|^2 dt \right) \geq \left(\frac{\frac{2}{3}\pi^2 (3 - \delta) |\theta_1|}{\int_0^1 \left| \frac{\partial}{\partial t} \lambda(t) \right|^2 dt + \int_0^1 \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \log g(\tau) \right)^2 g(\tau) d\tau} \right)^2 > 0. \quad (5.26)$$

Dans le Théorème 5.2.4, nous avons contraint les estimateurs des shifts aléatoires de vérifier $\sum_{i=1}^n \hat{\tau}_i = 0$ et la densité g à avoir une moyenne 0. Ces hypothèses supplémentaires sont nécessaires lorsque l'on utilise une procédure d'alignement. En effet, sans ces contraintes, notre modèle ne serait pas identifiable puisque pour tout $\tilde{\tau} \in \mathbb{R}$ on pourrait remplacer la densité inconnue $\lambda(\cdot)$ par $\tilde{\lambda}(\cdot) = \lambda(\cdot - \tilde{\tau})$ et les shifts aléatoires par $\tilde{\tau}_i = \tau_i - \tilde{\tau}$, tout en conservant le même modèle. Sous de telles hypothèses l'inégalité (5.26) montre que

$$\liminf_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left(\int_0^1 |\bar{\lambda}_n(t) - \lambda(t)|^2 dt \right) \neq 0,$$

et par suite $\bar{\lambda}_n$ ne converge pas en moyenne quadratique vers λ lorsque $n \rightarrow +\infty$. Ainsi les procédures standard basées sur une étape d'alignement ne fournissent pas d'estimateurs consistants. Dans ce travail, nous avons proposé une autre approche. Notre méthode est basée sur une étape de déconvolution, elle fournit un estimateur consistant et adaptatif qui converge à une vitesse quasi-optimale pour le risque minimax. Evidemment, on aurait pu envisager de s'engager sur d'autres pistes par exemple en s'inspirant de [42] qui propose une approche bayésienne dans un modèle gaussien.

Chapitre 6

Analyse de sensibilité et quantification des incertitudes

Ce chapitre est la conséquence de collaborations fructueuses (toutes plus ou moins initiées par Fabrice Gamboa) avec de nombreux collaborateurs. Chronologiquement (mais ce n'est pas l'ordre de ce chapitre), l'histoire commence par le co-encadrement avec Jean-Claude Fort de la thèse de Nabil Rachdi. Dans cette thèse, nous avons tenté de proposer un cadre statistique rigoureux pour l'étude de situations (provenant du monde industriel) dans lesquelles cohabitent des données provenant de différentes sources (par exemple des données expérimentales et des données simulées). L'histoire se poursuit d'une part par l'ANR Costa brava durant laquelle nous avons étudié les premières propriétés asymptotiques des indices de Sobol. Ces études ont été réalisées en collaboration avec Jean-Claude Fort, Fabrice Gamboa, Alexandre Janon, Agnès Lagnoux, Béatrice Laurent, Maëlle Nodet et Clémentine Prieur. D'autre part, par l'encadrement de la thèse de Vincent Moutoussamy. La thèse de Vincent se consacrait à l'étude de codes numériques dont la sortie était monotone coordonnée par coordonnées. Nous nous sommes alors intéressés à l'estimation de quantiles et de probabilités de seuils. J'ai délibérément choisi de ne pas parler des travaux issus directement des thèses de Nabil et Vincent ([204, 205, 49]). Le détail ainsi que les preuves de tous les résultats annoncés dans les pages qui suivent se trouvent dans les articles [101, 102, 107, 108, 109, 110, 136].

6.1 La problématique de la quantification des incertitudes

Dans de nombreux problèmes provenant du monde industriel la quantité d'intérêt, que l'on notera pour l'instant y (puis Y quand elle deviendra aléatoire), est l'image par une application déterministe f d'un certain nombre de variables d'entrée x_1, \dots, x_p . Les variables d'entrée pouvant être des réels, des vecteurs ou même des fonctions. La fonction f bien que déterministe, n'est pas connue, c'est généralement un code de calcul dit *boîte noire*. En d'autres termes, si l'on donne à notre ordinateur un jeu d'entrée x_1, \dots, x_p ce dernier nous donne une valeur $f(x_1, \dots, x_p)$, cependant, on n'a pas un accès direct à la fonction f . L'objectif rêvé serait ici de connaître parfaitement la fonction f . Ce souhait est bien évidemment irréaliste, surtout que dans de nombreuses applications industrielles l'exécution du code numérique pour obtenir une seule valeur de y peut prendre plusieurs heures (parfois quelques jours). En plus de l'aspect temporel, un autre problème vient se rajouter. Dans les applications, les variables d'entrée sont souvent mal connues (les ingénieurs parlent de variables incertaines). Elles sont par la suite modélisées par des variables (vecteurs ou processus) aléatoires. On doit alors faire face à deux problèmes : comment gérer la fonction f inconnue et le coût élevé de calcul ? Comment gérer l'aléatoire sur les variables d'entrées ?

Imaginons que nous ayons le droit qu'à une centaine d'appels à notre code numérique, il est naturel d'essayer de choisir les points d'expériences (un point $x = (x_1, \dots, x_p)$ pour lequel on calcule la valeur $f(x_1, \dots, x_p)$ est appelé point d'expérience) permettant d'obtenir un maximum d'information. On parle alors de plan d'expérience. Une fois nos points d'expériences choisis, il peut être judicieux de construire un code approché

moins coûteux, on parle de méta-modèle. On peut aussi vouloir essayer de détecter les variables d'entrée importantes afin de pouvoir concentrer notre étude sur ces variables et de négliger les autres. Les problématiques de plans d'expériences, de constructions de méta-modèles et de détections de variables importantes sont bien évidemment liées. Néanmoins, j'ai focalisé mon attention sur le troisième point.

6.2 Détection de variables importantes et indices de Sobol

Notre objectif est d'identifier dans notre modèle de type boîte noire les variables d'entrée les plus importantes. C'est-à-dire celles qui auront le plus d'influence sur la sortie. Une des approches consiste à considérer que les variables d'entrée sont des variables aléatoires indépendantes dont la loi est fixée par l'utilisateur en fonction de l'idée qu'il a concernant l'incertitude sur les entrées (nous renvoyons à [187] ainsi qu'à [221] et à leur bibliographie). Ainsi, la sortie du modèle est maintenant une variable aléatoire. Lorsque la sortie est un scalaire, sa variance peut alors être décomposée grâce à la décomposition dite de Hoeffding [244, 10, 127]. Chaque variance partielle mesure en un certain sens la partie de l'aléa de la sortie due à l'entrée considérée. En considérant alors le rapport entre cette variance partielle et la variance totale, on obtient une mesure de l'importance de chaque variable d'entrée appelée l'indice de Sobol de la variable considérée [230]. Ainsi les entrées les plus influentes peuvent être identifiées et rangées en fonction de la valeur des indices de Sobol correspondants. Une fois, ces indices définis, le problème de leur estimation reste entier. En pratique, on cherche à estimer ces indices en utilisant un nombre fini d'évaluations du code numérique ([125]). De nombreuses approches de type Monte-Carlo ou quasi-Monte-Carlo ont été développées par les ingénieurs (par exemple la méthode FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test) [77, 239]). Une manière très astucieuse d'estimer les indices de Sobol est la méthode appelée Pick-Freeze (voir [230, 231]). Cette méthode est très puissante car elle est d'une part basée sur un plan d'expérience très spécifique qui ne dépend absolument pas du modèle considéré et d'autre part transforme le problème initial complexe d'estimation statistique en un simple problème de régression linéaire. Bien que très utilisé en pratique (voir par exemple [222]), cet estimateur n'avait jamais été étudié d'un point de vue mathématique. Ces propriétés de convergence n'étaient pas connues et il était naturel et même important pour justifier son utilisation de connaître son comportement. Par exemple qu'elle était sa vitesse de convergence (existence d'un théorème central limite? De Berry-Esseen? Propriétés de concentration? Optimalité en terme d'efficacité asymptotique). Afin de comparer plusieurs indices entre eux, il était aussi important d'être capable d'obtenir une loi limite jointe pour l'estimation simultanée de plusieurs indices (cela permet d'obtenir des régions de confiance et de mettre en place une stratégie rigoureuse de tests statistiques). Ce premier travail a été effectué en collaboration Fabrice Gamboa, Alexandre Janon, Agnès Lagnoux, Maëlle Nodet et Clémentine Prieur [136, 109]. Une fois ce premier travail effectué plusieurs questions restaient en suspens.

- Malgré l'efficacité asymptotique de l'estimateur Pick-Freeze, est-il possible de trouver de meilleurs estimateurs? L'optimalité en terme d'efficacité asymptotique est un peu trompeuse car ce type d'optimalité est lié au plan d'échantillonnage considéré. Nous avons étudié (travail effectué avec Jean-Claude Fort, Agnès Lagnoux et Béatrice Laurent [101]) un modèle de régression linéaire fonctionnelle. Nous avons proposé à partir d'un plan d'échantillonnage différent un estimateur des indices de Sobol, étudié ses propriétés (TCL, efficacité) et l'avons comparé à l'estimateur Pick-Freeze. Le nouvel estimateur considéré est construit en tenant compte de la forme spécifique du modèle, si bien que, lorsque la méthode est bien adaptée aux processus en présences, il est meilleur que l'estimateur Pick-Freeze. Rappelons, que ce dernier ne dépend pas du modèle, ainsi ses performances sont les mêmes quelque soit le modèle.
- Les indices de Sobol n'étaient définis rigoureusement que pour des sorties réelles, il était normal de se poser la question de comment les généraliser lorsque la sortie du code est un vecteur ou une fonction. C'est ce que nous avons fait avec Fabrice Gamboa, Alexandre Janon et Agnès Lagnoux [108]. Nous avons expliqué comment définir des indices de Sobol qui gardent les mêmes propriétés que les indices pour les sorties réelles.
- Il restait alors encore au moins une question fondamentale qui finalement aurait dû être la question de départ (il semble que peu de personnes se la pose...) les indices de Sobol sont-ils si bien adaptés que cela pour détecter les variables influentes? Les indices de Sobol sont construits à partir d'une décomposition

de la variance et par suite ils ne peuvent être pertinents que pour détecter les variables influentes pour le comportement moyen de notre modèle mais certainement pas pour d'autres comportements (par exemple des comportements extrêmes). Avec Jean-Claude Fort et Nabil Rachdi [102], nous avons montré que l'importance d'une variable dépendait fortement de la quantité à laquelle on s'intéresse et nous avons proposé une méthodologie permettant de construire un indice en fonction de la quantité d'intérêt. Ensuite avec Fabrice Gamboa et Agnès Lagnoux [110], nous avons proposé un indice qui prend en compte toute la distribution de la sortie et pas seulement sa variance. Cet indice est basé sur la distance de Cramér-von Mises. La bonne surprise de notre approche est qu'il existe encore un estimateur de type Pick-Freeze pour cet indice et ainsi en terme de coût d'estimation, il n'est pas plus cher de regarder un indice prenant en compte toute la distribution plutôt qu'un indice basé uniquement sur la variance.

Il est maintenant grand temps de définir rigoureusement l'indice de Sobol.

On note $X := (X_1, \dots, X_p)$ les variables d'entrées définies sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et à valeurs dans un espace mesurable $E = E_1 \times \dots \times E_p$, soit $f : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ une fonction mesurable inconnue (p et k sont des entiers strictement positifs) et Y la sortie du code

$$Y = f(X_1, \dots, X_p),$$

on suppose que les variables X_1, \dots, X_p sont indépendantes et que Y est de carré intégrable (i.e. $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$). On suppose aussi que la matrice de covariance de Y est définie positive.

Soit \mathbf{u} un sous-ensemble de $\{1, \dots, p\}$ et $\sim \mathbf{u}$ sont complémentaires dans $\{1, \dots, p\}$. On note $X_{\mathbf{u}} = (X_i, i \in \mathbf{u})$ et $E_{\mathbf{u}} = \prod_{i \in \mathbf{u}} E_i$.

Grâce à l'indépendance des variables d'entrée X_1, \dots, X_p on peut décomposer f de la manière suivante

$$f(X) = c + f_{\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}) + f_{\sim \mathbf{u}}(X_{\sim \mathbf{u}}) + f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}, X_{\sim \mathbf{u}}), \quad (6.1)$$

où $c \in \mathbb{R}^k$, $f_{\mathbf{u}} : E_{\mathbf{u}} \rightarrow \mathbb{R}^k$, $f_{\sim \mathbf{u}} : E_{\sim \mathbf{u}} \rightarrow \mathbb{R}^k$ et $f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}} : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ sont données par

$$c = \mathbb{E}(Y), \quad f_{\mathbf{u}} = \mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}) - c, \quad f_{\sim \mathbf{u}} = \mathbb{E}(Y|X_{\sim \mathbf{u}}) - c, \quad f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}} = Y - f_{\mathbf{u}} - f_{\sim \mathbf{u}} - c.$$

Comme les termes apparaissant dans la décomposition sont orthogonaux dans L^2 . On peut calculer de chaque côté de (6.1) les matrices de covariances et obtenir

$$\Sigma = C_{\mathbf{u}} + C_{\sim \mathbf{u}} + C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}. \quad (6.2)$$

Ici Σ , $C_{\mathbf{u}}$, $C_{\sim \mathbf{u}}$ et $C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}$ dénotent respectivement les matrices de covariance de Y , $f_{\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}})$, $f_{\sim \mathbf{u}}(X_{\sim \mathbf{u}})$ et $f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}, X_{\sim \mathbf{u}})$.

Cette décomposition s'appelle la décomposition de Hoeffding de f [244, 10, 127].

Supposons maintenant que $k = 1$ (i.e. $Y \in \mathbb{R}$) et divisons par $\Sigma = \text{Var}(Y)$ l'égalité (6.2) on obtient alors

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{C_{\mathbf{u}}}{\Sigma} + \frac{C_{\sim \mathbf{u}}}{\Sigma} + \frac{C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}}{\Sigma} \\ 1 &= \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)} + \frac{(\text{Var} \mathbb{E}(Y|X_{\sim \mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)} + \frac{C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}}{\Sigma}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Définition 6.2.1. Lorsque $Y \in \mathbb{R}$, on appelle indice de Sobol (fermé) par rapport aux entrées $X_{\mathbf{u}} = (X_i, i \in \mathbf{u})$, la quantité $S^{\mathbf{u}} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}}))}{\text{Var}(Y)}$.

Cette quantité représente la proportion de la variance de Y qui est due à l'action des variables $X_{\mathbf{u}}$ seules.

6.3 Estimation d'un indice de Sobol et propriétés asymptotiques de l'estimateur Pick-Freeze lorsque $k = 1$

6.3.1 Les estimateurs Pick-Freeze

Il est relativement évident qu'en général (et ce même si on connaît la fonction f) le calcul analytique des indices de Sobol est impossible. Il est donc nécessaire de pouvoir les estimer. Il est aussi important de pouvoir

estimer conjointement plusieurs indices afin par exemple de pouvoir mettre en place des tests statistiques. La quantité que l'on désire estimer $S^{\mathbf{u}}$ (ou un vecteur de différents $S^{\mathbf{u}}$) se présente sous forme d'un rapport dont le dénominateur est une variance que l'on sait bien estimer, le problème résulte donc dans l'estimation du numérateur. A première vue la tâche peut sembler lourde car il y a une espérance conditionnelle à estimer. Heureusement pour nous, il existe une jolie astuce permettant de représenter la variance de l'espérance conditionnelle comme une covariance [130]. Pour cela, on introduit la variable Pick-Freeze Y^u , définie de la manière suivante : soit $X = (X_1, \dots, X_p)$ et $X^u = (X_1^u, \dots, X_p^u)$ où $X_j^u = X_j$ si $j \in \mathbf{u}$ et X_j^u est une copie indépendante de X_j sinon. On note alors

$$Y^u = f(X^u).$$

Lemme 6.3.1. *Supposons que les variables Y et Y^X soient de carré intégrable. Alors*

$$\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{\mathbf{u}})) = \text{Cov}(Y, Y^u).$$

En particulier,

$$S^{\mathbf{u}} = \frac{\text{Cov}(Y, Y^u)}{\text{Var}(Y)}. \quad (6.4)$$

Soit $(X^i)_{i=1, \dots, N}$ un N -échantillon de X et $(X^{u,i})_{i=1, \dots, N}$ un N -échantillon de X^u , on pose $Y_i = f(X^i)$ et $Y_i^u = f(X^{u,i})$. Il est alors naturel d'estimer $S^{\mathbf{u}}$ par

$$S_N^u = \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^u - \left(\frac{1}{N} \sum Y_i\right) \left(\frac{1}{N} \sum Y_i^u\right)}{\frac{1}{N} \sum Y_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum Y_i\right)^2}. \quad (6.5)$$

On retrouve cet estimateur dans [130], où il a été montré son bon comportement en pratique.

Le lecteur attentif aura remarqué que nous disposons ici de deux N -échantillons (non indépendants) mais de même lois que Y et que nous ne servons que d'un de ces deux échantillons pour estimer $\mathbb{E}(Y)$ et $\text{Var}(Y)$. Il paraît intuitif qu'en utilisant la totalité des observations nous devrions obtenir un estimateur plus performant. Pour cela nous considérons

$$T_N^u = \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^u - \left(\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i + Y_i^u}{2}\right]\right)^2}{\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i^2 + (Y_i^u)^2}{2}\right] - \left(\frac{1}{N} \sum \left[\frac{Y_i + Y_i^u}{2}\right]\right)^2}. \quad (6.6)$$

Cet estimateur concurrent a été introduit dans [182]. Nous allons montrer qu'il est meilleur que S_N^X au sens où il est asymptotiquement efficace.

6.3.2 Propriétés asymptotiques des estimateurs

Consistance et théorème central limite

Proposition 6.3.1 (Consistance). *On a*

$$(S_N^X, T_N^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{a.s.} (S^X, S^X). \quad (6.7)$$

Proposition 6.3.2 (Janon, Klein, Lagnoux, Nodet, Prieur [136] T.C.L.). *Si $\mathbb{E}(Y^4) < \infty$. Alors*

$$\sqrt{N} (S_N^X - S^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma_S^2) \quad (6.8)$$

et

$$\sqrt{N} (T_N^X - S^X) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma_T^2) \quad (6.9)$$

où

$$\sigma_S^2 = \frac{\text{Var}((Y - \mathbb{E}(Y))[(Y^X - \mathbb{E}(Y)) - S^X(Y - \mathbb{E}(Y))])}{(\text{Var}(Y))^2},$$

$$\sigma_T^2 = \frac{\text{Var}((Y - \mathbb{E}(Y))(Y^X - \mathbb{E}(Y)) - S^X/2((Y - \mathbb{E}(Y))^2 + (Y^X - \mathbb{E}(Y))^2))}{(\text{Var}(Y))^2}.$$

6.3.3 Efficacité asymptotique

Il est facile de voir que

Proposition 6.3.3. *La variance asymptotique de T_N^X est toujours inférieure à celle de S_N^X , avec égalité si et seulement si $S^X = 0$ ou $S^X = 1$.*

De plus on peut montrer que T_N^X est asymptotiquement efficace. L'efficacité asymptotique étend la notion de borne de Cramér-Rao aux modèles semi-paramétriques. Elle permet de définir une notion d'optimalité pour les estimateurs. Nous renvoyons au Chapitre 25 de [244] pour plus de détails sur cette notion.

Proposition 6.3.4 (Efficacité asymptotique). *$\{T_N^X\}_N$ est asymptotiquement efficace pour estimer S^X .*

6.3.4 Propriétés non asymptotiques

Comme en pratique n ne vaut jamais $+\infty$, il est raisonnable d'essayer de quantifier l'erreur entre l'estimateur et l'indice de Sobol lorsque n est fixé. Nous présentons dans cette section deux quantifications l'une à l'aide d'inégalités de concentration, l'autre par un théorème de Berry-Esseen.

Inégalités de concentration

Nous présentons ici des inégalités de concentration vérifiées par les estimateurs Pick-Freeze des indices de Sobol. Pour cela, on introduit la fonction h définie pour $x > -1$ par $h(x) = (1+x)\ln(1+x) - x$.

Inégalités de concentration pour l'estimateur $S_{N,Cl}^u$ Considérons les variables aléatoires

$$U_i^\pm = Y_i Y_i^u - (S_{Cl}^u \pm y)(Y_i)^2 \text{ et } J_i^\pm = (S_{Cl}^u \pm y)Y_i - Y_i^u$$

et notons V_U^+ (respectivement V_U^- , V_J^+ et V_J^-) les moments d'ordre 2 des variables i.i.d. U_i^+ (resp. U_i^- , J_i^+ et J_i^-).

Théorème 6.3.1 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109] T.C.L.). *Soient $b > 0$ et $y > 0$ et supposons que les variables Y_i et Y_i^u sont à valeurs dans $[-b, b]$. Alors*

$$\mathbb{P}(S_{N,Cl}^u \geq S_{Cl}^u + y) \leq M_1 + 2M_2 + 2M_3, \quad (6.10)$$

$$\mathbb{P}(S_{N,Cl}^u \leq S_{Cl}^u - y) \leq M_4 + 2M_2 + 2M_5, \quad (6.11)$$

où

$$M_1 = \exp \left\{ -\frac{NV_U^+}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{V_U^+} \frac{yV}{2} \right) \right\}, \quad M_3 = \exp \left\{ -\frac{NV_J^+ b^2}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{bV_J^+} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\},$$

$$M_2 = \exp \left\{ -\frac{NV}{b^2} h \left(\frac{b}{V} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\}, \quad M_4 = \exp \left\{ -\frac{NV_U^-}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{V_U^-} \frac{yV}{2} \right) \right\},$$

$$M_5 = \exp \left\{ -\frac{NV_J^- b^2}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{bV_J^-} \sqrt{\frac{yV}{2}} \right) \right\}$$

et $b_U = b^2(1 + S_{Cl}^u + y)$.

Remarque 6.3.1. Il est aussi possible d'obtenir des inégalités de concentration pour $S_{N,Cl}^u$ en appliquant directement le Corollary 1.17 de Ledoux [165]. Ainsi si Y est bornée alors pour tout $t \geq 0$ on a

$$\mathbb{P}(S_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \geq t) \leq \exp \left\{ -\frac{N}{2} \left(\frac{(1 - \frac{1}{N})tV}{8(1 + 2(S^u(f) + t))} \right)^2 \right\},$$

et pour tout $t \geq 0$, on a

$$\mathbb{P}(S_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \leq -t) \leq \exp \left\{ -\frac{N}{2} \left(\frac{(1 - \frac{1}{N})tV}{8(1 + 2(S^u(f) + t))} \right)^2 \right\}.$$

On peut majorer la quantité inconnue S_{Cl}^u par 1 et obtenir

$$\begin{aligned} \forall t \geq 0, \quad \mathbb{P}(S_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \geq t) &\leq \exp \left(-\frac{NV^2}{128} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2 \left(\frac{t}{5 + 2t}\right)^2 \right), \\ \forall t \geq 0, \quad \mathbb{P}(S_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \leq -t) &\leq \exp \left(-\frac{NV^2}{128} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2 \left(\frac{t}{5 + 2t}\right)^2 \right). \end{aligned}$$

Les bornes obtenues dans le Théorème 4.1 sont plus précises que celles obtenues en appliquant le résultat de Ledoux. Le résultat de Ledoux est très général car il est valable pour n'importe quelle fonctionnelle Lipschitz et donc il prend en compte le pire des cas. Notre approche a permis d'utiliser la forme particulière des estimateurs et d'obtenir ainsi des bornes plus précises.

Inégalités de concentration pour l'estimateur $T_{N,Cl}^u$ Soit $Z_i = \frac{Y_i + Y_i^u}{2}$ et considérons les variables aléatoires $K_i^\pm = Y_i Y_i^u - (S_{Cl}^u \pm y) \frac{(Y_i)^2 + (Y_i^u)^2}{2}$. Soit V_K^+ (resp. V_K^-) le moment d'ordre 2 de la variable K_i^+ (resp. K_i^-).

Théorème 6.3.2 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109] T.C.L.). *Soient $b > 0$, $y > 0$ et supposons que Y soit à valeurs dans $[-b, b]$. Alors*

$$\mathbb{P}(T_{N,Cl}^u \geq S_{Cl}^u + y) \leq m_1 + 2m_2 \mathbb{1}_{\{S_{Cl}^u + y - 1 \geq 0\}}, \quad (6.12)$$

$$\mathbb{P}(T_{N,Cl}^u \leq S_{Cl}^u - y) \leq m_3 + 2m_4 \mathbb{1}_{\{S_{Cl}^u + y - 1 \geq 0\}}, \quad (6.13)$$

où

$$\begin{aligned} m_1 &= \exp \left\{ -\frac{NV_K^+}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{V_K^+} \frac{yV}{2} \right) \right\}, \quad m_2 = \exp \left\{ -\frac{N(V+C)}{2b^2} h \left(\frac{b}{V+C} \sqrt{\frac{2yV}{S_{Cl}^u + y - 1}} \right) \right\}, \\ m_3 &= \exp \left\{ -\frac{NV_K^-}{b_U^2} h \left(\frac{b_U}{V_K^-} \frac{yV}{2} \right) \right\}, \quad m_4 = \exp \left\{ -\frac{N(V+C)}{2b^2} h \left(\frac{b}{V+C} \sqrt{\frac{2yV}{y + 1 - S_{Cl}^u}} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Remarque 6.3.2. Comme précédemment, on peut appliquer le résultat de Ledoux et obtenir pour $t \geq 0$

$$\mathbb{P}(T_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \geq t) \leq \exp \left(-\frac{NV^2}{32} \left(\frac{t - \frac{1}{2N}(S^u(f) + t - 1)(S^u(f) + 1)}{1 + S^u(f) + t + |S^u(f) + t - 1|} \right)^2 \right),$$

et pour $t \geq \frac{(1 - S^u(f))(1 + S^u(f))}{2N - (1 + S^u(f))}$,

$$\mathbb{P}(T_{N,Cl}^u - S_{Cl}^u \leq -t) \leq \exp \left(-\frac{NV^2}{32} \left(\frac{t + \frac{1}{2N}(S^u(f) - t - 1)(S^u(f) + 1)}{1 + S^u(f) - t + |S^u(f) - t - 1|} \right)^2 \right).$$

De même en majorant S_{C1}^u par 1 on obtient

$$\begin{aligned} \forall t \geq 0, \quad \mathbb{P}(T_{N,C1}^u - S_{C1}^u \geq t) &\leq \exp\left(-\frac{NV^2}{128} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2 \left(\frac{t}{1+t}\right)^2\right), \\ \forall t \in \left]\frac{9}{8N}, 1\right[, \quad \mathbb{P}(T_{N,C1}^u - S_{C1}^u \leq -t) &\leq \exp\left(-\frac{NV^2}{128} \left(t - \frac{9}{8N}\right)^2\right). \end{aligned}$$

Théorèmes de Berry-Esseen

Dans ce paragraphe, nous montrons des théorèmes de type Berry-Esseen pour l'estimateur $S_{N,C1}^u$. Le premier théorème est une application d'un résultat général de Pinelis [197]. Ce résultat de Pinelis peut être vu comme l'analogue de la Delta méthode, il permet de transporter un résultat de type Berry-Esseen à l'aide de fonctions régulières. Ce théorème est très général et fait intervenir des constantes difficilement calculables en pratique. C'est pour cela que nous présentons un second théorème valable pour des variables centrées mais pour lequel les constantes sont explicites.

Dans la suite, Φ désigne la fonction de répartition de la loi Gaussienne centrée réduite.

Le travail de Pinelis Nous rappelons ici un résultat de Pinelis démontré dans [197]. Soit $(V_i)_{i \geq 1}$ une suite de variables aléatoires centrées i.i.d. à valeurs dans \mathbb{R}^d muni de sa norme euclidienne $\|\dots\|$ ($d \in \mathbb{N}^*$). Soit f une fonction mesurable de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R} vérifiant $f(0) = 0$ dérivable au sens de Fréchet en 0 et telle que

$$\exists \varepsilon > 0, \exists M_\varepsilon > 0 \text{ t.q. } |f(x) - L(x)| \leq \frac{M_\varepsilon}{2} \|x\|^2 \quad (6.14)$$

où $L := Df(0)$ est la dérivée de Fréchet de f au point 0.

Remarque 6.3.3. La condition (6.14) est automatiquement satisfaite si f est de classe C^2 dans un voisinage de 0.

Théorème 6.3.3 (Corollary 3.7 dans [197]). *Soit $p \in (2, 3]$ et supposons (6.14) satisfaite, que*

$$\sigma := \sqrt{\mathbb{E}(L(V)^2)} > 0,$$

et que $(\mathbb{E}(\|V\|^p))^{1/p} < \infty$. Alors pour tout $z \in \mathbb{R}$

$$\left| \mathbb{P}\left(\frac{f(\bar{V}_n)}{\sigma/\sqrt{n}} \leq z\right) - \Phi(z) \right| \leq \frac{\kappa}{n^{p/2-1}}, \quad (6.15)$$

où κ est une constante ne dépendant que de p .

Un théorème de Berry-Esseen Général Pour toute variable aléatoire Z , on notera Z^c sa version recentrée $Z - \mathbb{E}(Z)$.

Théorème 6.3.4 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109] T.C.L.). *Si Y admet des moments d'ordre 6. Alors, pour tout $z \in \mathbb{R}$,*

$$\left| \mathbb{P}\left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} [S_{N,C1}^u - S_{C1}^u] \leq z\right) - \Phi(z) \right| \leq \frac{\kappa}{\sqrt{N}}. \quad (6.16)$$

Où

$$\sigma^2 := \text{Var}\left(\frac{1}{V} (Y^c (Y^u)^c - S_{C1}^u (Y^c)^2)\right)$$

est la variance asymptotique de $\sqrt{N} S_{N,C1}^u$.

Malheureusement, il semble difficile de calculer explicitement la constante κ et donc en un certain sens ce théorème n'est pas très utile. Cependant si l'on suppose les variables centrées et en modifiant légèrement nos estimateurs (on estime plus l'espérance qui vaut 0), on peut obtenir un théorème de Berry-Esseen avec des constantes explicites.

Un théorème de Berry-Esseen avec constantes explicites Considérons l'estimateur

$$\tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} := \frac{\frac{1}{N} \sum Y_i Y_i^{\mathbf{u}}}{\frac{1}{N} \sum Y_i^2}$$

et supposons les variables centrées, Soit $\kappa \approx 0.42$ la meilleure constante connue dans le théorème classique de Berry-Esseen ([156]).

Théorème 6.3.5 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109] T.C.L.). *Si la variable Y est centrée et admet un moment d'ordre 6, alors pour tout t dans \mathbb{R}*

$$\left| \mathbb{P} \left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} (\tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \leq t \right) - \Phi(t) \right| \leq \frac{\kappa \mu_{3,N}}{\sqrt{N}} + \left| \Phi(t) - \Phi \left(\frac{t}{\sqrt{1 + \frac{t\nu_N}{\sigma\sqrt{NV^2}}}} \right) \right|. \quad (6.17)$$

Où

$$\sigma^2 := \text{Var} \left(\frac{1}{V} (YY^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} Y^2) \right) \quad (6.18)$$

est la variance asymptotique de $\sqrt{N} \tilde{S}_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}}$ et

$$\begin{aligned} \mu_{3,N} &:= \mathbb{E} \left[\left| \frac{\Delta_n - \mathbb{E}(\Delta_n)}{\sqrt{\text{Var} \Delta_n}} \right|^3 \right], \\ \Delta_N &:= \sigma^{-1} V \left[YY^{\mathbf{u}} - \left(S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} + \frac{t\sigma}{\sqrt{N}} \right) Y^2 \right], \\ \nu_N &:= \left(\frac{t\sigma}{\sqrt{N}} + 2S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \right) \text{Var}(Y^2) - 2\text{Cov}(YY^{\mathbf{u}}, Y^2). \end{aligned}$$

6.4 Estimation jointe de plusieurs indices de Sobol et tests statistiques

Afin de savoir si une variable est plus importante qu'une autre, il est important d'être capable d'estimer conjointement un vecteur d'indices de Sobol et de connaître le comportement limite de ce vecteur. Soit l un entier naturel et $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_l)$, l sous-ensembles distincts de $\{1, \dots, p\}$ (on rappelle que p est le nombre d'entrée). On note

$$S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} = (S_{\text{Cl}}^{u_1}, \dots, S_{\text{Cl}}^{u_l})$$

et

$$S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} = (S_N^{u_1}, \dots, S_N^{u_l}), \quad T_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} = (T_N^{u_1}, \dots, T_N^{u_l})$$

Théorème 6.4.1 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux, Prieur [109] T.C.L.). *Si $\mathbb{E}(Y^4) < \infty$. Alors*

1.

$$\sqrt{N} (S_N^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_l(0, \Gamma_{\mathbf{u},S}) \quad (6.19)$$

où $\Gamma_{\mathbf{u},S} = ((\Gamma_{\mathbf{u},S})_{l,j})_{1 \leq l,j \leq k}$ avec

$$(\Gamma_{\mathbf{u},S})_{l,j} = \frac{\text{Cov}(YY^{u_l}, YY^{u_j}) - S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Cov}(YY^{u_j}, Y^2) - S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Cov}(YY^{u_l}, Y^2) + S_{\text{Cl}}^{u_l} S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Var}(Y^2)}{(\text{Var}(Y))^2}$$

2.

$$\sqrt{N} (T_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_k(0, \Gamma_{\mathbf{u},T}) \quad (6.20)$$

où $\Gamma_{\mathbf{u},T} = ((\Gamma_{\mathbf{u},T})_{l,j})_{1 \leq l,j \leq k}$ avec

$$(\Gamma_{\mathbf{u},T})_{l,j} = \frac{\text{Cov}(YY^{u_l}, YY^{u_j}) - S_{\text{Cl}}^{u_l} \text{Cov}(YY^{u_j}, M^{\mathbf{u}}) - S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Cov}(YY^{u_l}, M^{\mathbf{u}}) + S_{\text{Cl}}^{u_l} S_{\text{Cl}}^{u_j} \text{Var}(M^{\mathbf{u}})}{(\text{Var}(Y))^2}.$$

Application : quelques tests statistiques

Afin de simplifier les notations les vecteurs $S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}}$ seront des vecteurs colonnes. Dans cette section, on propose une méthode générale pour construire quelques tests de niveaux α qui seront ensuite illustrés sur quelques exemples. Soit $\mathbf{u} := (u_1, \dots, u_l)$ (resp. $\mathbf{v} := (v_1, \dots, v_l')$) et $\mathbf{w} := (w_1, \dots, w_l')$ tel que pour tout $i = 1, \dots, l$, u_i (resp. $v_i \subseteq I_p$ et $w_i \subseteq I_p$) est un sous-ensemble de $I_p := \{1, \dots, p\}$. On s'intéresse aux problèmes suivant de tests :

$$H_0 : "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} = 0" \text{ et } "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{v}} = S_{\text{Cl}}^{\mathbf{w}}" \text{ contre } H_1 : "H_0 \text{ n'est pas vraie}."$$

Remarque 6.4.1. Il est possible aussi de considérer les problématiques suivantes

$$H_0 : "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \leq s" \text{ contre } H_1 : "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} > s",$$

ou

$$H_0 : "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \leq S_{\text{Cl}}^{\mathbf{v}}" \text{ contre } H_1 : "S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} > S_{\text{Cl}}^{\mathbf{v}}".$$

Le Théorème 6.4.1 assure que

$$G_N := \sqrt{N} \left(\begin{pmatrix} S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \\ S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{v}} - S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{w}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} S_{\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \\ S_{\text{Cl}}^{\mathbf{v}} - S_{\text{Cl}}^{\mathbf{w}} \end{pmatrix} \right) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_{l+l'}(0, \Gamma). \quad (6.21)$$

De plus, comme nous disposons d'une expression explicite de Γ , il est facile de construire (à partir de moyennes empiriques) un estimateur Γ_N de Γ convergeant presque sûrement. Posons

$$\tilde{G}_N := \sqrt{N} \begin{pmatrix} S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{u}} \\ S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{v}} - S_{N,\text{Cl}}^{\mathbf{w}} \end{pmatrix}.$$

Il est alors clair que

Corollaire 6.4.1. *Sous H_0 , $\tilde{G}_N \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_{l+l'}(0, \Gamma)$.*

Sous H_1 , $|\tilde{G}_N(1)| + |\tilde{G}_N(2)| \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{p.s.} \infty$.

Ce corollaire permet de construire plusieurs tests. Il est bien connu que lorsque l'hypothèse nulle est vectorielle, il n'existe pas de test uniformément plus puissant (même pas parmi les tests sans biais, nous renvoyons au Chapitre 15 dans [244]). En pratique, on se ramène à la dimension 1, en introduisant une fonction $F : \mathbb{R}^{l+l'} \rightarrow \mathbb{R}$ et en considérant la problématique de test $H_0(F) : F(h) = 0$ (resp. $H_1(F) : F(h) \neq 0$) à la place de $H_0 : "h = 0"$ (resp. $H_1 : "h \neq 0"$). Le choix d'un test raisonnable dépend de l'alternative sous laquelle on désire avoir une grande puissance.

Remarque 6.4.2. Considérons $T_N = A\tilde{G}_N$ où A est une forme linéaire définie sur $\mathbb{R}^{l+l'}$,

sous H_0 , $T_N \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, A\Gamma A')$. En remplaçant Γ par Γ_N et en utilisant le lemme de Slutsky, on obtient

$$(A\Gamma_N A')^{-1/2} T_N \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Ainsi, on rejette H_0 si $(A\Gamma_N A')^{-1/2} T_N \geq z_\alpha$ où z_α est le $1 - \alpha$ quantile de la loi gaussienne centrée réduite. Evidemment, on peut remplacer A par n'importe quelle application différentiable et appliquer la Delta-méthode.

Quelques illustrations numériques

Exemple 1 Dans cette première illustration, nous comparons 5 tests statistiques à l'aide de leur fonction puissance. Soit $X = (X_1, X_2) \sim \mathcal{N}(0, I_2)$, et

$$Y = f(X) = \lambda_1 X_1 + \lambda_1 X_2 + \lambda_2 X_1 X_2,$$

avec $2\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = 1$. On désire ici tester

$$H_0 : "S_{Cl}^1 = S_{Cl}^2 = \lambda_1^2 = 0" \quad \text{contre} \quad H_1 : " \lambda_1 \neq 0".$$

Les calculs conduisent à

$$\begin{aligned} \Gamma(1, 1) &= \Gamma(2, 2) = 3 - 2\lambda_1^2 - 11\lambda_1^4 + 24\lambda_1^6 - 24\lambda_1^8 \\ \Gamma(2, 1) &= \Gamma(1, 2) = -7\lambda_1^4 + 24\lambda_1^6 - 24\lambda_1^8. \end{aligned}$$

La limite gaussienne du Théorème 6.4.1 est $\mathcal{N}_2(0, 3Id_2)$ sous H_0 et $\mathcal{N}_2(0, \Gamma)$ sous H_1 .

Test 1 : Prenons comme statistique de test $T_{N,1} = \tilde{G}_N(1) + \tilde{G}_N(2)$.

Sous H_0 , $T_{N,1} \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 6)$ ainsi nous rejetons H_0 si $T_{N,1} > z_\alpha$ où $z_\alpha/\sqrt{6}$ est le $(1 - \alpha)$ -quantile de la loi gaussienne centrée réduite. Alors que sous H_1 ,

$$(T_{N,1} - 2\sqrt{N}\lambda_1^2) / (2[\Gamma(1, 1) + \Gamma(1, 2)])^{1/2} \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Il est alors facile de calculer explicitement la fonction puissance. Nous avons dessiné cette fonction puissance dans la Figure 6.1 (**true power fct t1**) ainsi que la fonction puissance simulée (**estimated power fct t1**). Pour calculer la puissance simulée, nous n'avons supposé connu ni la matrice Γ ni la fonction f .

Test 2 : Comme les indices de Sobol sont positifs, le problème est un problème unilatéral de test. Nous introduisons la statistique de test suivante $T_{N,2} = |\tilde{G}_N(1)| + |\tilde{G}_N(2)|$. On rejette H_0 si $T_{N,2} > z_\alpha$ où $z_\alpha/\sqrt{3}$ est le $(1 - \alpha)$ -quantile de la variable aléatoire admetant pour densité

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2/4} \Phi(u/\sqrt{2}) \mathbb{1}_{\mathbb{R}_+}(u),$$

où Φ est la fonction de répartition de la loi gaussienne centrée réduite. Sous H_1 , la fonction puissance de $T_{N,2}$ ainsi que la variance limite sont estimées. Les résultats obtenus sont aussi présentés dans la Figure 6.1.

Test 3 : Considérons maintenant $T_{N,3} = |\tilde{G}_N(1) + \tilde{G}_N(2)|$. On rejette H_0 si $T_{N,3} > z_\alpha$ où $z_\alpha/\sqrt{6}$ est le $(1 - \alpha)$ -quantile de la loi gaussienne centrée réduite. Sous H_1 , la fonction puissance de $T_{N,3}$ ainsi que la variance limite sont estimées. Les résultats obtenus sont aussi présentés dans la Figure 6.1.

Test 4 : On utilise la norme L^2 et considérons $T_{N,4} = (G_N(1))^2 + (G_N(2))^2$. Sous H_0 , $T_{N,4}/3 \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \chi_2(2)$ on rejette H_0 si $T_{N,4} > z_\alpha$ où $z_\alpha/3$ est le $(1 - \alpha)$ -quantile d'une variable du χ_2 à deux degrés de liberté. Sous H_1 , la fonction puissance de $T_{N,4}$ ainsi que la variance limite sont estimées. Les résultats obtenus sont aussi présentés dans la Figure 6.1.

Test 5 : On utilise finalement la norme infinie et considérons $T_{N,5} = \max(|G_N(1)|; |G_N(2)|)$. On rejette H_0 si $T_{N,5} > z_\alpha$ où $z_\alpha/\sqrt{3}$ est le $[1 + \sqrt{1 - \alpha}]/2$ -quantile de la loi gaussienne centrée réduite. Sous H_1 , la fonction puissance de $T_{N,5}$ ainsi que la variance limite sont estimées. Les résultats obtenus sont aussi présentés dans la Figure 6.1.

Dans la Figure 6.1 on présente les différentes fonctions puissances obtenues pour les tailles d'échantillons $N = 100, 500$ et 1000 .

Exemple 2 Soit $X = (X_1, X_2, X_3) \sim \mathcal{N}(0, I_3)$, $2\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = 1$ et

$$Y = f(X) = \lambda_1(X_2 + X_3) + \lambda_2 X_1 X_2.$$

Testons si X_1 a une influence c'est-à-dire $H_0 : "S_{Cl}^{\{1\}} = 0, S_{Cl}^{\{1,2\}} = S_{Cl}^{\{2\}}$ et $S_{Cl}^{\{1,3\}} = S_{Cl}^{\{3\}}"$. Le Théorème 6.4.1 assure que

$$G_N := \sqrt{N} \left(\begin{pmatrix} S_{N,Cl}^1 \\ S_{N,Cl}^{1,2} - S_{N,Cl}^2 \\ S_{N,Cl}^{1,3} - S_{N,Cl}^3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} S_{Cl}^1 \\ S_{Cl}^{1,2} - S_{Cl}^2 \\ S_{Cl}^{1,3} - S_{Cl}^3 \end{pmatrix} \right) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_3(0, \Gamma).$$

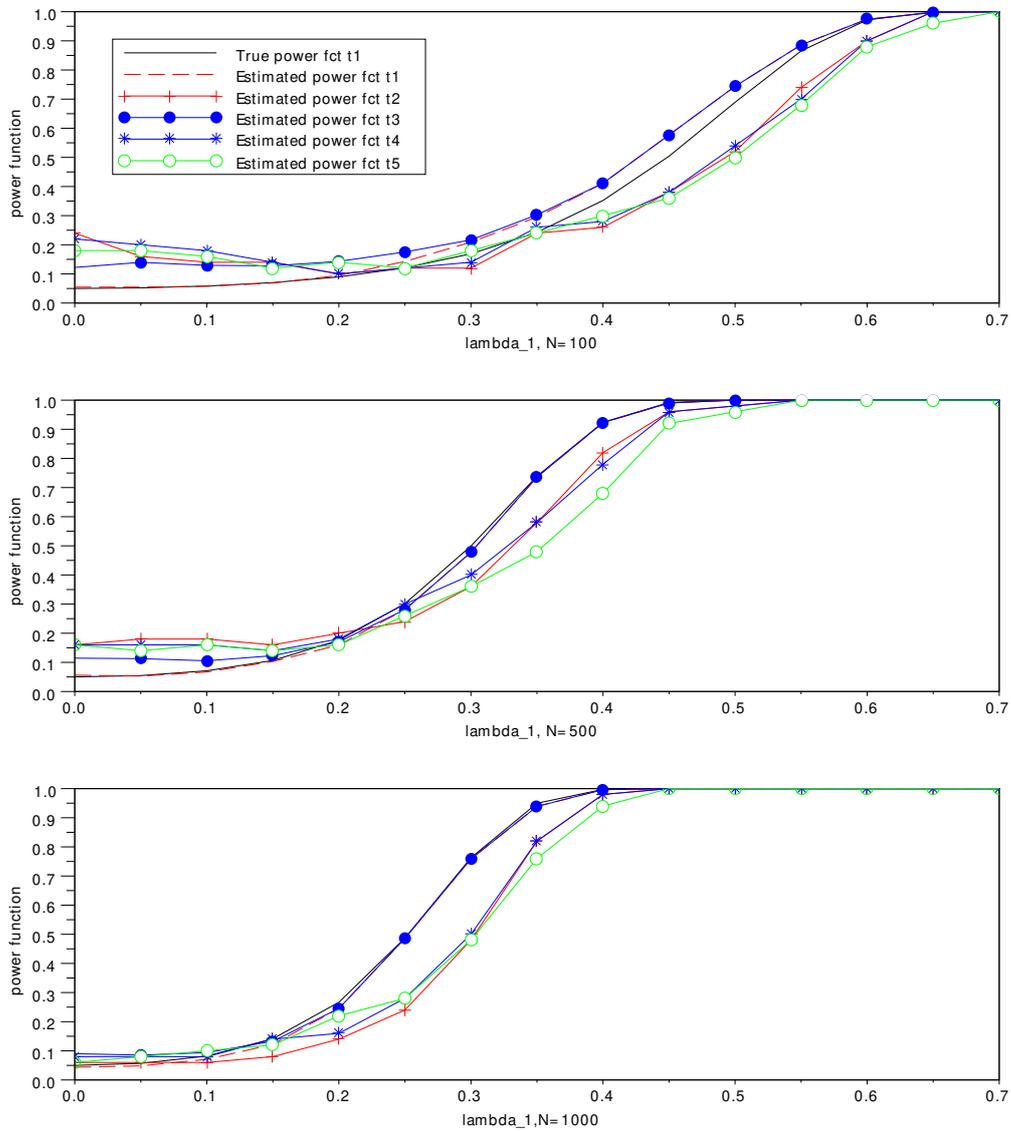
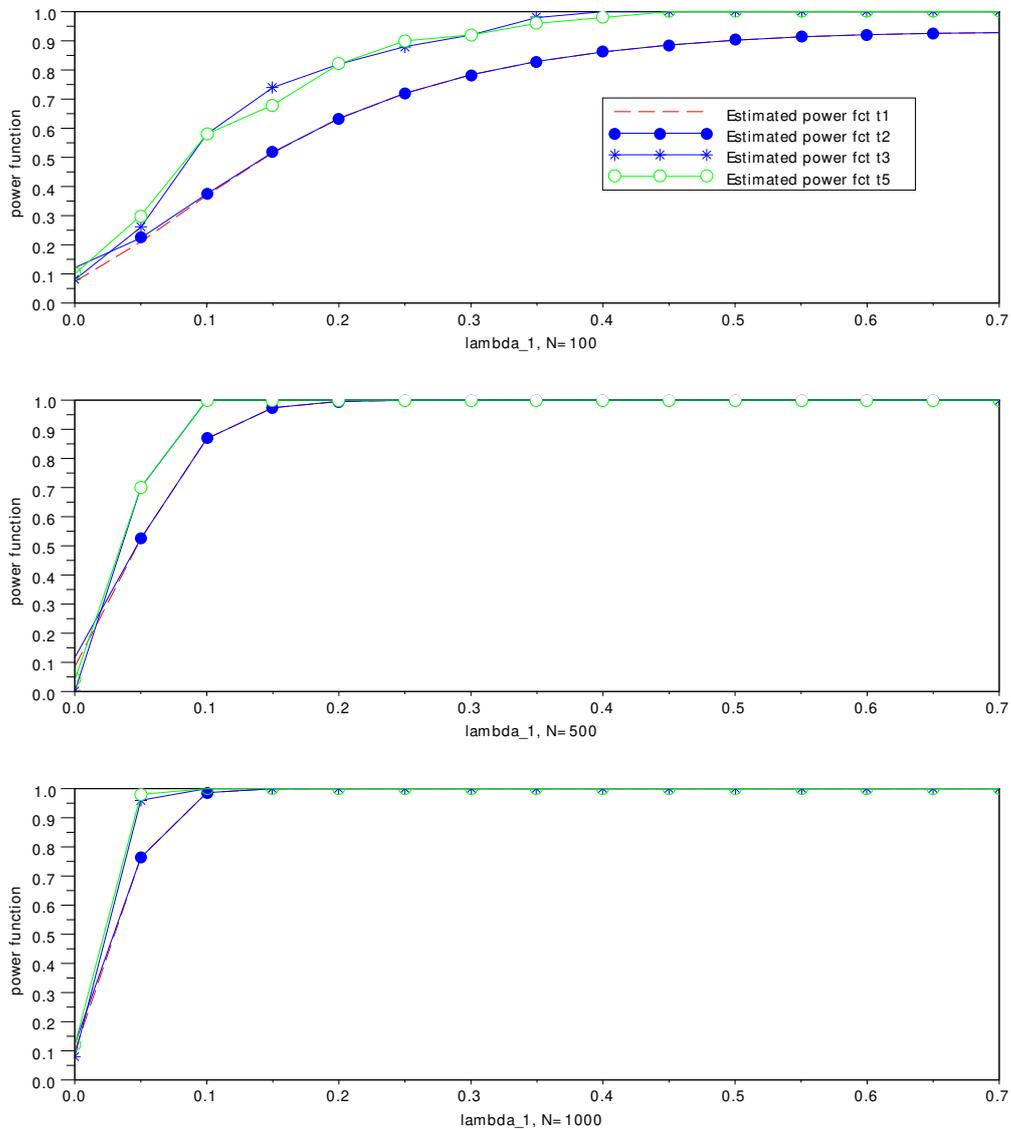


FIGURE 6.1 – Fonctions puissances

Sous H_0 la matrice de covariance limite Γ est l'identité. Sous H_1 , on estime cette matrice par sa version empirique Γ_N . On procède comme dans l'Exemple 1, et présentons les résultats obtenus dans la Figure 6.2. Nous avons tracé les différentes fonctions puissances pour les tailles d'échantillons $N = 100, 500$ et 1000 .

A la lecture des Figures 6.1 et 6.2, on peut remarquer que, comme prévu, lorsque N augmente, on discrimine de mieux en mieux les deux hypothèses. Les fonctions puissances estimées convergent vers les vraies fonctions puissances. On remarque aussi qu'aucun test n'est uniformément plus puissant.

FIGURE 6.2 – Fonctions puissances estimées pour différentes tailles d'échantillons N .

6.5 Sorties vectorielles et fonctionnelles

6.5.1 Introduction

Dans les paragraphes précédents, nous avons défini les indices de Sobol, proposé une méthode d'estimation et étudié les propriétés statistiques de ces estimateurs lorsque la sortie Y était réelle. Bien évidemment, dans de nombreuses applications la sortie est vectorielle (voir fonctionnelle). Il est donc naturel de vouloir généraliser les indices de Sobol pour ce type de sorties.

Des généralisations des indices de Sobol pour des sorties vectorielles ou fonctionnelles ont été considérées d'une manière empirique dans [58] et [160]. La généralisation que nous allons proposer se retrouve de fa-

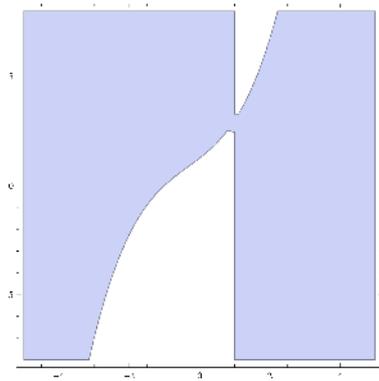


FIGURE 6.3 – Zone $(a-1)(a^3+a^2+5a+5-4b) \geq 0$. Le bleu correspond à la région où $S^1(\|Y\|^2) \geq S^2(\|Y\|^2)$.

çon implicite dans le travail de Lamboni et de ses coauteurs [160]. Le point de départ de la construction de ces nouveaux indices est une fois encore la décomposition de Hoeffding multidimensionnelle de la sortie vectorielle. Cependant comme le produit matriciel est non commutatif, plusieurs choix d'indices sont possible. Afin de réduire les possibilités, nous allons demander à nos indices d'une part d'avoir certaines propriétés naturelles d'invariances et d'autre part d'être facilement estimables (par exemple en utilisant la méthode Pick-Freeze). Nous commençons par étudier quelques exemples simples afin de montrer qu'il est difficile d'étendre directement les indices scalaires. Puis, nous proposerons de nouveaux indices, montrerons comment les estimer et nous étudierons certaines propriétés statistiques.

6.5.2 Motivation

Nous présentons ici deux exemples qui illustrent la nécessité de définir correctement des indices de sensibilités adaptés aux sorties vectorielles.

Exemple 6.5.1. Considérons le modèle

$$Y = f^{a,b}(X_1, X_2) := \begin{pmatrix} f_1^{a,b}(X_1, X_2) \\ f_2^{a,b}(X_1, X_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 + X_1 X_2 + X_2 \\ a X_1 + b X_1 X_2 + X_2 \end{pmatrix},$$

où X_1 et X_2 sont des variables aléatoires i.i.d. de lois gaussiennes centrées et réduites. Commençons par calculer les indices de Sobol coordonnés par coordonnées, c'est-à-dire les indices $S^j(f_i^{a,b})$ de $f_i^{a,b}$ par rapport aux variables X_j ($i, j = 1, 2$). On obtient alors

$$\begin{aligned} (S^1(f_1^{a,b}), S^1(f_2^{a,b})) &= (1/3, a^2/(1+a^2+b^2)), \\ (S^2(f_1^{a,b}), S^2(f_2^{a,b})) &= (1/3, 1/(1+a^2+b^2)). \end{aligned}$$

Si bien que les rapports

$$\frac{S^1(f_i^{a,b})}{S^2(f_i^{a,b})}, \quad i = 1, 2$$

ne dépendent pas de $b!!!$

De plus si $|a| > 1$, le rapport est plus grand que 1 ainsi X_1 semble être la variable la plus influente. Maintenant, considérons $\|Y\|^2$ et calculons les indices de Sobol associés. On obtient que

$$S^1(\|Y\|^2) \geq S^2(\|Y\|^2) \iff (a-1)(a^3+a^2+5a+5-4b) \geq 0.$$

Lorsque l'on considère la quantité $\|Y\|^2$, la région où X_1 est la variable la plus influente dépend de la valeur de b . La Figure 6.3 représente cette région.

Exemple 6.5.2. Etudions maintenant le modèle

$$Y = f(X_1, X_2) = \begin{pmatrix} X_1 \cos X_2 \\ X_1 \sin X_2 \end{pmatrix}$$

où $(X_1, X_2) \sim \text{Unif}([0; 10]) \otimes \text{Unif}([0; \pi/2])$.

Il est évident que

$$S^1(f_1^{a,b}) = S^1(f_2^{a,b}) = \frac{10}{5\pi^2 - 30} \approx 0.52, \quad S^2(f_1^{a,b}) = S^2(f_2^{a,b}) = \frac{3(\pi^2 - 8)}{4(\pi^2 - 6)} \approx 0.36.$$

Ainsi X_1 semble plus influente X_2 .

En considérant la norme au carré $\|Y\|^2$, on a $\|Y\|^2 = X_1^2$ qui est indépendant de X_2 .

On pourrait se contenter de considérer le vecteur des indices de Sobol de chaque coordonnée de la sortie. Cependant, lorsque la dimension de la sortie augmente, l'estimation d'un tel vecteur d'indice (un indice pour chaque coordonnée) est de plus en plus coûteuse. De plus l'interprétation d'un tel vecteur ne serait pas chose aisée. Il est donc clair qu'il est nécessaire d'introduire des indices de Sobol facile à estimer et à interpréter et qui condensent toute l'information présente.

6.5.3 Indices de Sobol généralisés

Cadre

On se replace dans le cadre général. Soit $X := (X_1, \dots, X_p)$ les variables d'entrée définies sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ et à valeurs dans un espace mesurable $E = E_1 \times \dots \times E_p$. La sortie est

$$Y = f(X_1, \dots, X_p),$$

où $f : E \rightarrow \mathbb{R}^k$ est une fonction mesurable inconnue. On considère à nouveau la décomposition de Hoeffding (voir (6.1) pour un rappel des notations) qui conduit à

$$\Sigma = C_{\mathbf{u}} + C_{\sim \mathbf{u}} + C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}. \quad (6.22)$$

Où Σ , $C_{\mathbf{u}}$, $C_{\sim \mathbf{u}}$ et $C_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}$ correspondent respectivement aux matrices de covariance de Y , $f_{\mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}})$, $f_{\sim \mathbf{u}}(X_{\sim \mathbf{u}})$ et de $f_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(X_{\mathbf{u}}, X_{\sim \mathbf{u}})$.

Il est bon de noter ici que lorsque la sortie est réelle (i.e. $k = 1$), les matrices de covariances sont des scalaires. Dans le cas général ($k \geq 2$), pour toute matrice M de taille k l'équation (6.22) peut-être "projetée" dans \mathbb{R} comme suit

$$\text{Tr}(M\Sigma) = \text{Tr}(MC_{\mathbf{u}}) + \text{Tr}(MC_{\sim \mathbf{u}}) + \text{Tr}(MC_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}).$$

Cela permet de définir (dès que $\text{Tr}(M\Sigma) \neq 0$) la mesure de M -sensibilité de Y par rapport à $X_{\mathbf{u}}$ par

$$S^{\mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}.$$

Evidemment, on définit de manière analogue

$$S^{\sim \mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\sim \mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}, \quad S^{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(M; f) = \frac{\text{Tr}(MC_{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}})}{\text{Tr}(M\Sigma)}.$$

Il est alors évident que

Lemme 6.5.1 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]).

1. La mesure de sensibilité généralisée se somme à 1

$$S^{\mathbf{u}}(M; f) + S^{\sim \mathbf{u}}(M; f) + S^{\mathbf{u}, \sim \mathbf{u}}(M; f) = 1. \quad (6.23)$$

2. $0 \leq S^{\mathbf{u}}(M; f) \leq 1$.

3. Si on compose à gauche f par une application linéaire O de \mathbb{R}^k la mesure de sensibilité devient

$$S^{\mathbf{u}}(M; Of) = \frac{\text{Tr}(MOC_{\mathbf{u}}O^t)}{\text{Tr}(MO\Sigma O^t)} = \frac{\text{Tr}(O^tMOC_{\mathbf{u}})}{\text{Tr}(O^tMO\Sigma)} = S^{\mathbf{u}}(O^tMO; f). \quad (6.24)$$

4. Si $k = 1$ alors pour tout $M \neq 0$, on a $S^{\mathbf{u}}(M; f) = S^{\mathbf{u}}(f)$.

Exemple fondamental : cas de l'identité

Prenons $M = \text{Id}_k$ (la matrice identité de dimension k), dans ce cas l'indice de sensibilité est le même que celui considéré au travers d'une analyse en composantes principales dans [160]. On pose $S^{\mathbf{u}}(f) = S^{\mathbf{u}}(\text{Id}_k; f)$. L'indice $S^{\mathbf{u}}(f)$ possède les propriétés suivantes

Proposition 6.5.1 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]).

1. $S^{\mathbf{u}}(f)$ est invariant par composition de f par une isométrie de \mathbb{R}^k i.e.

$$\text{pour toute matrice carré } O \text{ de taille } k \text{ telle que } O^tO = \text{Id}_k, \quad S^{\mathbf{u}}(Of) = S^{\mathbf{u}}(f);$$

2. $S^{\mathbf{u}}(f)$ est invariant par tout changement d'échelle de f i.e.

$$\text{pour tout } \lambda \in \mathbb{R}, \quad S^{\mathbf{u}}(\lambda f) = S^{\mathbf{u}}(f).$$

Remarque 6.5.1. Ces propriétés sont naturelles à imposer à nos indices. Nous allons maintenant établir que $S^{\mathbf{u}}(M; f)$ vérifie ces propriétés si et seulement si $M = \lambda \text{Id}_k$ ($\lambda \in \mathbb{R}^*$). Ainsi le choix *canonique* parmi les indices de la forme $S^{\mathbf{u}}(M; f)$ est l'indice $S^{\mathbf{u}}(f)$.

La matrice identité est le "seul" bon choix

Proposition 6.5.2 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). Soit M une matrice carrée de taille k vérifiant

1. M est indépendante de f et de \mathbf{u} ;

2. M est de rang plein;

3. $S^{\mathbf{u}}(M; f)$ est invariant par composition à gauche de f par les isométries de \mathbb{R}^k ;

alors $S^{\mathbf{u}}(M; \cdot) = S^{\mathbf{u}}(\cdot)$.

Remarque 6.5.2 (Une formulation variationnelle). Supposons que $\mathbb{E}(Y) = 0$, (recentrer Y si ce n'est pas le cas). Comme en dimension 1, on peut voir que cet indice est la solution du problème de minimisation (voir [136])

$$\underset{a}{\text{Argmin}} \mathbb{E} \|Y^{\mathbf{u}} - aY\|^2.$$

Par conséquent, $S^{\mathbf{u}}(f)$ peut-être vu comme la projection de $Y^{\mathbf{u}}$ sur $\{aY, a \in \mathbb{R}\}$.

Remarque 6.5.3. La condition $\text{Tr}(\Sigma) \neq 0$ nécessaire pour définir correctement les indices est vérifiée dès que Y n'est pas presque sûrement constante.

Illustrons sur deux exemples, cette définition d'indice.

Exemple 6.5.3. Considérons

$$Y = f^a(X_1, X_2) = \begin{pmatrix} aX_1 \\ X_2 \end{pmatrix},$$

avec X_1 et X_2 deux variables aléatoires indépendantes de loi gaussiennes centrées réduites. Il est clair que

$$S^1(f^a) = \frac{a^2}{a^2 + 1} \quad \text{et} \quad S^2(f^a) = \frac{1}{a^2 + 1} = 1 - S^1(f).$$

Exemple 6.5.4. Reprenons l'Exemple 6.5.1

$$Y = f^{a,b}(X_1, X_2) = \begin{pmatrix} X_1 + X_1X_2 + X_2 \\ aX_1 + bX_1X_2 + X_2 \end{pmatrix}.$$

On a alors

$$S^1(f^{a,b}) = \frac{1+a^2}{4+a^2+b^2} \quad \text{et} \quad S^2(f^{a,b}) = \frac{2}{4+a^2+b^2}$$

et

$$S^1(f^{a,b}) \geq S^2(f^{a,b}) \iff a^2 \geq 1.$$

Ce résultat a l'interprétation naturelle suivante : comme la variable X_1 est multipliée par a , elle a plus d'influence dès que $|a| > 1$.

6.5.4 Où il est montré qu'on ne peut pas avoir unicité d'un indice vectoriel

Nous allons montrer qu'il est possible de construire d'autres indices ayant les mêmes propriétés d'invariances que $S^u(f)$.

Un indice concurrent

Nous allons utiliser la décomposition de Hoeffding (6.22) d'une manière différente afin d'obtenir un indice de Sobol matriciel par rapport à la variable X_u . En effet, pour toute matrices A et B vérifiant $AB = \Sigma^{-1}$ on peut choisir comme indice matriciel

$$BC_uA. \tag{6.25}$$

Cet indice est une matrice carrée de taille k . De plus toutes combinaisons convexes d'indices matriciels de la forme (6.25) est encore un bon candidat pour être un indice matriciel.

Remarque 6.5.4 (Formulation variationnelle revisitée). Dans l'esprit de la Remarque 6.5.2 (toujours sous l'hypothèse $\mathbb{E}(Y) = 0$), si l'on considère le problème de minimisation

$$\underset{M \in \mathcal{M}_k}{\text{Argmin}} \mathbb{E} \|P^t Y^u - MP^t Y\|^2, \tag{6.26}$$

où P est une matrice telle que $P^t \Sigma P$ est diagonale et \mathcal{M}_k est l'ensemble de toutes les matrices carrées de taille k . Alors la solution de ce problème

$$P^t C_u \Sigma^{-1} P$$

est un excellent candidat pour être un indice de Sobol matriciel (avec $A = \Sigma^{-1} P$ et $B = P^t$).

Cependant la version symétrisée

$$P^t \Sigma^{-1} C_u P$$

est aussi un excellent candidat (ici $A = P$ et $B = P^t \Sigma^{-1}$).

Afin d'obtenir un indice matriciel raisonnable, ce dernier devra

1. Être une matrice symétrique : l'influence de l'entrée X_i sur les coordonnées k et l de la sortie Y doit être la même que celle sur les coordonnées l et k .
2. Il doit posséder les mêmes propriétés d'invariances (par isométries, translations et homothéties) que l'indice scalaire.

Afin de simplifier l'exposé, on suppose que les valeurs propres de Σ sont toutes simples. Réordonnons les et notons les $0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_k$. Soit $(O_i)_{i=1,\dots,k}$ le vecteur propre unitaire associé à λ_i dont la première coordonnée non nulle est positive et soit O la matrice orthogonale formée des vecteurs colonnes $(O_i)_i$. Soit \mathcal{H}_k le groupe des matrices de permutations signées de taille k . Ainsi $P \in \mathcal{H}_k$ si et seulement si chaque ligne et chaque colonne de P a un et un seul élément non nul, ce dernier appartenant à $\{-1, 1\}$.

Remarquons maintenant que toute matrice orthogonale diagonalisant Σ peut s'écrire sous la forme OP , avec $P \in \mathcal{H}_k$. Pour toute mesure μ de probabilité sur \mathcal{H}_k . On définit

$$T^{\mathbf{u},\mu} = \frac{1}{2} \left(\int_{\mathcal{H}_k} (OP)^t (\Sigma^{-1}C_{\mathbf{u}} + C_{\mathbf{u}}\Sigma^{-1}) OP \mu(dP) \right). \quad (6.27)$$

Proposition 6.5.3 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). *$T^{\mathbf{u},\mu}$ est invariant par isométries, homothéties et par translations.*

Remarque 6.5.5. On peut se demander pourquoi considère des indices aussi compliqué alors qu'une première idée aurait été de définir des indices construits à partir de

$$\Sigma^{-\alpha}C_{\mathbf{u}}\Sigma^{-\beta} + \Sigma^{-\beta}C_{\mathbf{u}}\Sigma^{-\alpha}, \quad \text{avec } \alpha + \beta = 1.$$

Cependant ces indices ne sont pas admissibles même si $\Sigma^{-\alpha}\Sigma^{-\beta} = \Sigma^{-1}$ (voir (6.25)) car ils ne sont pas invariants par isométries.

Soit μ^* la mesure de probabilité uniforme sur l'ensemble fini \mathcal{H}_k .

Lemme 6.5.2 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). *Soit A une matrice carrée de taille k . Alors*

$$\int_{\mathcal{H}_k} P^t AP \mu^*(dP) = \frac{\text{Tr}(A)}{k} I_k.$$

Grâce à ce lemme et à (6.27), il est possible de définir un indice de Sobol matriciel par

$$T^{\mathbf{u}} := T^{\mathbf{u},\mu^*} = \frac{\text{Tr}(\Sigma^{-1}C_{\mathbf{u}})}{k} I_k. \quad (6.28)$$

Cet indice ne dépend que du nombre réel

$$T^{\mathbf{u}} := T^{\mathbf{u},\mu^*} = \frac{\text{Tr}(\Sigma^{-1}C_{\mathbf{u}})}{k} I_k, \quad (6.29)$$

il est donc facilement interprétable.

Comparons $S^{\mathbf{u}}(f)$ et $T^{\mathbf{u}}$

Nous avons défini deux indices raisonnables pour généraliser les indices de Sobol. L'un est un scalaire, l'autre est une matrice symétrique (en fait c'est un multiple de la matrice identité donc en un certain sens c'est aussi un scalaire). La question naturelle est : quel indice doit-on préférer ?

Bien évidemment, il n'y a pas de réponse universelle à cette question.

Cependant, du point de vue du statisticien, $T^{\mathbf{u}}$ présente un défaut majeur. Son estimation nécessite celle de l'inverse de la matrice de covariance (i.e. de Σ^{-1}). Cette estimation peut être périlleuse. Par contre l'estimation de $S^{\mathbf{u}}(f)$ requiert uniquement l'estimation de traces de matrices de covariances. De plus comme le montre l'exemple suivant l'indice $T^{\mathbf{u}}$ peut être inutile dans certains modèles.

Exemple 6.5.5. Revenons à l'Exemple 6.5.4

$$Y = f^{a,b}(X_1, X_2) = \begin{pmatrix} X_1 + X_1X_2 + X_2 \\ aX_1 + bX_1X_2 + X_2 \end{pmatrix}.$$

On a

$$T^{\mathbf{1}} = \frac{(b-a)^2 + (a-1)^2}{4[(b-a)^2 + (a-1)(b-1)]} I_2, \quad T^{\mathbf{2}} = \frac{(b-1)^2 + (a-1)^2}{4[(b-a)^2 + (a-1)(b-1)]} I_2.$$

Ainsi

$$T^{\mathbf{1}} \geq T^{\mathbf{2}} \iff (a-1)(a-2b+1) \geq 0$$

alors que nous avons obtenu le résultat plus intuitif

$$S^1(f) \geq S^2(f) \iff a^2 \geq 1.$$

De plus T^u est non informatif car lorsque $a = 1$, les indices T^1 et T^2 vérifient

$$T^1 = T^2 = \frac{1}{4}I_2$$

et ne dépendent pas de b .

Ainsi $S^u(f)$ semble être un indice plus pertinent.

6.5.5 Estimation de $S^u(f)$

L'estimateur Pick-Freeze

Soit $Y^u = f(X_u, X'_{\sim u})$ où $X'_{\sim u}$ est une copie indépendante de $X_{\sim u}$ et toujours indépendante de X_u . Pour tout $N \in \mathbb{N}^*$ on considère N copies indépendantes Y_1, \dots, Y_N (resp. Y_1^u, \dots, Y_N^u) de Y (resp. Y^u). Pour $l = 1, \dots, k$, et $i = 1, \dots, N$, on note $Y_{i,l}$ (resp. $Y_{i,l}^u$) la $l^{\text{ième}}$ coordonnée de Y_i (resp. Y_i^u). On estime alors $S^u(f)$ par

$$S_{u,N} = \frac{\sum_{l=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_{i,l} Y_{i,l}^u - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l} + Y_{i,l}^u}{2} \right)^2 \right)}{\sum_{l=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l}^2 + (Y_{i,l}^u)^2}{2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_{i,l} + Y_{i,l}^u}{2} \right)^2 \right)}. \quad (6.30)$$

Remarque 6.5.6. Cet estimateur n'est autre que

$$S_{u,N} = \frac{\text{Tr}(C_{u,N})}{\text{Tr}(\Sigma_N)} \quad (6.31)$$

où $C_{u,N}$ et Σ_N sont les estimateurs empiriques de $C_u = \text{Cov}(Y, Y^u)$ et de $\Sigma = \text{Var}(Y)$ définis par

$$C_{u,N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i^u Y_i^t - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^u}{2} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^u}{2} \right)^t$$

et

$$\Sigma_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i Y_i^t + Y_i^u (Y_i^u)^t}{2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^u}{2} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i + Y_i^u}{2} \right)^t.$$

Propriétés asymptotiques

Comme dans le cas des sorties réelles, on a la consistance, la normalité asymptotique ainsi que l'efficacité asymptotique de cet estimateur.

Proposition 6.5.4 (Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]). 1. $S_{u,N}$ converge presque sûrement vers $S^u(f)$ lorsque $N \rightarrow +\infty$.

2. Si $\mathbb{E}(Y_l^4) < \infty$ pour tout $l = 1, \dots, k$. Pour $l = 1, \dots, k$, on pose

$$U_l = (Y_{1,l} - \mathbb{E}(Y_l))(Y_{1,l}^u - \mathbb{E}(Y_l)), \quad V_l = (Y_{1,l} - \mathbb{E}(Y_l))^2 + (Y_{1,l}^u - \mathbb{E}(Y_l))^2.$$

Alors

$$\sqrt{N}(S_{u,N} - S^u(f)) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_1(0, \sigma^2) \quad (6.32)$$

où $\sigma^2 = a^2 \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(U_l, U_{l'}) + b^2 \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(V_l, V_{l'}) + 2ab \sum_{l,l' \in \{1, \dots, k\}} \text{Cov}(U_l, V_{l'})$, avec $a = \frac{1}{\sum_{l=1}^k \text{Var}(Y_l)}$, $b = -\frac{a}{2} S^u(f)$.

3. Si $\mathbb{E}(Y_l^4) < \infty$ pour tout $l = 1, \dots, k$. Alors $(S_{u,N})_N$ est asymptotiquement efficace pour estimer $S^u(f)$.

6.5.6 Cas des sorties fonctionnelles

Dans de nombreuses applications, la sortie du code Y est une fonction. Nous allons donc étendre nos indices (sous certaines hypothèses) aux cas des sorties vectorielles de dimension infinie.

Définition

Soit \mathbb{H} un espace de Hilbert séparable muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et de la norme $\|\cdot\|$. Soit f une fonction à valeurs dans \mathbb{H} , ainsi Y et $Y^{\mathbf{u}}$ sont des variables aléatoires à valeurs dans \mathbb{H} . On suppose que $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$. Nous rappelons que $\mathbb{E}(Y)$ est défini par dualité comme l'unique élément de \mathbb{H} vérifiant

$$\mathbb{E}(\langle h, Y \rangle) = \langle h, \mathbb{E}(Y) \rangle \text{ pour tout } h \in \mathbb{H}.$$

Dans toute cette section, on suppose le code centré ($\mathbb{E}(Y) = 0$).

De plus l'opérateur de covariance associé à Y est l'endomorphisme Γ défini pour $h \in \mathbb{H}$ par $\Gamma(h) = \mathbb{E}[\langle Y, h \rangle Y]$. Comme $\mathbb{E}(\|Y\|^2) < \infty$, Γ est un opérateur à trace. Sa trace est donc bien définie. On peut maintenant généraliser au cas des sorties fonctionnelles, la définition de $S^{\mathbf{u}}(f)$ introduit dans la Section 6.5.3.

Définition 6.5.1. $S^{\mathbf{u},\infty}(f) = \frac{\text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}})}{\text{Tr}(\Gamma)}$, où $\Gamma_{\mathbf{u}}$ est l'endomorphisme sur \mathbb{H} défini par $\Gamma_{\mathbf{u}}(h) = \mathbb{E}[\langle Y^{\mathbf{u}}, h \rangle Y]$ pour tout $h \in \mathbb{H}$.

La décomposition polaire des traces de Γ et de $\Gamma_{\mathbf{u}}$ va permettre de construire des estimateurs empiriques de $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$.

Lemme 6.5.3 (Décomposition polaire). *On a*

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\Gamma) &= \mathbb{E}(\|Y\|^2) - \|\mathbb{E}(Y)\|^2, \\ \text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}}) &= \frac{1}{4} [\mathbb{E}(\|Y + Y^{\mathbf{u}}\|^2) - \mathbb{E}(\|Y - Y^{\mathbf{u}}\|^2) - 4\|\mathbb{E}(Y)\|^2]. \end{aligned}$$

Soit $(\varphi_l)_{1 \leq l}$ une base orthonormée de \mathbb{H} , alors

$$\|Y\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \langle Y, \varphi_i \rangle^2.$$

Il est classique lorsque l'on traite des données fonctionnelles de décomposer le processus sur une base. Cependant dans de nombreux cas, la base ne peut pas être choisie librement, par exemple on considère la base de Karhunen-Loève qui diagonalise l'opérateur de covariance. La force de notre méthode, réside dans le fait que l'utilisateur peut choisir sans contrainte sa base préférée.

Maintenant, afin d'estimer $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$ (et donc d'estimer au préalable $\text{Tr}(\Gamma)$ et $\text{Tr}(\Gamma_{\mathbf{u}})$), on tronque la somme précédente

$$\|Y\|_m^2 = \sum_{i=1}^m \langle Y, \varphi_i \rangle^2.$$

Estimation of $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$

Comme dans la Section 6.5.5, on considère l'estimateur de $S^{\mathbf{u},\infty}(f)$:

$$S_{\mathbf{u},m,N} = \frac{\frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N (\|Y_i + Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2 - \|Y_i - Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2 - \|\bar{Y} + \bar{Y}^{\mathbf{u}}\|_m^2)}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\|Y_i\|_m^2 + \|Y_i^{\mathbf{u}}\|_m^2}{2} - \left\| \frac{\bar{Y} + \bar{Y}^{\mathbf{u}}}{2} \right\|_m^2 \right)}.$$

Théorème 6.5.1. [Gamboa, Janon, Klein, Lagnoux [108]] Supposons qu'il existe $\delta > 1$ tel que

$$v_l = \mathbb{E}(\langle Y, \varphi_l \rangle^2) = O(l^{-(\delta+1)}) \quad (6.33)$$

et $\delta' > 1$ tel que

$$\mathbb{E}(\langle Y, \phi_l \rangle^4) = O(l^{-\delta'}). \quad (6.34)$$

alors pour tout $m = m(N)$ vérifiant

$$\frac{m(N)}{N^{\frac{1}{2\delta}}} \rightarrow +\infty, \quad \frac{m(N)}{\sqrt{N}} \rightarrow 0, \quad (6.35)$$

on a

$$\sqrt{N}(S_{\mathbf{u},m,N} - S^{\mathbf{u}}(f)) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (6.36)$$

où σ^2 dépend uniquement des moments des variables définissant $S_{\mathbf{u},m,N}$.

6.6 Où il est parfois possible de faire mieux que la méthode Pick-Freeze

6.6.1 Introduction

Comme nous venons de le voir la méthode Pick-Freeze est une méthode puissante permettant d'obtenir des estimateurs (ayant de bonnes propriétés statistiques) des indices de Sobol. C'est une méthode complètement générale qui ne nécessite aucune hypothèse sur le modèle (évidemment Y doit posséder une variance). Il est donc naturel, de penser que si l'on dispose des informations supplémentaires sur le modèle f , il doit être possible de construire des estimateurs plus performant que ceux construits à l'aide de la méthode Pick-Freeze (et ce sans contredire l'efficacité asymptotique!!!). Nous présentons dans cette section les résultats obtenus dans [101]. Nous allons étudier le contexte très particulier d'un modèle de régression linéaire fonctionnelle. Les procédures développées sont inspirées des méthodes introduites dans [161, 162] pour l'étude d'un modèle de densité et dans [246] pour celle d'un modèle de régression. Cette méthode basée sur des estimateurs par projections de fonctionnelle quadratiques, va permettre de construire de nouveaux estimateurs des indices de Sobol.

On considère un espace de Hilbert séparable \mathbb{H} muni d'un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ et on se donne X^1, \dots, X^p , p processus stochastiques centrés indépendants à valeurs dans, \mathbb{H} . On va étudier le modèle de régression linéaire :

$$Y = \mu + \sum_{k=1}^p \langle \beta^k, X^k \rangle + \varepsilon,$$

où β^i , $1 \leq i \leq p$ sont des éléments de \mathbb{H} , $\mu \in \mathbb{R}$ et ε est un bruit centré indépendant des processus X^1, \dots, X^p . Dans le cas particulier où $p = 1$, de nombreuses procédures ont été proposées pour estimer la fonction β . Par exemple des estimateurs par spleens ont été considérés dans [75], alors que [61] propose des méthodes de seuillages pour des estimateurs par projections. Des procédures optimales pour la prédiction ponctuelle dans le modèle de régression linéaire fonctionnelle ont été proposées dans [57]. Les travaux [62] et [122] utilisent quant eux lui l'analyse en composantes principales du processus d'entrée X : β est alors estimé dans un espace de dimension fini engendré par les premières fonctions propres de l'opérateur de covariance empirique de X . On renvoie à [63] pour plus de détails.

Notre approche est basée sur la décomposition de Karhunen-Loève des processus X^k (see e.g. [173, 54, 201, 18, 73]). On supposera ici que les valeurs et fonctions propres sont connues. Le lecteur critique pourrait trouver cette hypothèse forte, cependant, il est classique en analyse de sensibilité que la loi des entrées soit connue.

A partir de la décomposition de Karhunen-Loève, nous construisons des estimateurs naturels des indices de Sobol basés sur des U -statistiques, puis établissons que ces estimateurs sont asymptotiquement normaux

et efficaces (on renvoie à [244] chapters 8 et 25 ou à [133] pour plus de détails sur l'efficacité asymptotique). Cette approche a déjà utilisée dans [62] où les auteurs prouvent un théorème central limite pour des estimateurs de β .

6.6.2 Le modèle

Soit \mathbb{H} un espace de Hilbert séparable muni d'un produit scalaire \langle, \rangle et soit X^1, \dots, X^p p processus stochastiques centrés indépendants à valeurs dans \mathbb{H} .

Notre modèle est défini par

$$Y = \mu + \sum_{k=1}^p \langle \beta^k, X^k \rangle + \varepsilon, \tag{6.37}$$

où $\beta^k, 1 \leq k \leq p$ sont des éléments de \mathbb{H} , $\mu \in \mathbb{R}$ et ε est un bruit centré de variance η^2 indépendant des processus X^1, \dots, X^p . L'indice de Sobol par rapport à la variable X_k est défini par

$$S^k = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^k))}{\text{Var}(Y)}.$$

On désire maintenant estimer le vecteur (S^1, \dots, S^p) en utilisant le n -échantillon $(X_i^1, \dots, X_i^p, Y_i)_{1 \leq i \leq n}$ i.i.d. issu du modèle (6.37). Le dénominateur $\text{Var}(Y)$ est facilement estimable, nous allons donc concentrer nos efforts sur les quantités

$$V^k = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^k)).$$

6.6.3 Le cas $p = 1$ pour comprendre ce qui se passe

Lorsque $p = 1$, le modèle s'écrit simplement

$$Y = \mu + \langle \beta, X \rangle + \varepsilon. \tag{6.38}$$

On observe un n -échantillon $(X_i, Y_i), 1 \leq i \leq n$ de (X, Y) . Il est clair que $\mathbb{E}(Y|X) = \mu + \langle \beta, X \rangle$ et $V^X = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) = \text{Var}(\langle \beta, X \rangle)$. On suppose que $\mathbb{E}(\|X\|^2) < \infty$, si bien que l'opérateur de covariance, défini pour tout $f \in \mathbb{H}$ par $\Gamma(f) = \mathbb{E}[\langle X, f \rangle X]$, est de Hilbert-Schmidt, il est donc diagonalisable au travers de la base orthonormale de Karhunen-Loève. Les fonctions propres sont notées $(\varphi_l, 1 \leq l)$ et les valeurs propres correspondantes (ordonnées de la plus grande à la plus petite) sont notées $(\lambda_l, 1 \leq l)$ si bien que $\sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l < \infty$. Nous renvoyons à [170, 171, 142] pour plus de détails sur la décomposition de Karhunen-Loève. Plus précisément, on a

$$X = \sum_{l=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_l} \xi_l \varphi_l$$

et par suite, $\langle X, \varphi_l \rangle = \sqrt{\lambda_l} \xi_l$. Les variables $(\xi_l)_{l \geq 1}$ sont centrées, décorréelées et de variance 1. De plus si X est un processus Gaussien les variables $(\xi_l)_{l \geq 1}$ sont des gaussiennes centrées réduites indépendantes. Il est important de noter que contrairement au paragraphe 6.5.6 la base est ici imposée (ce qui est assez contraignant). Avant de rentrer dans le vif du sujet, nous commençons par donner quelques exemples de processus et les bases de Karhunen-Loève correspondantes.

Exemple 6.6.1 (Quelques exemples de bases de Karhunen-Loève).

1. Soit $B = (B_t)_{t \in [0,1]}$ un mouvement Brownien standard sur $[0, 1]$ et $\mathbb{H} = \mathbb{L}^2([0, 1], dt)$. Alors il est montré dans [13] que

$$\lambda_l = \frac{1}{(\pi(l - \frac{1}{2}))^2} \quad \text{et} \quad \varphi_l(t) = \sqrt{2} \sin\left(\frac{t}{\sqrt{\lambda_l}}\right), \quad l \geq 1.$$

2. Si $X = (X_t)_{t \in [0,1]}$ est un mouvement Brownien fractionnaire d'indice de Hurst $H \in [0, 1]$. Le comportement asymptotique des valeurs propres est étudié dans [54] où il est montré que

$$\lambda_l = \frac{\sin(\pi H)\Gamma(2H+1)}{(l\pi)^{2H+1}} + o\left(l^{\frac{(2H+2)(4H+3)}{4H+5} + \delta}\right)$$

et $\varphi_l(t) \approx \sqrt{2} \sin\left(\frac{t}{\sqrt{\lambda_l}}\right)$, $l \gg 1, \delta > 0$. Lorsque $H = 1/2$, on retrouve bien évidemment les résultats connus pour le mouvement Brownien standard.

3. Soit $X = (X_t)_t$ un processus d'Ornstein-Uhlenbeck défini par

$$dX_t = \theta(\mu - X_t)dt + \sigma dB_t, \quad \text{avec } \theta > 0, \sigma \geq 0.$$

Une expression explicite des éléments propres est donnée par [73].

4. D'autres exemples de décompositions de Karhunen-Loève sont données dans [173] (Pont Brownien), [18] (Les α -processus de pont de Wiener) et [201] (Processus D'Anderson-Darling).

Développons β dans la base $(\varphi_l)_{l \geq 1}$, $\beta = \sum_{l=1}^{\infty} \gamma_l \varphi_l$ et alors $\mathbb{E}(YX) = \mathbb{E}(\langle X, \beta \rangle X) = \Gamma(\beta) = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l \gamma_l \varphi_l$.

Posons $g = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l \gamma_l \varphi_l$, on a $\gamma_l = \langle g, \varphi_l \rangle / \lambda_l$. Le numérateur V^X est alors donné par

$$V^X = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) = \text{Var}(\langle \beta, X \rangle) = \mathbb{E}(\langle \beta, X \rangle \langle \beta, X \rangle) = \langle \beta, \Gamma(\beta) \rangle.$$

En développant dans la base, on obtient $V^X = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda_l \gamma_l^2$.

On commence à estimer γ_l par sa version empirique (l'estimateur est alors sans biais)

$$\hat{\gamma}_l = \frac{1}{\lambda_l} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle X_i, \varphi_l \rangle Y_i.$$

Puis pour tout $m \in \mathbb{N}^*$, on considère la U -statistique d'ordre 2 :

$$\hat{V}_m^X = \sum_{l=1}^m \frac{1}{\lambda_l} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \langle X_i, \varphi_l \rangle Y_i \langle X_j, \varphi_l \rangle Y_j. \quad (6.39)$$

Comme $\mathbb{E}\hat{V}_m^X = \sum_{l=1}^m \lambda_l \gamma_l^2$, \hat{V}_m^X est un estimateur biaisé de V^X , de biais $\mathbb{B}_m = \sum_{l=m+1}^{\infty} \lambda_l \gamma_l^2$.

Nous allons étudier dans le paragraphe qui suit le comportement asymptotique de \hat{V}_m^X . Evidemment, il sera important de choisir intelligemment le niveau m de troncature.

Théorème central limite et efficacité asymptotique

En utilisant la décomposition de Hoeffding de la U -statistique \hat{V}_m^X (voir [127]), on obtient directement le résultat suivant.

Théorème 6.6.1. [Fort, Klein, Lagnoux, Laurent [101]] Soient $(X_i, Y_i)_{1 \leq i \leq n}$ des variables aléatoires i.i.d. de même loi que (X, Y) issues du modèle (6.38). On suppose que $\mathbb{E}(\|X\|^4) < +\infty$ et que $\mathbb{E}(\varepsilon^4) < +\infty$. On considère le développement de Karhunen-Loève de X

$$X = \sum_{l \geq 1} \sqrt{\lambda_l} \xi_l \varphi_l.$$

On suppose que

$$\sup_{l \geq 1} \mathbb{E}(\xi_l^4) < +\infty. \quad (6.40)$$

Soit V_m^X l'estimateur de V_X défini par (6.39) avec $m = m(n) = \sqrt{nh(n)}$, où $h(n)$ vérifie : $h(n) \rightarrow 0$ et $\forall \alpha > 0, n^\alpha h(n) \rightarrow +\infty$ lorsque $n \rightarrow +\infty$.

S'il existe des constantes $C > 0$ et $\delta > 1$ telles que

$$\forall l \geq 1, \quad \lambda_l \leq Cl^{-\delta}.$$

Alors

$$\sqrt{n}(\widehat{V}_m^X - V^X) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 4\text{Var}(Y < X, \beta >)). \quad (6.41)$$

Quelques commentaires :

1. La condition

$$\forall \alpha > 0, \lim_{n \rightarrow \infty} n^\alpha h(n) = +\infty$$

est vérifiée si l'on choisit $h(n) = 1/\log(n)$. Quelque soit β , l'estimateur \widehat{V}_m^X converge à la vitesse paramétrique $1/\sqrt{n}$.

2. L'estimation de la fonctionnelle quadratique V_m^X est plus simple que celle de l'estimation du signal β , pour laquelle des vitesses de convergences non paramétriques sont obtenues (voir par exemple [72] pour l'estimation de β dans un modèle fonctionnel circulaire).
3. La condition (6.40) est automatiquement satisfaite lorsque X est un processus gaussien, en effet dans ce cas les variables $(\xi_l)_{l \geq 1}$ sont des gaussiennes i.i.d. centrées réduites.
4. On a supposé dans le Théorème 6.6.1 qu'il existait des constantes $C > 0$ et $\delta > 1$ telles que

$$\forall l \geq 1, \quad \lambda_l \leq Cl^{-\delta}.$$

Cette hypothèse n'est pas très forte vu que $\mathbb{E}(\|X\|^2) < +\infty$, implique que $\sum_{l \geq 1} \lambda_l < +\infty$.

Rappelons que l'objectif est ici d'estimer l'indice de Sobol S^X défini par $S^X = V^X/\text{Var}(Y)$. On introduit donc \widehat{V} l'estimateur empirique de $\text{Var}(Y)$

$$\widehat{V} := \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y}_n)^2.$$

On estime alors l'indice de Sobol par $\widehat{V}_m^X/\widehat{V}$. Le théorème de normalité asymptotique qui suit est alors une conséquence de la Delta méthode.

Théorème 6.6.2 (Fort, Klein, Lagnoux, Laurent [101]). *Sous les mêmes hypothèses que dans le Théorème 6.6.1, on a*

$$\sqrt{n} \left(\frac{\widehat{V}_m^X}{\widehat{V}} - S^X \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N} \left(0, \frac{\text{Var}(U)}{(\text{Var}(Y))^2} \right)$$

où $U := 2Y < X, \beta > - S^X(Y - \mathbb{E}(Y))^2$. De plus, $\widehat{V}_m^X/\widehat{V}$ est asymptotiquement efficace pour estimer S .

6.6.4 Cas général

Reprenons maintenant le modèle général (6.37) :

$$Y = \mu + \sum_{k=1}^p < \beta^k, X^k > + \varepsilon.$$

Donnons nous un n -échantillon $(Y_i, X_i^1, \dots, X_i^p)$ de même loi que (Y, X^1, \dots, X^p) .

Estimation à l'aide d'une U -statistique d'ordre 2

Comme les processus $(X^k)_{1 \leq k \leq p}$ sont indépendants, on peut appliquer les résultats de la Section 6.6.3 et estimer les indices de Sobol par une U -statistique d'ordre 2 posons $m \geq 1$ posons

$$\widehat{V}_m^k = \sum_{l=1}^m \frac{1}{\lambda_l^k} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \langle X_i^k, \varphi_l^k \rangle Y_i \langle X_j^k, \varphi_l^k \rangle Y_j.$$

Il reste alors à choisir $m = m(n)$. On commence par remarquer que par indépendance

$$\mathbb{E}(Y|X^k) = \mu + \langle \beta^k, X^k \rangle,$$

ainsi si $\tilde{\varepsilon} = \sum_{j=1, j \neq k}^p \langle \beta^j, X^j \rangle + \varepsilon$ et on retrouve le modèle de la Section 6.6.3. Il n'est donc pas étonnant d'obtenir un théorème central limite pour le vecteur \widehat{V}_m défini par

$$\widehat{V}_m = (\widehat{V}_m^1, \widehat{V}_m^2, \dots, \widehat{V}_m^p)^t. \quad (6.42)$$

Soit $V^j = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^j))$, $j = 1 \dots p$ et $V = (V^1, V^2, \dots, V^p)^t$.

Théorème 6.6.3. [Fort, Klein, Lagnoux, Laurent [101]] Soient $(Y_i, X_i^1, \dots, X_i^p)$ des observations i.i.d. provenant du modèle (6.37).

On suppose que pour tout $1 \leq j \leq p$, $E(\|X^j\|^4) < +\infty$ et que $E(\varepsilon^4) < +\infty$. On considère le développement de Karhunen-Loève de X^j :

$$X^j = \sum_{l \geq 1} \sqrt{\lambda_l^j} \xi_l^j \varphi_l^j.$$

On suppose de plus que

$$\forall 1 \leq j \leq p, \sup_{l \geq 1} E((\xi_l^j)^4) < +\infty. \quad (6.43)$$

et qu'il existe des constantes $C_j > 0$ et $\delta_j > 1$ pour lesquelles

$$\forall 1 \leq j \leq p, \forall l \geq 1, \lambda_l^j \leq C_j l^{-\delta_j}.$$

Alors l'estimateur \widehat{V}_m de V défini par (6.42) est asymptotiquement normal

$$\sqrt{n}(\widehat{V}_m - V) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_p \left(0, 4 (\text{Cov}(Y \langle X^k, \beta^k \rangle, Y \langle X^l, \beta^l \rangle))_{k,l=1 \dots p} \right) \quad (6.44)$$

dès que $m = m(n) = \sqrt{nh(n)}$, où $h(n)$ vérifie : $h(n) \rightarrow 0$ et $\forall \alpha > 0$, $n^\alpha h(n) \rightarrow +\infty$ lorsque $n \rightarrow +\infty$.

Considérons maintenant \widehat{S}_m défini par $\widehat{V}_m/\widehat{V} = (\widehat{V}_m^1/\widehat{V}, \dots, \widehat{V}_m^p/\widehat{V})^T$ où \widehat{V} est l'estimateur empirique de $\text{Var}(Y)$. A l'aide de la Méthode Delta, nous obtenons

Proposition 6.6.1 (Fort, Klein, Lagnoux, Laurent [101]). Sous les mêmes hypothèses que celles du Théorème 6.6.3, nous avons

$$\sqrt{n}(\widehat{S}_m - S) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_p \left(0, \left(\frac{\text{Cov}(U^k, U^l)}{(\text{Var}(Y))^2} \right)_{k,l=1 \dots p} \right),$$

où $U^k := 2(Y - \mathbb{E}(Y)) \langle X^k, \beta^k \rangle - S^k(Y - \mathbb{E}(Y))^2$.

6.6.5 Comparaison des estimateurs Karhunen-Loève et des estimateurs Pick-Freeze

La méthode Pick-freeze, étudiée dans les sections précédentes, est basée sur un plan d'expérience très particulier nécessitant un échantillon de taille $2N$ composé d'un échantillon i.i.d. de taille N et de l'échantillon Pick-Freeze correspondant. L'immense avantage de cette méthode est qu'elle ne fait aucune hypothèse sur le modèle f ni sur la distribution des processus d'entrées X^k . Dans les paragraphes précédents, on a vu que l'estimateur Pick-Freeze était lui aussi asymptotiquement normal et efficace. Nous allons donc essayer de comparer les deux estimateurs qui sont tous deux asymptotiquement efficaces (mais chacun pour un plan d'échantillonnage bien particulier). Pour cela nous allons comparer les variances asymptotiques apparaissant dans les théorèmes centraux limites (Théorème 6.6.3 et Théorème 6.4.1). Nous commençons par rappeler le plan d'échantillonnage ainsi que l'estimateur Pick-Freeze.

Soit (X, Y) issus du modèle (6.37), où $X = (X^1, \dots, X^p)$. Soit $X' = (X'^1, \dots, X'^p)$ une copie indépendante de X . Pour tout $k \in \{1, \dots, p\}$, soit Y^k défini par

$$Y^k = \mu + \langle X^k, \beta^k \rangle + \sum_{j=1, j \neq k}^p \langle X'^j, \beta^j \rangle + \varepsilon',$$

où ε' est une copie indépendante de ε . Soit (Y_1, \dots, Y_n) des copies indépendantes de Y et pour tout $k \in \{1, \dots, p\}$ soit (Y_1^k, \dots, Y_n^k) des copies indépendantes de Y^k . L'estimateur Pick-Freeze pour estimer $V^k = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X^k))$ est

$$\widehat{V}_{SPF}^k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i Y_i^k - \left(\frac{1}{n(p+1)} \sum_{i=1}^n [Y_i + Y_i^1 + \dots + Y_i^p] \right)^2.$$

En divisant par l'estimateur empirique de la variance

$$\widetilde{V} = \frac{1}{n(p+1)} \sum_{i=1}^n \left((Y_i)^2 + (Y_i^1)^2 + \dots + (Y_i^p)^2 \right) - \left(\frac{1}{n(p+1)} \sum_{i=1}^n [Y_i + Y_i^1 + \dots + Y_i^p] \right)^2,$$

on obtient l'estimateur Pick-Freeze de l'indice de Sobol $\widehat{S}_{SPF} = \widehat{V}_{SPF} / \widetilde{V} = (\widehat{V}_{SPF}^1 / \widetilde{V}, \dots, \widehat{V}_{SPF}^p / \widetilde{V})^T$. Nous rappelons que nous avons montré que

$$\sqrt{n} \left(\widehat{S}_{SPF} - S \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}_p \left(0, \left(\frac{\text{Cov}(V^k, V^l)}{(\text{Var}(Y))^2} \right)_{k,l=1 \dots p} \right),$$

où $V^k := Y Y^k - S^k [Y^2 + \sum_{k=1}^p (Y^k)^2] / (p+1)$.

Il s'agit maintenant de comparer les deux variances asymptotiques obtenues. Elles sont définies respectivement par $(\text{Var}(Y))^{-2} \Gamma_{SPF}$ et par $(\text{Var}(Y))^{-2} \Gamma$ (cf. (6.44)). Nous allons donc comparer Γ et Γ_{SPF} .

Pour simplifier un peu les calculs, on suppose que $\varepsilon = 0$ et on pose $W_i = \langle X^i, \beta^i \rangle$, $\sigma_i^2 = \text{Var}(W_i)$, $\sigma^2 = \sum_{i=1}^p \sigma_i^2$ et $S^i = \sigma_i^2 / \sigma^2$. De simples calculs algébriques conduisent à

$$\begin{aligned} \forall k, \Gamma(k, k) &= \frac{\sigma_k^4}{\sigma^4} \sum_{i=1}^p [\mathbb{E}(W_i^4) - 3\sigma_i^4] + 4 \frac{\sigma^2 - \sigma_k^2}{\sigma^2} \mathbb{E}(W_k^4) + 4\sigma^2 \sigma_k^2 + 12 \frac{\sigma_k^6}{\sigma^2} - 14\sigma_k^4, \\ \forall k \neq l, \Gamma(k, l) &= -\frac{2}{\sigma^2} [\mathbb{E}(W_k^4) \sigma_l^2 + \mathbb{E}(W_l^4) \sigma_k^2] + 2\sigma_k^2 \sigma_l^2 \left[3 \frac{\sigma_k^2 + \sigma_l^2}{\sigma^2} - 1 \right], \\ &\quad + \frac{\sigma_k^2 \sigma_l^2}{\sigma^4} \sum_{i=1}^p [\mathbb{E}(W_i^4) - 3\sigma_i^4]; \end{aligned}$$

et à

$$\begin{aligned}
\forall k, \Gamma_{SPF}(k, k) &= \left(1 - \frac{4}{p+1} \left(\frac{\sigma_k^2}{\sigma^2}\right)\right) \mathbb{E}(W_k^4) + \frac{\sigma_k^4}{\sigma^4} \left(\frac{p^2 - 2p + 5}{(p+1)^2}\right) \sum_{i=1}^p \mathbb{E}(W_i^4) \\
&+ \left(\frac{\sigma_k^2}{(p+1)\sigma^2}\right) \left(4 + \frac{\sigma_k^2}{\sigma^2} \left(\frac{-2p^2 + 5p - 13}{p+1}\right)\right) \sum_{i=1}^p \sigma_i^4 \\
&+ \sigma^4 + \left(\frac{-p^2 - 7p + 6}{(p+1)^2}\right) \sigma_k^4 + \frac{4}{p+1} \frac{\sigma_k^6}{\sigma^2} - \frac{4}{p+1} \sigma_k^2 \sigma^2, \\
\forall k \neq l, \Gamma_{SPF}(k, l) &= -\frac{2}{p+1} \left(\frac{\sigma_k^2 \mathbb{E}(W_l^4) + \sigma_l^2 \mathbb{E}(W_k^4)}{\sigma^2}\right) + \left(\frac{\sigma_k^2 \sigma_l^2}{\sigma^4}\right) \left(\frac{p^2 - 2p + 5}{(p+1)^2}\right) \sum_{i=1}^p \mathbb{E}(W_i^4) \\
&+ \left(2(\sigma_k^2 + \sigma_l^2) + \frac{-2p^2 + 5p - 13}{(p+1)^2 \sigma^4}\right) \sum_{i=1}^p \sigma_i^4 + \sigma^4 \\
&+ \sigma_k^2 \sigma_l^2 \left(\frac{2p^2 - p + 9}{(p+1)^2}\right) - \frac{p+3}{p+1} \sigma^2 (\sigma_k^2 + \sigma_l^2) + \frac{2}{p+1} \frac{\sigma_k^2 \sigma_l^2}{\sigma^2} (\sigma_k^2 + \sigma_l^2).
\end{aligned}$$

Il est important de se rappeler que les estimateurs Pick-Freeze nécessitent $(p+1)n$ appels au code de calcul pour estimer p indices. Ainsi pour comparer honnêtement les deux méthodes, on doit se ramener au même nombre d'appels. On va donc étudier la matrice

$$D := (p+1)\Gamma_{SPF} - \Gamma.$$

Pour comparer les deux méthodes, nous allons étudier les valeurs propres de la matrice D , afin de voir si elle est définie positive ou pas.

Exemples de calculs explicites

Premier exemple : On suppose que $\mu = 0$ et que pour $i = 1, \dots, p$ avec $p \geq 2$

$$\langle X^i, \beta^i \rangle \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

On a pour tout $1 \leq i \leq p$ et tout $1 \leq i \neq j \leq p$

$$\begin{aligned}
D_{i,i} &= \frac{p^5 + 2p^4 - 5p^3 - 2p^2 + 6p - 6}{p(p+1)} > 0, \\
D_{i,j} &= \frac{p^5 + 4p^4 + 3p^3 + 2p - 6}{p(p+1)}.
\end{aligned}$$

Soit $\alpha = p^5 + 2p^4 - 5p^3 - 2p^2 + 6p - 6$, $\beta = p^5 + 4p^4 + 3p^3 + 2p - 6$. Les valeurs propres de D sont $[\alpha - \beta]/[p(p+1)]$ d'ordre $p-1$ et $[\alpha + (p-1)\beta]/[p(p+1)]$ d'ordre 1. Mais

$$\alpha - \beta = 2p(-p^3 - 4p^2 - p + 2) < 0 \quad \forall p \geq 2,$$

et

$$\alpha - \beta + p\beta = p(p^5 + 4p^4 + p^3 - 8p^2 - 2) > 0 \quad \forall p \geq 2.$$

Pour $p \geq 2$, la matrice D n'est ni positive ni négative. Cependant, si l'on ne s'intéresse qu'aux variances coordonnées par coordonnées (on regarde alors le signe des éléments diagonaux de la matrice D), on voit que la variance asymptotique de chaque estimateur des indices de Sobol par la méthode Pick-freeze et plus

grande que celle obtenue par la méthode de Karhunen-Loève.

Deuxième exemple : Prenons $p = 2$, $\mu = 0$ et $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = 1$, le modèle devient

$$Y = \langle X^1, \beta^1 \rangle + \langle X^2, \beta^2 \rangle .$$

Alors si $W_1 = \langle X^1, \beta^1 \rangle$ et si $W_2 = \langle X^2, \beta^2 \rangle$,

$$\begin{aligned} D_{1,1} &= \mathbb{E}(W_1^4) \left(-1 + \frac{2}{3}\sigma_1^4 \right) + \frac{2}{3}\sigma_1^4 \mathbb{E}(W_2^4) + 3 - 8\sigma_1^6 + 10\sigma_1^4 - 8\sigma_1^2 + \sigma_1^2(\sigma_1^4 + \sigma_2^4) \left(4 - \frac{2}{3}\sigma_1^2 \right) \\ D_{2,2} &= \mathbb{E}(W_2^4) \left(-1 + \frac{2}{3}\sigma_2^4 \right) + \frac{2}{3}\sigma_2^4 \mathbb{E}(W_1^4) + 3 - 8\sigma_2^6 + 10\sigma_2^4 - 8\sigma_2^2 + \sigma_2^2(\sigma_1^4 + \sigma_2^4) \left(4 - \frac{2}{3}\sigma_2^2 \right) \\ D_{2,1} &= \sigma_1^2 \sigma_2^2 \left(\frac{2}{3}(\mathbb{E}(W_1^4) + \mathbb{E}(W_2^4)) + 3 \right) + (\sigma_1^4 + \sigma_2^4) \left(\frac{7}{3} + 3\sigma_1^2 \sigma_2^2 \right) - 2. \end{aligned}$$

Dans le cas particulier où $W_1 \sim \mathcal{N}(0, x)$ et $W_2 \sim \mathcal{N}(0, 1-x)$, pour un $x \in]0, 1[$, nous obtenons

$$\begin{aligned} D_{1,1}(x) &= 3 - 4x + \frac{1}{3}(x^2 - 8x^3 + 8x^4), \\ D_{2,2}(x) &= 3 - 4(1-x) + \frac{1}{3}((1-x)^2 - 8(1-x)^3 + 8(1-x)^4), \\ D_{1,2}(x) &= \frac{1}{3} + \frac{10}{3}x - \frac{40}{3}x^2 + 20x^3 - 10x^4. \end{aligned}$$

Soit $\lambda_1(x)$ et $\lambda_2(x)$ les deux valeurs propres de $D(x)$ et x_1 et $1-x_1$ les zéros réels de son déterminant ($x_1 \approx 0.6701$). On a alors

x	0	1 - x_1	x_1	1
$\lambda_1(x) + \lambda_2(x)$	+		+	+
$\lambda_1(x)\lambda_2(x)$	-	0	+	0 -

Si $x \in]1-x_1, x_1[$, la matrice $D(x)$ est définie positive.

Soit x_0 la racine de $D_{1,1}(x)$ ($x_0 \approx 0.6738$). Alors les signes des termes diagonaux sont :

x	0	1 - x_0	x_0	1
$D_{1,1}(x)$	+		+	0 -
$D_{2,2}(x)$	-	0	+	+

Ainsi si $x \in]1-x_0, x_0[$, la méthode Karhunen-Loève donne une meilleure variance asymptotique pour chaque estimateur (ce n'est pas le cas pour les autres valeurs de x).

6.7 Une première généralisation des indices de Sobol

6.7.1 Introduction

Les indices de Sobol présentés dans les sections précédentes sont basés sur une décomposition de la variance. Ils sont donc *a priori* efficaces que pour quantifier l'importance des variables d'entrée par rapport au comportement moyen du modèle. Afin de motiver la nécessité d'avoir d'autres indices, considérons le modèle suivant. Soient X_1 et X_2 deux variables aléatoires indépendantes ayant les mêmes moments d'ordre 1 et d'ordre 2 mais tels que $\mathbb{E}[X_1^3] \neq \mathbb{E}[X_2^3]$. Supposons que

$$Y = X_1 + X_2 + X_1^2 X_2^2.$$

Alors

$$\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_1]) = \text{Var}(X_1 + X_1^2) = \text{Var}(X_2 + X_2^2) = \text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_2]).$$

Cependant, comme Y est une fonction symétrique en X_1, X_2 et comme X_1 et X_2 n'ont pas la même distribution. Les deux variables X_1 et X_2 ne devraient pas avoir la même importance. Il est donc important d'avoir des indices de sensibilités qui prennent en compte non seulement les moments d'ordre 2 mais aussi toute la distribution.

Il est tout aussi naturel de penser que ce n'est pas forcément les mêmes variables d'entrées qui influent par exemple sur le comportement moyen de la fonction ou sur le comportement d'un quantile extrême. Ainsi, l'indice doit être construit en fonction de la quantité que l'on souhaite étudier.

Il y a plusieurs façons de généraliser les indices de Sobol, on peut par exemple définir de nouveaux indices à l'aide de fonctions de contraste basées sur la quantité d'intérêt (cette approche sera étudiée dans la Section 6.8 qui résume les résultats de [102]). Dans [247], l'auteur présente une manière de définir des indices à l'aide de distances de dissimilarités. Ces mesures unifient dans un même cadre, des indices de sensibilités déjà existant. Malheureusement leurs estimations sont basées sur l'estimation d'un rapport de densité qui est une opération coûteuse. Il existe de situations où des méthodes d'ordres plus élevés permettent d'obtenir une analyse plus précise de l'influence des variables d'entrées. Borgonovo et ses coauteurs [43, 44, 45] introduisent et étudient des indices basés sur la distance en variation totale. Alors que Owen et al. [188, 189] suggèrent d'utiliser des procédures basées sur des moments d'ordre plus élevés. Nous allons dans cette section suivre ces deux pistes. Dans un premier temps, nous revisitons les travaux d'Owen. En particulier, nous étudions les propriétés asymptotiques des estimateurs Pick-Freeze généralisés qui y sont introduits. Puis nous proposons un indice naturel basé sur la distance de Cramér-von Mises entre la distribution de la sortie Y et la distribution de la loi conditionnelle de Y lorsque certaines entrées sont fixées. Nous verrons que chose surprenante ces indices peuvent une fois encore s'estimer par la méthode Pick-Freeze. De plus, la taille de l'échantillon requise pour l'estimation est du même ordre de grandeur que pour l'estimation des indices de Sobol.

6.7.2 Méthode Pick-Freeze d'ordre p

En utilisant, la décomposition classique de Hoeffding pour un singleton $v \in I_d := \{1, \dots, d\}$, le numérateur de l'indice de Sobol par rapport à l'entrée numéro v est donné par

$$H_v^2 = \mathbb{E} \left[(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^2 \right]. \quad (6.45)$$

Suivant les idées présentes dans [188, 189], on généralise cette quantité en considérant des moments d'ordre supérieurs. Pour tout entier $p \geq 2$, on pose

$$H_v^p := \mathbb{E} [(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^p]. \quad (6.46)$$

H_v^p est invariant par translation de la sortie. Soit X^v le vecteur aléatoire tel que $X_v^v = X_v$ et $X_i^v = X_i'$ si $i \neq v$ où X_i' est une copie indépendante X_i . On pose alors

$$Y^v := f(X^v). \quad (6.47)$$

Le lemme qui suit donne la représentation Pick-Freeze de H_v^p pour $p \geq 2$.

Lemme 6.7.1. *Pour tout $v \in I_d$, on a*

$$\mathbb{E} [(\mathbb{E}[Y|X_v] - \mathbb{E}[Y])^p] = \mathbb{E} \left[\prod_{i=1}^p (Y^{v,i} - \mathbb{E}[Y]) \right]. \quad (6.48)$$

Ici, $Y^{v,1} = Y$ et pour $i = 2, \dots, p$, $Y^{v,i}$ est construit indépendamment comme Y^v défini par l'équation (6.47).

Estimation On commence par développer le produit apparaissant dans (6.48). On obtient ¹

$$H_v^p = \sum_{l=0}^p \binom{p}{l} (-1)^{p-l} \mathbb{E}[Y]^{p-l} \mathbb{E} \left[\prod_{i=1}^l Y^{v,i} \right].$$

Ensuite, on utilise un schéma d'estimation de Monte-Carlo Pick-Freeze en considérant l'échantillon de taille $p \times N$ suivant

$$\left(Y_j^{v,i} \right)_{(i,j) \in I_p \times I_N}.$$

On définit alors pour tout $N \in \mathbb{N}^*$, $j \in I_N$ et $l \in I_p$,

$$P_{l,j}^v = \binom{p}{l}^{-1} \sum_{k_1 < \dots < k_l \in I_p} \left(\prod_{i=1}^l Y_j^{v,k_i} \right) \quad \text{et} \quad \bar{P}_l^v = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N P_{l,j}^v.$$

L'estimateur est alors

$$H_{p,N}^v = \sum_{l=0}^p \binom{p}{l} (-1)^{p-l} \left(\bar{P}_1^v \right)^{p-l} \bar{P}_l^v. \quad (6.49)$$

Les propriétés asymptotiques de cet estimateur sont résumées dans le théorème qui suit.

Théorème 6.7.1. [Gamboa, Klein, Lagnoux [110]] $H_{p,N}^v$ est fortement consistant et asymptotiquement normal :

$$\sqrt{N} (H_{p,N}^v - H_p^v) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (6.50)$$

où

$$\sigma^2 = p [\text{Var}(Y) + (p-1)\text{Cov}(Y, Y^{v,2})] \left(\sum_{l=1}^p a_l b_l \right)^2, \quad a_l = \frac{l}{p} \mathbb{E}[Y]^{l-1}, \quad l = 1, \dots, p$$

$$b_l = (-1)^{p-1} p(p-1) \mathbb{E}[Y]^{p-1} + \sum_{l=2}^{p-1} \binom{p}{l} (-1)^{p-l} (p-l) \mathbb{E}[Y]^{p-l-1} \mathbb{E} \left[\prod_{i=1}^l Y^{v,i} \right]$$

et $b_l = \binom{p}{l} (-1)^{p-l} \mathbb{E}[Y]^{p-l}$, $l = 2, \dots, p$.

La collection de tous les indices H_v^p fournit beaucoup plus d'information que l'indice de Sobol classique. Néanmoins, elle présente plusieurs désavantages. D'une part les indices peuvent être négatif si p est impair. On pourrait contrer ce point en considérant $\mathbb{E}[|\mathbb{E}[Y|X_i, i \in v] - \mathbb{E}[Y]|^p]$, mais dans ce cas, on ne pourrait plus appliquer la méthode Pick-Freeze pour les estimer. D'autre part, la procédure d'estimation requière $K \times N$ appels au code si l'on veut estimer les K premiers indices.

6.7.3 Indices basés sur la distance de Cramér-von Mises

Dans cette section nous notons $Z = f(X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^k$ la sortie du code numérique. Soit F la fonction de répartition de Z définie pour tout $t = (t_1, \dots, t_k) \in \mathbb{R}^k$ par

$$F(t) = \mathbb{P}(Z \leq t) = \mathbb{E} [\mathbb{1}_{\{Z \leq t\}}]$$

et $F^v(t)$ la fonction de répartition de la loi conditionnelle de Z sachant X_v

$$F^v(t) = \mathbb{P}(Z \leq t | X_v) = \mathbb{E} [\mathbb{1}_{\{Z \leq t\}} | X_v].$$

1. Convention utilisée $\prod_{i=1}^0 Y^{v,i} = 1$.

La notation $\{Z \leq t\}$ signifie que $\{Z_1 \leq t_1, \dots, Z_k \leq t_k\}$. On a évidemment $\mathbb{E}[F^v(t)] = F(t)$. Nous appliquons la méthode développée dans la section précédente (Section 6.7.2) avec $Y(t) = \mathbb{1}_{\{Z \leq t\}}$ et $p = 2$. Ainsi, pour un $t \in \mathbb{R}^k$ fixé, nous possédons une procédure d'estimation consistante et asymptotiquement normale pour estimer

$$\mathbb{E} \left[(F(t) - F^v(t))^2 \right].$$

Nous définissons maintenant une distance du type Cramér-von Mises d'ordre 2 entre $\mathcal{L}(Z)$ et $\mathcal{L}(Z|X_v)$ par

$$D_{2,CVM}^v := \int_{\mathbb{R}^k} \mathbb{E} \left[(F(t) - F^v(t))^2 \right] dF(t). \quad (6.51)$$

L'objectif est maintenant d'estimer $D_{2,CVM}^v$ et d'étudier ensuite les propriétés asymptotiques de l'estimateur. Notons que

$$D_{2,CVM}^v = \mathbb{E} \left[\mathbb{E} \left[(F(Z) - F^v(Z))^2 \right] \right]. \quad (6.52)$$

Remarque 6.7.1. Contrairement aux indices de Sobol classiques, nous n'avons pas renormalisé la généralisation. En effet le terme de renormalisation serait $F(t)(1 - F(t))$, terme qui tend vers 0 pour les petites et les grandes valeurs de t . Cela rendrait la procédure d'estimation numériquement instable.

Proposition 6.7.1. *Les propriétés suivantes sont satisfaites*

1. $0 \leq D_{2,CVM}^v \leq \frac{1}{4}$. De plus, si $k = 1$ et si F est continue, on a $0 \leq D_{2,CVM}^v \leq \frac{1}{6}$.
2. $D_{2,CVM}^v$ est invariant par translations et homothéties de Y .

On estime alors notre indice $D_{2,CVM}^v$ par une double procédure de Monte-Carlo, en procédant comme suit
On se donne

1. Deux N -échantillons de Z : $(Z_j^{v,1}, Z_j^{v,2})$, $1 \leq j \leq N$;
2. Un troisième N -échantillon Z indépendant de $(Z_j^{v,1}, Z_j^{v,2})_{1 \leq j \leq N}$: W_k , $1 \leq k \leq N$.

L'estimateur empirique $D_{2,CVM}^v$ est donné par

$$\widehat{D}_{2,CVM}^v = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,1} \leq W_k\}} \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,2} \leq W_k\}} - \left[\frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N \left(\mathbb{1}_{\{Z_j^{v,1} \leq W_k\}} + \mathbb{1}_{\{Z_j^{v,2} \leq W_k\}} \right) \right]^2 \right\}.$$

On peut alors montrer que

Corollaire 6.7.1. $\widehat{D}_{2,CVM}^v$ est fortement consistant lorsque N tend vers l'infini.

La normalité asymptotique découle de la Delta méthode fonctionnelle. Afin de montrer le théorème de normalité, on commence à établir un théorème de type Donsker pour les mesures empiriques sous-jacentes. Puis on applique la méthode Delta fonctionnelle (pour plus de détails sur la Delta méthode fonctionnelle, nous renvoyons à l'ouvrage de Van der Vaart [244], plus particulièrement Theorems 20.8 et 20.9, Lemma 20.10 et Example 20.11).

Théorème 6.7.2. [Gamboia, Klein, Lagnoux [110]] *La suite d'estimateurs $\widehat{D}_{2,CVM}^v$ est asymptotiquement gaussienne. Plus précisément $\sqrt{N} \left(\widehat{D}_{2,CVM}^v - D_{2,CVM}^v \right)$ converge faiblement vers une mesure gaussienne centrée de variance ξ^2 . La variance ξ^2 se calcule explicitement (voir la preuve du Theorem 3.5 de [110]).*

6.7.4 Quelques illustrations numériques

Nous allons dans un premier temps illustrer l'intérêt de l'indice basé sur la distance de Cramér-von Mises. Le premier exemple montre bien qu'il permet de détecter des variables importantes alors que les indices de Sobol ne le pouvaient pas. Le deuxième exemple montre que les estimateurs sont numériquement de bonnes qualités. Dans un second temps, nous reprenons un exemple venant du monde médical. Il s'agit d'étudier la façon de traiter les patients atteints d'arthrite à cellules géantes [55].

Illustration de la méthode sur un exemple jouet

On considère le modèle de régression linéaire

$$Y = \alpha X_1 + X_2, \quad \alpha > 0,$$

où X_1 est une variable aléatoire de loi de Bernoulli de paramètre p et X_2 est une variable aléatoire indépendante de X_1 . On suppose de plus X_2 est une variable aléatoire de fonction de répartition F continue sur \mathbb{R} et de variance finie σ^2 . De plus on impose que $\sigma^2 = \alpha^2 p(1-p)$ et on pose $\mu = \mathbb{E}[X_2]$. Ces choix impliquent que X_1 et X_2 ont la même variance et les mêmes indices de Sobol d'ordre un. D'une part la loi conditionnelle de Y sachant $\{X_1 = 0\}$ est la même que celle de X_2 et la loi conditionnelle de Y sachant $\{X_1 = 1\}$ a pour fonction de répartition $F(\cdot - \alpha)$. D'autre part la loi conditionnelle de Y sachant X_2 est donnée par

$$\mathbb{P}(Y = \alpha + X_2 | X_2) = 1 - \mathbb{P}(Y = X_2 | X_2) = p.$$

La densité de Y est donc le mélange $pF(\cdot - \alpha) + (1-p)F(\cdot)$. Après quelques calculs désagréables on obtient

$$D_{2,CVM}^1 = p(1-p) \int_{\mathbb{R}} (F(t) - F(t - \alpha))^2 [(1-p)dF(t) + pdF(t - \alpha)] \quad (6.53)$$

et

$$D_{2,CVM}^2 = \frac{1}{6} - p(1-p) \left[\frac{1}{2} - \int_{\mathbb{R}} F(t - \alpha) dF(t) \right]. \quad (6.54)$$

Faisons maintenant tendre p vers 0 (et α vers ∞) alors $D_{2,CVM}^1$ tend vers 0 et $D_{2,CVM}^2$ tend vers $1/6$ tandis que les indices de Sobol restent constamment égaux à $1/2$. Ainsi ces nouveaux indices permettent de retrouver ce que nous disait notre intuition i.e. que pour de petites valeurs de p , X_2 est plus influent que X_1 . Alors que les indices de Sobol ne le pouvaient pas.

Cas d'un modèle non linéaire

On considère le modèle suivant

$$Y = \exp\{X_1 + 2X_2\},$$

où X_1 et X_2 sont deux gaussiennes centrées réduites indépendantes. Il est possible de calculer explicitement les valeurs théoriques des indices basées sur la distance de Cramér-von Mises (le détail d'une preuve élémentaire se trouve dans l'article [110]). Le tableau suivant présente les valeurs théoriques des indices basées sur la distance de Cramér-von Mises et ceux de Sobol ainsi que les valeurs obtenues par simulations pour des tailles d'échantillons $N = 10^2$ et $N = 10^3$.

	Cramér-von Mises		Indices de Sobol	
	$D_{2,CVM}^1$	$D_{2,CVM}^2$	S^1	S^2
vraies valeurs	0.0191	0.0949	0.0118	0.3738
$N = 10^2$	0.0372	0.0960	0.1962	0.1553
$N = 10^3$	0.0192	0.0929	0.0952	0.1085

On voit ici que pour une taille d'échantillon $N = 10^3$, la méthode fournit une estimation de bonne qualité. Les deux concurrents classent les entrées dans le même ordre.

Application : le problème de l'arthrite à cellules géantes

Nous reprenons ici le problème plus réaliste du traitement de l'arthrite à cellules géantes proposé par Bunchbinder et Detsky [55]. Ce modèle a été revisité par Felli et Hazen [96] et Borgonovo et al. [46]. Comme expliqué dans [55], l'arthrite à cellules géante (GCA) est une pathologie qui peut entraîner de graves complications (perte de la vue, fièvres, maux de têtes). Les patients dont on suspecte la maladie peuvent recevoir un traitement à base de Prednisone. Malheureusement, les effets secondaires du traitement dus à de fortes doses ne sont pas anodins. Ainsi le médecin a le choix entre quatre stratégies face à un patient potentiellement atteint de cette pathologie (stratégies introduites dans [55]).

A : Ne traiter aucun patient ;

B : Faire une biopsie et traiter les patients positifs ;

C : Faire une biopsie et traiter tous les patients ;

D : Traiter tous les patients.

Chaque stratégie comporte des risques pour le patient. Ces risques sont quantifiés à l'aide d'une fonction dite d'utilité. Nous renvoyons le lecteur à [250] pour plus de détails sur les fonctions d'utilités. Ces utilités dépendent de 7 variables d'entrées. Dans [110] nous avons quantifié l'importance des variables d'entrées à l'aide de l'indice basé sur la distance de Cramér-von Mises puis comparer nos résultats avec ceux obtenus dans [46].

6.8 Une méthode générale pour construire des indices bien adaptés

6.8.1 Généralisation des indices de Sobol

Nous avons étudié dans les paragraphes précédents les propriétés des estimateurs des indices de Sobol. Nous avons aussi proposé des généralisations de ces indices, d'une part pour des sorties vectorielles et d'autre part en construisant des indices prenant en compte l'ensemble de la distribution de la sortie Y et non plus seulement sa variance.

Comme, nous l'avons déjà mentionné dans la section précédente, les indices de Sobol ne permettent pas de détecter systématiquement les variables importantes. De plus, il est assez intuitif qu'une variable importante pour le comportement moyen de Y ne l'est pas forcément pour ses comportements extrêmes. Il semble donc naturel d'essayer d'introduire des indices de sensibilités qui prennent en compte l'objectif de l'étude (comportement moyen, extrême...). Les indices de Sobol sont bien adaptés pour quantifier la sensibilité par rapport à un comportement moyen. Nous allons proposer une méthode générale permettant de construire un indice qui est bien adapté par rapport à une quantité statistique définie au préalable (quantile, médiane, fonction de répartition, densité...).

6.8.2 La remarque clé

Nous allons repartir des indices de Sobol que nous allons regarder sous un autre angle. Ceci va nous permettre de présenter une stratégie générale de construction d'indices bien adaptés à la quantité d'intérêt. Le cadre reste le même, on se donne un modèle $Y = h(X_1, \dots, X_d)$ et l'indice de Sobol par rapport à la variable numéro i est défini par

$$S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}[Y|X_i])}{\text{Var}(Y)}. \quad (6.55)$$

Que nous écrivons sous la forme

$$S_i = \frac{\text{Var}(Y) - \mathbb{E}(\text{Var}[Y|X_i])}{\text{Var}(Y)}. \quad (6.56)$$

La Formule (6.55) est la plus populaire, c'est celle utilisée par les personnes travaillant dans le domaine de l'analyse des incertitudes (voir par exemple [231, 220, 221, 223]). Nous allons plutôt tenter d'étendre intelligemment la Formule (6.56). Cela va permettre de définir des indices reliés à l'étude (ou à l'estimation)

de certaines quantités statistiques. Il est bien connu que la moyenne $\mathbb{E}(Y)$ est le minimiseur de la fonctionnelle quadratique $\theta \mapsto \mathbb{E}(Y - \theta)^2$ (nous appellerons par la suite cette fonction *une fonction de contraste*), de plus la valeur de ce minimum est la variance de Y . Conditionnons maintenant par rapport à la variable X_i alors $\mathbb{E}[Y|X_i]$ est le minimiseur de la fonction $\mathbb{E}[(Y - \theta)^2|X_i]$ et la valeur de ce minimum n'est autre que $\text{Var}[Y|X_i]$. Ainsi S_i compare la valeur optimale de la fonction $\mathbb{E}(Y - \theta)^2$ avec la valeur optimale moyenne de la fonction conditionnelle $\mathbb{E}[(Y - \theta)^2|X_i]$.

Cette remarque est le point de départ de la définition de nouveaux indices associés à un contraste donné.

6.8.3 La notion de fonction de contraste

Définition 6.8.1. Soit Θ un ensemble et Q une mesure de probabilité sur un espace \mathcal{Y} . Une (Θ, Q) -**fonction de contraste** ou plus simplement une **fonction de contraste** est définie comme une application ψ

$$\begin{aligned} \psi : \Theta &\longrightarrow L_1(Q) \\ \theta &\longmapsto \psi(\cdot, \theta) : y \in \mathcal{Y} \longmapsto \Psi(\rho, y), \end{aligned} \quad (6.57)$$

$$\text{telle que } \theta^* = \underset{\theta \in \Theta}{\text{Argmin}} \mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta) \quad (6.58)$$

est *unique*. La fonction $\Psi : \theta \mapsto \mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta)$ est la **fonction de contraste moyenne**, ou par abus de langage la fonction de contraste lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté.

Les fonctions de contraste sont des objets classiques en apprentissage statistique. Elles permettent de construire des estimateurs de $\theta^* \in \Theta$ en considérant $\hat{\theta} = \underset{\theta}{\text{Argmin}} \Psi_n(\theta)$ où $\Psi_n(\theta) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \psi(Y_i; \theta)$ est l'analogie empirique de $\mathbb{E}_{Y \sim Q} \psi(Y; \theta)$ lorsque l'on dispose d'un n échantillon (Y_1, \dots, Y_n) distribué comme Y .

Considérons, pour fixer les idées le contraste $\psi : (y; \theta) \mapsto (y - \theta)^2$, il conduit à la procédure classique d'estimation de la moyenne

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\text{Argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \theta)^2.$$

Ce qui donne

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i.$$

Dans notre contexte, nous n'allons pas utiliser la notion de contraste pour estimer une quantité dépendant de Y (ou de sa loi) mais plutôt pour définir de nouveaux indices.

6.8.4 Une liste non exhaustive de contrastes

Avant de rentrer dans le vif du sujet, nous commençons par donner un petit catalogue de contrastes et les quantités statistiques correspondantes.

1. Paramètres centraux : la moyenne est naturellement reliée au contraste $\Psi(\theta) = \mathbb{E}|Y - \theta|^2$, quant à la médiane, elle est reliée au contraste $\Psi(\theta) = \frac{1}{2} \mathbb{E}|Y - \theta|$.
2. Le contraste pour l'excès de probabilité est $\Psi(\theta) = \mathbb{E}|\mathbf{1}_{Y \geq t} - \theta|^2$, celui pour la queue de la distribution est $\Psi(\theta) = \int_{t_0}^{\infty} \mathbb{E}|\mathbf{1}_{Y \geq t} - \theta(t)|^2 dt$.
3. Le quantile d'ordre α : $\Psi(\theta) = \mathbb{E}(Y - \theta)(\alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta})$.
4. La queue quantile : $\Psi(\theta) = \int_{\alpha_0}^1 \mathbb{E}(Y - \theta(\alpha))(\alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta(\alpha)}) d\alpha$.

6.8.5 Sensitivité par rapport à un contraste

On s'intéresse à la sensibilité d'une sortie réelle Y à une entrée X_k . On se donne un contraste Ψ

$$\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$$

associé à un paramètre θ^* , où $\theta^* = \text{Argmin}\Psi(\theta)$.

Définition 6.8.2. Soit $\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$ un contraste. La variation du contraste due à X_k est définie par $V_k = \min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E}(\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta)|X_k))$. Si $\theta^* = \text{Argmin}_{\theta} \Psi(\theta)$ et $\theta_k(x) = \text{Argmin}_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta)|X_k = x)$ alors V_k devient

$$V_k = \mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k))). \quad (6.59)$$

V_k est évidemment positif car $\mathbb{E}(\min_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta)|X_k)) \leq \min_{\theta} \mathbb{E}(\mathbb{E}(\psi(Y; \theta)|X_k)) = \Psi(\theta)$. De plus si Y ne dépend pas de X_k alors $V_k = 0$ et à l'inverse si $Y = h(X_k)$ alors V_k est maximum. Dans toute la suite on fera l'hypothèse suivante, vérifiée par tous les exemples présentés dans la Section 6.8.3 (car $\min_{\theta} \psi(Y; \theta) = 0$).

Hypothèse 6.8.1. $\mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta) \in \mathbb{R}$.

On est maintenant en mesure de définir de nouveaux indices basés sur des contrastes vérifiant l'hypothèse 6.8.1 et généralisant les indices de Sobol.

Définition 6.8.3. ψ -Indices. Supposons que le contraste $\Psi(\theta) = \mathbb{E}\psi(Y; \theta)$ vérifie l'hypothèse 6.8.1. Le ψ -indice de la variable $Y = h(X_1, \dots, X_d)$ par rapport au contrast Ψ et à la variable X_k est défini par

$$S_{\psi}^k = \frac{V_k}{\min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta)} = \frac{\mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k)))}{\Psi(\theta^*) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta)}. \quad (6.60)$$

Quelques remarques sur cet indice

1. Si Y ne dépend de X_k , alors $S_{\psi}^k = 0$. De plus si les variables (X_1, \dots, X_d) sont indépendantes (hypothèse classiquement faite lorsque l'on considère les indices de Sobol via la décomposition de Hoeffding), et si $Y = h(X_k)$ alors $S_{\psi}^k = 1$ et les autres indices $S_{\psi}^l, l \neq k$ valent 0. Nous avons toujours $S_{\psi}^k \in [0, 1]$.
2. Comme déjà mentionné (on a tout fait pour), lorsque l'on considère le contraste de la moyenne $\psi : (y; \theta) \mapsto (y - \theta)^2$, on retrouve exactement les indices de Sobol. En effet dans ce cas on a

$$\theta^* = \text{Argmin}_{\theta} \Psi(\theta) = \text{Argmin}_{\theta} \mathbb{E}(Y - \theta)^2 = \mathbb{E}Y$$

et $\theta_k(x) = \text{Argmin}_{\theta} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta)|X_k = x) = \text{Argmin}_{\theta} \mathbb{E}(Y - \theta)^2|X_k = x) = \mathbb{E}(Y|X_k = x)$. Ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{(X_k, Y)} (\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k))) &= \mathbb{E}_{(X_k, Y)} ((Y - \mathbb{E}Y)^2 - (Y - \mathbb{E}(Y|X_k))^2) \\ &= \text{Var}(Y) - \mathbb{E}_{X_k} \mathbb{E} [(Y - \mathbb{E}(Y|X_k))^2|X_k] \\ &= \text{Var}(Y) - \mathbb{E}_{X_k} \text{Var}(Y|X_k) = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_k)) \end{aligned}$$

et $\min_{\theta} \Psi(\theta) - \mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta) = \Psi(\theta^*) - 0 = \text{Var}(Y)$. Le ψ -indice obtenu est $S_{\psi}^k = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_k))}{\text{Var}(Y)}$, qui est exactement l'indice de Sobol d'ordre un défini par l'Equation (6.55).

6.8.6 Exemples jouets

Nous allons donner deux exemples simples pour montrer d'une part que dans certains cas il est possible de calculer analytiquement ces nouveaux indices et d'autre part de quelles manières ils diffèrent par rapport aux indices de Sobol. Dans l'Exemple 1 (voir Figure 6.4) les indices de Sobol sont constamment égaux à 0.5, tandis que les nouveaux indices sont distincts et non constants. Les indices de Sobol donnent la même importance à chaque variable alors que l'importance de chaque variable varie lorsque α bouge pour les nouveaux indices.

Exemple 1

Soit $Y = X_1 + X_2$, où $X_1 \sim Exp(1)$, $X_2 \sim -X_1$, les deux variables étant indépendantes. La variable Y est une variable aléatoire de loi Laplace de paramètre 1 sa densité par rapport à la mesure de Lebesgue est $f(x) = \exp(-|x|)/2$. Nous allons calculer les nouveaux indices par rapport au α -quantile $q_Y(\alpha)$ de Y . On prend donc le contraste suivant $\Psi(\theta) = \mathbb{E}(Y - \theta)(\alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta})$, qui caractérise le α -quantile. On trouve après quelques calculs

$$S_{\psi}^1 = \begin{cases} \frac{(1-\alpha)(1-\log(2(1-\alpha))) + \alpha \log(\alpha)}{(1-\alpha)(1-\log(2(1-\alpha)))} & \text{si } \alpha \geq 1/2, \\ \frac{\alpha(1-\log(2\alpha)) + \alpha \log(\alpha)}{\alpha(1-\log(2\alpha))} & \text{si } \alpha < 1/2; \end{cases} \quad (6.61)$$

$$S_{\psi}^2 = \begin{cases} \frac{(1-\alpha)(1-\log(2(1-\alpha))) + (1-\alpha) \log(1-\alpha)}{(1-\alpha)(1-\log(2(1-\alpha)))} & \text{si } \alpha \geq 1/2, \\ \frac{\alpha(1-\log(2\alpha)) + (1-\alpha) \log(1-\alpha)}{\alpha(1-\log(2\alpha))} & \text{si } \alpha < 1/2. \end{cases} \quad (6.62)$$

Les graphes de ces deux indices en fonction de α ainsi que ceux des indices de Sobol sont donnés dans la Figure 6.4.

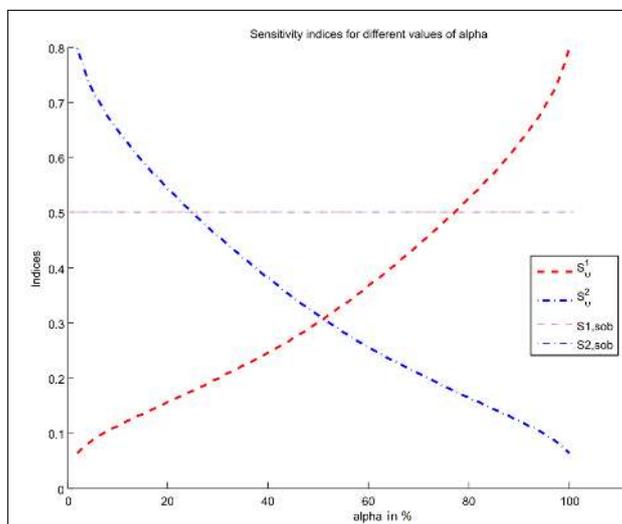


FIGURE 6.4 – Indices de sensibilités pour l'exemple 1.

Comme on s'y attendait $S_{\psi}^1 < S_{\psi}^2$ lorsque $\alpha < 1/2$ et $S_{\psi}^1 > S_{\psi}^2$ lorsque $\alpha > 1/2$ avec égalité lorsque $\alpha = 1/2$. De plus $\lim_{\alpha \rightarrow 1} S_{\psi}^1 = \lim_{\alpha \rightarrow 0} S_{\psi}^2 = 1$ et $\lim_{\alpha \rightarrow 0} S_{\psi}^1 = \lim_{\alpha \rightarrow 1} S_{\psi}^2 = 0$.

Dans cet exemple, les indices de Sobol sont $S_{Sob}^1 = S_{Sob}^2 = 1/2$. Ils ne dépendent pas de α , ils sont donc inutiles si on veut étudier les quantiles de Y

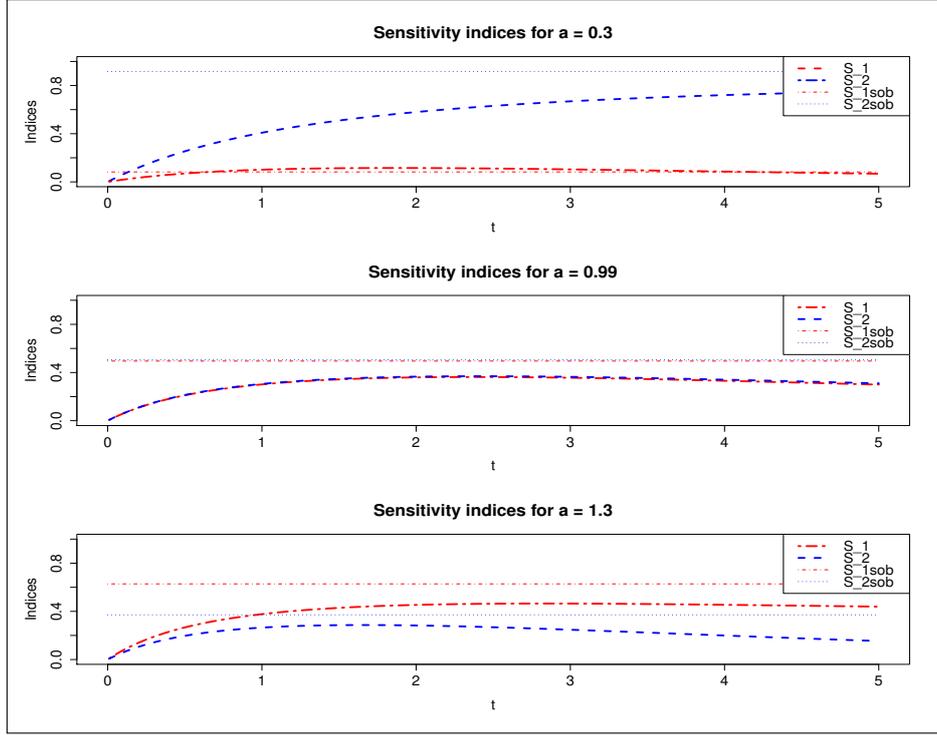
Exemple 2

Soit X_1 et X_2 deux variables indépendantes et $Y = X_1 + X_2$, avec $X_1 \sim Exp(1)$, $X_2 \sim Exp(a)$, $a > 0$. On s'intéresse ici à $\mathbb{P}(Y \geq t)$. Cette quantité peut être caractérisée à l'aide du contraste

$$\Psi(\theta) = \mathbb{E}|\mathbf{1}_{Y \geq t} - \theta|^2. \quad (6.63)$$

Il se trouve que ce contraste est un contraste quadratique, nous allons donc retrouver les indices de Sobol associés non pas à la variable Y mais à la variable $Z = \mathbf{1}_{Y \geq t}$.

Nous donnons dans la Figure 6.5, le graphe de ces indices pour trois valeurs de a . Les calculs explicites se trouvent dans l'article [102]. Ce graphique montre que l'importance relative (pour le nouveau contraste) des

FIGURE 6.5 – Indices de sensibilité pour l'Exemple 2, $t \in [0, 5]$, $a = 0.3$, $a = 0.99$ et $a = 1.3$.

variables évolue en fonction de t . Ce qui n'est pas le cas pour les indices de Sobol. Par contre si on considère la sortie $Z = \mathbf{1}_{Y \geq t}$, l'ordre d'importance des variables est la même pour les deux indices. Le lecteur intéressé par plus d'exemples pourra lire [102].

6.8.7 Estimation des indices.

En pratique le modèle h est inconnu ou trop compliqué, il est donc illusoire de penser pouvoir en général calculer explicitement les nouveaux indices. Nous allons donc proposer une méthode d'estimation et l'illustrer sur un exemple. On désire donc estimer nos (ψ) -indices, dont nous rappelons la définition

$$S_{\psi}^k = \frac{\Psi(\theta^*) - \mathbb{E}_{(X_k, Y)}(\psi(Y; \theta_k(X_k)))}{\Psi(\theta^*)} = \frac{\mathbb{E}_{(X_k, Y)}(\psi(Y; \theta^*) - \psi(Y; \theta_k(X_k)))}{\mathbb{E}_Y \psi(Y; \theta^*)} \quad (6.64)$$

où ψ est un contraste, $\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E} \psi(Y; \theta)$ et $\theta_k(x) = \underset{\theta}{\operatorname{Argmin}} \mathbb{E}(\psi(Y; \theta) | X_k = x)$. Rappelons que nous avons uniquement considéré des contrastes vérifiant $\mathbb{E} \min_{\theta} \psi(Y; \theta) = 0$. Notre procédure d'estimation des indices (6.64) nécessite deux étapes (rappelons que $Y = h(X_1, \dots, X_p)$).

- 1 On simule X_1^j, \dots, X_p^j et on calcule $Y^j = h(X_1^j, \dots, X_p^j)$, pour $j = 1, \dots, n_1$. On calcule ensuite $\hat{\theta}^*$ et on remplace dans l'équation (6.64) les espérances $\mathbb{E}_{(X_k, Y)}$ et \mathbb{E}_Y par leurs versions empiriques.
- 2 On simule indépendamment $X_1'^j, \dots, X_p'^j$ pour $j = 1, \dots, n_2$ et on calcule $Y'^j = h(X_1'^j, \dots, X_p'^j)$. Puis à partir de l'échantillon $Y_k'^j(x) = h(X_1'^j, \dots, X_{k-1}'^j, x, X_{k+1}'^j, \dots, X_p'^j)$, $j = 1, \dots, n_2$, on calcule la fonction $x \mapsto \hat{\theta}_k(x)$.

Finalement, on estime l'indice (6.64) par

$$\hat{S}_{\psi}^k = \frac{\frac{1}{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} (\psi(Y^j; \hat{\theta}^*) - \psi(Y^j; \hat{\theta}_k(X_k^j)))}{\frac{1}{n_1} \sum_{j=1}^{n_1} \psi(Y^j; \hat{\theta}^*)}, \quad (6.65)$$

Exemple 1 traité numériquement

Reprenons l'exemple 1 traité dans la Section 6.8.6

$$Y = X_1 + X_2, \quad X_1 \sim \text{Exp}(1), \quad X_2 \sim -X_1$$

avec X_1 et X_2 indépendantes. Les valeurs théoriques des indices basés sur le contraste associé au α -quantile sont données dans les équations (6.61) et (6.62). Nous avons parallèlement estimé ses indices à l'aide de la formule (6.65). La Figure 6.6 représente les indices estimés en fonction de α . La comparaison avec le graphique 6.4 montre que la méthode de simulation est plutôt pertinente.

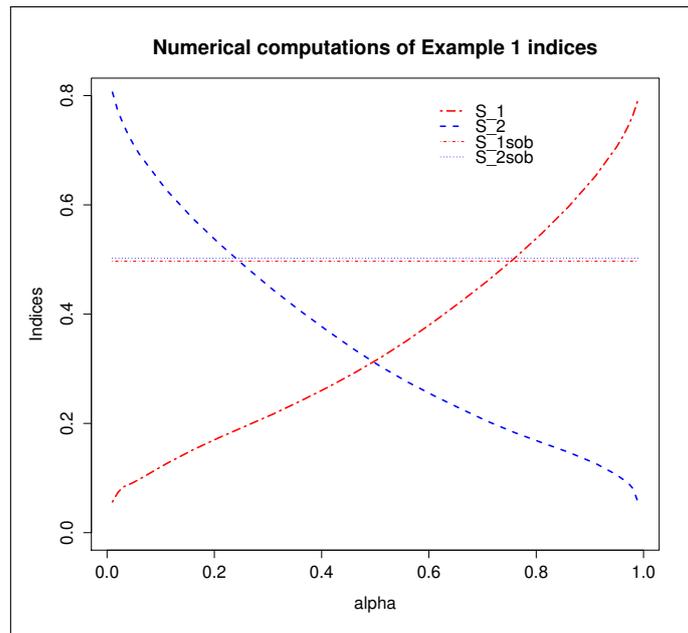


FIGURE 6.6 – Les indices estimés de l'exemple 1.

Bibliographie

- [1] B. Afsari. Riemannian l^p center of mass : existence, uniqueness, and convexity. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 139(2) :655–673, 2011.
- [2] M. Agueh and G. Carlier. Barycenters in the Wasserstein space. *SIAM J. Math. Anal.*, 43(2) :904–924, 2011.
- [3] A. Agulló-Antolín, J.A. Cuesta-Albertos, H. Lescornel, and J.M.Loubes. A parametric registration model for warped distributions with Wasserstein distance. *Journal of Multivariate Analysis*, 135 :117–130, 2015.
- [4] D. Aldous and P. Shields. A diffusion limit for a class of randomly-growing binary trees. *Probab. Theory Related Fields*, 79 :509–542, 1988.
- [5] S. Allasonnière, Y. Amit, and A. Trouvé. Towards a coherent statistical framework for dense deformable template estimation. *J. R. Stat. Soc. Ser. B Stat. Methodol.*, 69(1) :3–29, 2007.
- [6] S. Allasonnière, J. Bigot, J. Glaunès, F. Maire, and F. Richard. Statistical models for deformable templates in image and shape analysis. *Annales Mathématiques Blaise Pascal*, 20(1) :1–35, 2013.
- [7] P.C. Álvarez-Esteban, E. del Barrio, J.A. Cuesta-Albertos, and C. Matrán. Uniqueness and approximate computation of optimal incomplete transportation plans. *Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat.*, 47(2) :358–375, 2011.
- [8] L. Ambrosio, N. Gigli, and G. Savaré. Gradient flows with metric and differentiable structures, and applications to the wasserstein space. *Atti Accad. Naz. Lincei Cl. Sci. Fis. Mat. Natur. Rend. Lincei (9) Mat. Appl.*, 15(3-4) :327–343, 2004.
- [9] Y. Amit and D. Geman. Shape quantization and recognition with randomized trees. *Neural Computation*, 9 :1545–1588, 1997.
- [10] A. Antoniadis. Analysis of variance on function spaces. *Statistics : A Journal of Theoretical and Applied Statistics*, 15(1) :59–71, 1984.
- [11] A. Antoniadis and T. Sapatinas. Wavelet shrinkage for natural exponential families with quadratic variance functions. *Biometrika*, 88(3) :805–820, 2001.
- [12] M. Arnaudon., C. Dombry, A. Phan, and L. Yang. Stochastic algorithms for computing means of probability measures. *Stochastic Process. Appl.*, 122(4) :1437–1455, 2012.
- [13] R. B. Ash and G. F. Melvin. *Topics in stochastic processes*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1975. Probability and Mathematical Statistics, Vol. 27.
- [14] K. B. Athreya and S. Karlin. Embedding of urn schemes into continuous time Markov branching processes and related limit theorems. *Ann. Math. Statist.*, 39 :1801–1817, 1968.
- [15] K. B. Athreya and P. E. Ney. *Branching processes*. Springer-Verlag, New York, 1972.

- [16] H. Attouch. *Variational Convergence for Functions and Operators*. Applicable Mathematic series. Pitman, London, 1984.
- [17] J-Y. Audibert and A. B. Tsybakov. Fast learning rates for plug-in classifiers. *Ann. Statist.*, 35(2) :608–633, 2007.
- [18] M. Barczy and E. Iglói. Karhunen-Loève expansions of α -Wiener bridges. *Cent. Eur. J. Math.*, 9(1) :65–84, 2011.
- [19] M. S. Bartlett. The Characteristic Function of a Conditional Statistic. *J. London Math. Soc.*, S1-13(1) :62.
- [20] P.L. Bartlett and S. Mendelson. Empirical minimization. *Probability Theory and Related Fields*, 135(3) :311–334, 2006.
- [21] G. Beer. On convergence of closed sets in a metric space and distance functions. *Bulletin of the Australian Mathematical Society*, 31 :421–432, 6 1985.
- [22] J.D. Benamou, G. Carlier, M. Cuturi, L. Nenna, and G. Peyré. Iterative bregman projections for regularized transportation problems. Technical report, Preprint Arxiv :1412.5154, 2014.
- [23] J. Bertoin and A. Rouault. Discretization methods for homogeneous fragmentations. *J. London Math. Soc. (2)*, (1) :91–109, 2005.
- [24] P. Besbeas, I. Feis, and T. Sapatinas. A comparative simulation study of wavelet shrinkage estimators for poisson counts. *International Statistical Review / Revue Internationale de Statistique*, 72(2) :pp. 209–237, 2004.
- [25] R. Bhattacharya and V. Patrangenaru. Large sample theory of intrinsic and extrinsic sample means on manifolds. *Annals of Statistics*, 31(1) :1–29, 2003.
- [26] R. Bhattacharya and V. Patrangenaru. Large sample theory of intrinsic and extrinsic sample means on manifolds (i). *Annals of statistics*, 31(1) :1–29, 2003.
- [27] R. Bhattacharya and V. Patrangenaru. Large sample theory of intrinsic and extrinsic sample means on manifolds (ii). *Annals of statistics*, 33 :1225–1259, 2005.
- [28] G. Biau, L. Devroye, and G. Lugosi. Consistency of random forests and other averaging classifiers. *J. Mach. Learn. Res.*, 9 :2015–2033, 2008.
- [29] P. Bickel and Y. Ritov. Nonparametric estimators which can be “plugged-in”. *Ann. Statist.*, 31(4) :1033–1053, 2003.
- [30] J. D. Biggins. How fast does a general branching random walk spread? In *Classical and modern branching processes (Minneapolis, MN, 1994)*, volume 84 of *IMA Vol. Math. Appl.*, pages 19–39. Springer, New York, 1997.
- [31] J. D. Biggins and D. R. Grey. A note on the growth of random trees. *Statist. Probab. Lett.*, 32(4) :339–342, 1997.
- [32] J. Bigot and B. Charlier. On the consistency of frechet means in deformable models for curve and image analysis. *Electronic Journal of Statistics*, 5 :1054–1089, 2011.
- [33] J. Bigot and S. Gadat. A deconvolution approach to estimation of a common shape in a shifted curves model. *Annals of Statistics*, 38(4) :2422–2464, 2010.
- [34] J. Bigot, S. Gadat, T. Klein, and C. Marteau. Intensity estimation of non-homogeneous Poisson processes from shifted trajectories. *Electron. J. Stat.*, 7 :881–931, 2013.

- [35] J. Bigot, S. Gadat, and J.M. Loubes. Statistical M-estimation and consistency in large deformable models for image warping. *Journal of Mathematical Imaging and Vision*, 34(3) :270–290, 2009.
- [36] J. Bigot, R. Gouet, T. Klein, and A. Lopez. Geodesic PCA in the Wasserstein space by Convex PCA. *Annales de l'Institut Henri Poincaré B : Probability and Statistics*, To be published, 2015.
- [37] J. Bigot and T. Klein. Consistent estimation of a population barycenter in the Wasserstein space. *Preprint, ArXiv/1212.2562*, 2012.
- [38] J. Bigot, J.M. Loubes, and M. Vimond. Semiparametric estimation of shifts on compact Lie groups for image registration. *Probability Theory and Related Fields*, 152 :425–473, 2010.
- [39] G. Blanchard, O. Bousquet, and P. Massart. Statistical performance of support vector machines. *Ann. Statist.*, 36(2) :489–531, 2008.
- [40] E. Boissard, T. Le Gouic, and J.M. Loubes. Distribution's template estimate with Wasserstein metrics. *Bernoulli*, 21(2) :740–759, 2015.
- [41] N. Bonneel, J. Rabin, G. Peyré, and H. Pfister. Sliced and radon wasserstein barycenters of measures. Technical report, Preprint Hal-00881872, 2013.
- [42] D. Bontemps and S. Gadat. Bayesian methods for the shape invariant model. *Electron. J. Stat.*, 8(1) :1522–1568, 2014.
- [43] E. Borgonovo. A new uncertainty importance measure. *Reliability Engineering & System Safety*, 92(6) :771–784, 2007.
- [44] E. Borgonovo, W. Castaings, and S. Tarantola. Moment independent importance measures : New results and analytical test cases. *Risk Analysis*, 31(3) :404–428, 2011.
- [45] E. Borgonovo, W. Castaings, and S. Tarantola. Model emulation and moment-independent sensitivity analysis : An application to environmental modelling. *Environmental Modelling & Software*, 34 :105–115, 2012.
- [46] E. Borgonovo, G. Hazen., and E. Plischke. Probabilistic sensitivity measures : Foundations and estimation. *Submitted*, pages 1–24, 2014.
- [47] S. Boucheron, O. Bousquet, and G. Lugosi. Theory of classification : a survey of some recent advances. *ESAIM Probab. Stat.*, 9 :323–375, 2005.
- [48] S. Boucheron, G. Lugosi, and P. Massart. *Concentration Inequalities : A Nonasymptotic Theory of Independence*. Oxford University Press, New York, 2013.
- [49] N. Bousquet, T. Klein, and S. Moutoussamy. Approximation of limit state surfaces in monotonic monte carlo settings. 2015.
- [50] O. Bousquet. Concentration inequalities for sub-additive functions using the entropy method. In *Stochastic inequalities and applications*, volume 56 of *Progr. Probab.*, pages 213–247. Birkhäuser, Basel, 2003.
- [51] L. Breiman. Random forests. *Machine Learning*, 45 :5–32, 2001.
- [52] L. Breiman, J. H. Friedman, R. A. Olshen, and C. J. Stone. *Classification and regression trees*. Wadsworth Statistics/Probability Series. Wadsworth Advanced Books and Software, Belmont, CA, 1984.
- [53] J. Bretagnolle. Statistique de Kolmogorov-Smirnov pour un échantillon non équiréparti. In *Statistical and physical aspects of Gaussian processes (Saint-Flour, 1980)*, volume 307 of *Colloq. Internat. CNRS*, pages 39–44. CNRS, Paris, 1981.

- [54] J. C. Bronski. Small ball constants and tight eigenvalue asymptotics for fractional Brownian motions. *J. Theoret. Probab.*, 16(1) :87–100, 2003.
- [55] R. Buchbinder and A. S. Detsky. Management of suspected giant cell arteritis : A decision analysis. *J. Rheumatology*, 19(9) :1220–1228, 1992.
- [56] J. B. Buckheit, S. Chen, D. L. Donoho, and I. Johnstone. Wavelab reference manual. *Department of Statistics, Stanford University*, <http://www-stat.stanford.edu/software/wavelab>, 1995.
- [57] T. T. Cai and P. Hall. Prediction in functional linear regression. *Ann. Statist.*, 34(5) :2159–2179, 2006.
- [58] K. Campbell, M. D. McKay, and B. J. Williams. Sensitivity analysis when model outputs are functions. *Reliability Engineering & System Safety*, 91(10) :1468–1472, 2006.
- [59] J. M. Van Campenhout and T. M. Cover. Maximum entropy and conditional probability. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 27(4) :483–489, 1981.
- [60] T. Cannings. Nearest neighbour classification in the tails of a distribution. *Preprint*, 2013.
- [61] H. Cardot and J. Johannes. Thresholding projection estimators in functional linear models. *J. Multivariate Anal.*, 101(2) :395–408, 2010.
- [62] H. Cardot, A. Mas, and P. Sarda. CLT in functional linear regression models. *Probab. Theory Related Fields*, 138(3-4) :325–361, 2007.
- [63] H. Cardot and P. Sarda. Functional linear regression. In *The Oxford handbook of functional data analysis*, pages 21–46. Oxford Univ. Press, Oxford, 2011.
- [64] A. R. Casal. Set estimation under convexity type assumptions. *Annales de l'Institut Henri Poincaré (B) Probability and Statistics*, 43(6) :763 – 774, 2007.
- [65] L. Cavalier, G. Golubev, D. Picard, and A. Tsybakov. Oracle inequalities for inverse problems. *Annals of Statistics*, 30(3) :843–874, 2002. Dedicated to the memory of Lucien Le Cam.
- [66] L. Cavalier and J.-Y. Koo. Poisson intensity estimation for tomographic data using a wavelet shrinkage approach. *IEEE Transactions on Information Theory*, 48(10) :2794–2802, 2002.
- [67] F. Cérou and A. Guyader. Nearest neighbor classification in infinite dimension. *ESAIM Probab. Stat.*, 10 :340–355 (electronic), 2006.
- [68] P. Chassaing and G. Louchard. Phase transition for parking blocks, Brownian excursion and coalescence. *Random Structures Algorithms*, 21(1) :76–119, 2002.
- [69] B. Chauvin, M. Drmota, and J. Jabbour-Hattab. The profile of binary search trees. *Ann. Appl. Probab.*, 11 :1042–1062, 2001.
- [70] B. Chauvin, T. Klein, J-F. Marckert, and A. Rouault. Martingales and profile of binary search trees. *Electron. J. Probab.*, 10 :no. 12, 420–435, 2005.
- [71] C. Chesneau, J. Fadili, and J.-L. Starck. Stein block thresholding for wavelet-based image deconvolution. *Electron. J. Stat.*, 4 :415–435, 2010.
- [72] F. Comte and J. Johannes. Adaptive estimation in circular functional linear models. *Math. Methods Statist.*, 19(1) :42–63, 2010.
- [73] S. Corlay and G. Pagès. Functional quantization-based stratified sampling methods. *Monte Carlo Methods Appl.*, 21(1) :1–32, 2015.

- [74] T. Covert and P.E. Hart. Nearest neighbour pattern classification. *IEEE, Transactions on Information Theory*, 13 :21–27, 1967.
- [75] C. Crambes, A. Kneip, and P. Sarda. Smoothing splines estimators for functional linear regression. *Ann. Statist.*, 37(1) :35–72, 2009.
- [76] I. Csiszar. Sanov property, generalized i -projection and a conditional limit theorem. *The Annals of Probability*, 12(3) :768–793, 08 1984.
- [77] R. I. Cukier, H. B. Levine, and K .E Shuler. Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems. *Journal of computational physics*, 26(1) :1–42, 1978.
- [78] M. Cuturi and A. Doucet. Fast computation of wasserstein barycenters. In *In Tony Jebara and Eric P. Xing, editors, Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning (ICML-14)*, pages 685–693. JMLR Workshop and Conference Proceedings, 2014.
- [79] Johnson D., Mortazavi A., Myers R., and Wold B. Genome-wide mapping of in vivo protein-dna interactions. *Science*, 316 :1497–1502, 2007.
- [80] G. Dal Maso. *An Introduction to Γ -convergence*, volume 8 of *Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications*. Birkhäuser, Boston, MA, 1993.
- [81] J. Dauxois, A. Pousse, and Y. Romain. Asymptotic theory for the principal component analysis of a vector random function : some applications to statistical inference. *J. Multivariate Anal.*, 12(1) :136–154, 1982.
- [82] P. Delicado. Dimensionality reduction when data are density functions. *Comput. Statist. Data Anal.*, 55(1) :401–420, 2011.
- [83] A. Dembo and O. Zeitouni. *Large deviations techniques and applications*, volume 38 of *Applications of Mathematics (New York)*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1998.
- [84] L. Devroye. On the almost everywhere convergence of nonparametric regression function estimates. *Ann. Statist.*, 9(6) :1310–1319, 1981.
- [85] L. Devroye. Branching processes and their applications in the analysis of tree structures and tree algorithms. In M. Habib et al., editor, *Probabilistic Methods for Algorithmic Discrete Mathematics*. Springer, 1998.
- [86] L. Devroye, L. Györfi, A. Krzyżak, and G. Lugosi. On the strong universal consistency of nearest neighbor regression function estimates. *Ann. Statist.*, 22(3) :1371–1385, 1994.
- [87] L. Devroye, L. Györfi, and G. Lugosi. *A probabilistic theory of pattern recognition*, volume 31 of *Applications of Mathematics (New York)*. Springer-Verlag, New York, 1996.
- [88] L. P. Devroye and T. J. Wagner. The strong uniform consistency of nearest neighbor density estimates. *Ann. Statist.*, 5(3) :536–540, 1977.
- [89] D. L. Donoho. Nonlinear wavelet methods for recovery of signals, densities, and spectra from indirect and noisy data. In *Different perspectives on wavelets (San Antonio, TX, 1993)*, volume 47 of *Proc. Sympos. Appl. Math.*, pages 173–205. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1993.
- [90] M. Drmota. Stochastic analysis of tree-like data structures. *Proc. R. Soc. Lond.*, A460(27) :271–307, 2004.
- [91] F.-X. Dupé, J. M. Fadili, and J.-L. Starck. A proximal iteration for deconvolving Poisson noisy images using sparse representations. *IEEE Transactions on Image Processing*, 18(2) :310–321, 2009.

- [92] B. Efron and R. J. Tibshirani. *An introduction to the bootstrap*. Monographs on Statistics and Applied Probability. Chapman and Hall, New York, 1993. vol 57.
- [93] P. Embrechts and M. Hofert. A note on generalized inverses. *Mathematical Methods of Operations Research*, 77 :423–432, 2013.
- [94] M. Errami, F. Russo, and P. Vallois. Itô’s formula for $C^{1,\lambda}$ -functions of a càdlàg process and related calculus. *Probab. Theory Related Fields*, 122(2) :191–221, 2002.
- [95] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications. Vol. I*. Third edition. John Wiley & Sons Inc., New York, 1968.
- [96] J.C. Felli and G. Hazen. Javelin diagrams : A graphical tool for probabilistic sensitivity analysis. *Decision Analysis*, 1(2) :93–107, 2004.
- [97] E Fix and J.L. Hodges. Discriminatory analysis, nonparametric discrimination, consistency properties. *Randolph Field, Texas, Project 21-49-004, Report 4*, 1951.
- [98] P. Flajolet, P. Poblete, and A. Viola. On the analysis of linear probing hashing. *Algorithmica*, 22(4) :490–515, 1998. Average-case analysis of algorithms.
- [99] P. T. Fletcher, C. Lu, Stephen M. Pizer, and S. Joshi. Principal geodesic analysis for the study of nonlinear statistics of shape. *IEEE transactions on medical imaging*, 23(8) :995–1005, 2004.
- [100] J. Fontbona, H. Guérin, and S. Méléard. Measurability of optimal transportation and strong coupling of martingale measures. *Electron. Commun. Probab.*, 15 :124–133, 2010.
- [101] J-C. Fort, T. Klein, A. Lagnoux, and B. Laurent. Estimation of the Sobol indices in a linear functional multidimensional model. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 143(9) :1590–1605, September 2013.
- [102] J-C. Fort, T. Klein, and N. Rachdi. New sensitivity analysis subordinated to a contrast. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 0(ja) :0–0, 0.
- [103] M. Fréchet. Les éléments aléatoires de nature quelconque dans un espace distancié. *Ann. Inst. H.Poincaré, Sect. B, Prob. et Stat.*, 10 :235–310, 1948.
- [104] Y. Freund and R. E. Schapire. A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting. *J. Comput. System Sci.*, 55(1, part 2) :119–139, 1997. Second Annual European Conference on Computational Learning Theory (EuroCOLT '95) (Barcelona, 1995).
- [105] S. Gadat, T. Klein, and C. Marteau. Classification in general finite dimensional spaces with the k -nearest neighbor rule. *Annals of Statistics*, to appear, 2016.
- [106] S. Gallón, J.-M. Loubes, and E. Maza. Statistical properties of the quantile normalization method for density curve alignment. *Mathematical biosciences*, 242(2) :129–142, 2013.
- [107] F. Gamboa, A. Janon, T. Klein, and A. Lagnoux. Sensitivity indices for multivariate outputs. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 351(7-8) :307–310, 2013.
- [108] F. Gamboa, A. Janon, T. Klein, and A. Lagnoux. Sensitivity analysis for multidimensional and functional outputs. *Electronic Journal of Statistics*, 8 :575–603, 2014.
- [109] F. Gamboa, A. Janon, T. Klein, A. Lagnoux, and C. Prieur. Statistical inference for sobol pick-freeze monte carlo method. *Statistics*, 0(0) :1–22, 0.
- [110] F. Gamboa, T. Klein, and A. Lagnoux. Sensitivity analysis based on Cramér von Mises distance. *ArXiv e-prints*, June 2015.

- [111] F. Gamboa, T. Klein, and C. Prieur. Conditional large and moderate deviations for sums of discrete random variables. Combinatoric applications. *Bernoulli*, 18(4) :1341–1360, 2012.
- [112] F. Gamboa, J.M. Loubes, and E. Maza. Semi-parametric estimation of shifts. *Electron. J. Stat.*, 1 :616–640, 2007.
- [113] A. Goldenshluger and O. Lepski. On adaptive minimax density estimation on R^d . *Probab. Theory Related Fields*, 159(3-4) :479–543, 2014.
- [114] C. Goodall. Procrustes methods in the statistical analysis of shape. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B*, 53(2) :285–339, 1991.
- [115] T. Le Gouic and J.M. Loubes. Existence and consistency of Wasserstein barycenters. *Preprint, hal-01163262*, 2015.
- [116] U. Grenander. *General pattern theory - A mathematical study of regular structures*. Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [117] U. Grenander and M. Miller. *Pattern Theory : From Representation to Inference*. Oxford Univ. Press, Oxford, 2007.
- [118] L. Györfi. On the rate of convergence of nearest neighbor rules. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 24(4) :509–512, 1978.
- [119] L. Györfi. The rate of convergence of k_n -NN regression estimates and classification rules. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 27(3) :362–364, 1981.
- [120] L. Györfi, M. Kohler, A. Krzyżak, and H. Walk. *A distribution-free theory of nonparametric regression*. Springer Series in Statistics. Springer-Verlag, New York, 2002.
- [121] S. Haker, L. Zhu, A. Tannenbaum, and S. Angenent. Optimal mass transport for registration and warping. *International Journal on Computer Vision*, 60 :225–240, 2004.
- [122] P. Hall and J. L. Horowitz. Methodology and convergence rates for functional linear regression. *Ann. Statist.*, 35(1) :70–91, 2007.
- [123] P. Hall, B. U. Park, and R. J. Samworth. Choice of neighbor order in nearest-neighbor classification. *Ann. Statist.*, 36(5) :2135–2152, 2008.
- [124] W. Härdle, G. Kerkycharian, D. Picard, and A. Tsybakov. *Wavelets, approximation, and statistical applications*, volume 129 of *Lecture Notes in Statistics*. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [125] J.C. Helton, J.D. Johnson, C.J. Sallaberry, and C.B. Storlie. Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis. *Reliability Engineering & System Safety*, 91(10-11) :1175–1209, 2006.
- [126] C. Hipp. Asymptotic expansions for conditional distributions : the lattice case. *Probab. Math. Statist.*, 4(2) :207–219, 1984.
- [127] W. Hoeffding. A class of statistics with asymptotically normal distribution. *Ann. Math. Statistics*, 19 :293–325, 1948.
- [128] W. Hoeffding. Probability inequalities for sums of bounded random variables. *J. Amer. Statist. Assoc.*, 58 :13–30, 1963.
- [129] L. Holst. Two conditional limit theorems with applications. *Ann. Statist.*, 7(3) :551–557, 1979.
- [130] T. Homma and A. Saltelli. Importance measures in global sensitivity analysis of nonlinear models. *Reliability Engineering & System Safety*, 52(1) :1–17, 1996.

- [131] S. Huckemann, T. Hotz, and A. Munk. Intrinsic shape analysis : Geodesic PCA for Riemannian manifolds modulo isometric lie group actions. *Statistica Sinica*, 20 :1–100, 2010.
- [132] S. F. Huckemann. Intrinsic inference on the mean geodesic of planar shapes and tree discrimination by leaf growth. *Ann. Statist.*, 39(2) :1098–1124, 2011.
- [133] I.A. Ibragimov and R.Z. Has’ Minskii. *Statistical estimation–asymptotic theory*. Springer-Verlag, New York, 1981. Applications of Mathematics, Vol. 16.
- [134] J. Jabbour-Hattab. Martingales and large deviations for binary search trees. *Random Structure and Algorithms*, 19 :112–127, 2001.
- [135] J. Jacod and J. Mémin. Caractéristiques locales et conditions de continuité absolue pour les semi-martingales. *Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete*, 35(1) :1–37, 1976.
- [136] A. Janon, T. Klein, A. Lagnoux, M. Nodet, and C. Prieur. Asymptotic normality and efficiency of two sobol index estimators. *ESAIM : Probability and Statistics*, 18 :342–364, 1 2014.
- [137] S. Janson. Asymptotic distribution for the cost of linear probing hashing. *Random Struct. Appl.*, 19(3-4) :438–471, 2001.
- [138] S. Janson. Moment convergence in conditional limit theorems. *J. Appl. Probab.*, 38(2) :421–437, 2001.
- [139] S. Janson. Functional limit theorems for multitype branching processes and generalized Pólya urns. *Stochastic Process. Appl.*, 110(2) :177–245, 2004.
- [140] S. Janson. Individual displacements for linear probing hashing with different insertion policies. *ACM Trans. Algorithms*, 1(2) :177–213, 2005.
- [141] I. M. Johnstone, G. Kerkyacharian, D. Picard, and M. Raimondo. Wavelet deconvolution in a periodic setting. *Journal of the Royal Statistical Society (B)*, 66 :547–573, 2004.
- [142] K. Karhunen. Über lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung. *Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. I. Math.-Phys.*, 1947(37) :79, 1947.
- [143] D. G. Kendall. Shape manifolds, procrustean metrics, and complex projective spaces. *Bull. London Math Soc.*, 16 :81–121, 1984.
- [144] Y.H. Kim and B. Pass. Wasserstein barycenters over Riemannian manifolds. *Preprint, arXiv :1412.7726*, 2014.
- [145] J. F. C. Kingman. *Poisson Processes*, volume 3 of *Oxford Studies in Probability*. Oxford University Press, Oxford, 1993.
- [146] J.F.C. Kingman. The coalescent process. *Stochastic Process. Appl.*, 13 :235–248, 1982.
- [147] T. Klein. Une inégalité de concentration à gauche pour les processus empiriques. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(6) :501–504, 2002.
- [148] T. Klein. *Inégalités de concentration, martingales et arbres aléatoires*. PhD thesis, Université de Versailles-Saint-Quentin (France), 2003.
- [149] T. Klein, A. Lagnoux, and P. Petit. A conditional Berry-Esseen bound and a conditional large deviation result without Laplace transform. Application to hashing with linear probing. January 2015.
- [150] T. Klein, Y. Ma, and N. Privault. Convex concentration inequalities and forward-backward stochastic calculus. *Electron. J. Probab.*, 11 :no. 20, 486–512, 2006.

- [151] T. Klein and E. Rio. Concentration around the mean for maxima of empirical processes. *Ann. Probab.*, 33(3) :1060–1077, 2005.
- [152] A. Kneip and K. J. Utikal. Inference for density families using functional principal component analysis. *J. Amer. Statist. Assoc.*, 96(454) :519–542, 2001. With comments and a rejoinder by the authors.
- [153] D. Knuth. *The Art of Computer Programming*, vol. 2 : Seminumerical algorithms, 1998.
- [154] E. D. Kolaczyk. Wavelet shrinkage estimation of certain Poisson intensity signals using corrected thresholds. *Statist. Sinica*, 9(1) :119–135, 1999.
- [155] V. F. Kolchin. Random mappings. Transl. from the Russian. Translation Series in Mathematics and Engineering. New York : Optimization Software, Inc., Publications Division. Distr. by Springer-Verlag, New York and Berlin etc. XIV, 207 p. DM 194.00 (1986)., 1986.
- [156] V. Y. Korolev and I. G. Shevtsova. An upper bound for the absolute constant in the Berry-Esseen inequality. *Teor. Veroyatn. Primen.*, 54(4) :671–695, 2009.
- [157] P.L. Krapivsky and S.T. Majumdar. Travelling waves, front selection, and exact nontrivial exponents in random fragmentation problem. *Phys. Review Letters*, 85(26) :5492–5495, 2000.
- [158] È. M. Kudlaev. Conditional limit distributions of sums of random variables. *Teor. Veroyatnost. i Primenen.*, 29(4) :743–752, 1984.
- [159] A. E. Kyprianou. A note on branching Lévy processes. *Stochastic Process. Appl.*, 82(1) :1–14, 1999.
- [160] M. Lamboni, H. Monod, and D. Makowski. Multivariate sensitivity analysis to measure global contribution of input factors in dynamic models. *Reliability Engineering & System Safety*, 96(4) :450–459, 2011.
- [161] B. Laurent. Efficient estimation of integral functionals of a density. *Ann. Statist.*, 24(2) :659–681, 1996.
- [162] B. Laurent. Adaptive estimation of a quadratic functional of a density by model selection. *ESAIM Probab. Stat.*, 9 :1–18 (electronic), 2005.
- [163] G. Lecué. Simultaneous adaptation to the margin and to complexity in classification. *Ann. Statist.*, 35(4) :1698–1721, 2007.
- [164] M. Ledoux. On Talagrand’s deviation inequalities for product measures. *ESAIM Probab. Stat.*, 1 :63–87 (electronic), 1995/97.
- [165] M. Ledoux. *The concentration of measure phenomenon*, volume 89 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2001.
- [166] M. Ledoux and M. Talagrand. *Probability in Banach Spaces. Isoperimetry and Processes*. Springer, Berlin, 1991.
- [167] M. Ledoux and M. Talagrand. *Probability in Banach spaces*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2011. Isoperimetry and processes, Reprint of the 1991 edition.
- [168] W. V. Li and Q-M. Shao. Gaussian processes : inequalities, small ball probabilities and applications. In *Stochastic processes : theory and methods*, volume 19 of *Handbook of Statist.*, pages 533–597. North-Holland, Amsterdam, 2001.
- [169] H. Lian. Convergence of functional k -nearest neighbor regression estimate with functional responses. *Electron. J. Stat.*, 5 :31–40, 2011.
- [170] M. Loève. Fonctions aléatoires de second ordre. *Revue Sci.*, 84 :195–206, 1946.

- [171] M. Loève. *Probability theory. I. Fourth edition.* Springer-Verlag, New York, 1977. Graduate Texts in Mathematics, Vol. 45.
- [172] S. Loustau and C. Marteau. Minimax fast rates for discriminant analysis with errors in variables. *Bernoulli*, 21(1) :176–208, 2015.
- [173] H. Luschgy and G. Pagès. Functional quantization of Gaussian processes. *J. Funct. Anal.*, 196(2) :486–531, 2002.
- [174] H. Mahmoud. *Evolution of Random Search Trees.* John Wiley, New York, 1992.
- [175] J.-F. Marckert. Parking with density. *Random Structures Algorithms*, 18(4) :364–380, 2001.
- [176] P. Massart. About the constants in Talagrand’s concentration inequalities for empirical processes. *Ann. Probab.*, 28(2) :863–884, 2000.
- [177] C. Matias. Semiparametric deconvolution with unknown noise variance. *ESAIM Probability and Statistics*, 6 :271–292, 2002.
- [178] A.R. Meenakshi and C. Rajian. On a product of positive semidefinite matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 295(1 ?3) :3 – 6, 1999.
- [179] Y. Meyer. *Ondelettes et opérateurs, I.* Hermann, 1989.
- [180] T. Mikkelsen, K. Manching, D. Jaffe, B. Issac, E. Lieberman, G. Giannoukos, P. Alvarez, W. Brockman, T. Kim, R. Koche, W. Lee, E. Mendenhall, A. O’Donovan, A. Presser, C. Russ, X. Xie, A. Meissner, M. Wernig, R. Jaenisch, C. Nusbaum, E. Lander, and B. Bernstein. Genome-wide maps of chromatin state in pluripotent and lineage-committed cells. *Nature*, 448 :553–560, 2007.
- [181] T. Mikosch and A.V. Nagaev. Large deviations of heavy-tailed sums with applications in insurance. *Extremes*, 1(1) :81–110.
- [182] H. Monod, C. Naud, and D. Makowski. Uncertainty and sensitivity analysis for crop models. In D. Wallach, D. Makowski, and J. W. Jones, editors, *Working with Dynamic Crop Models : Evaluation, Analysis, Parameterization, and Applications*, chapter 4, pages 55–99. Elsevier, 2006.
- [183] M.Vimond. Efficient estimation for a subclass of shape invariant models. *Ann. Statist.*, 38(3) :1885–1912, 2010.
- [184] A. Nagaev. Integral limit theorems taking large deviations into account when cramér’s condition does not hold. i. *Theory of Probability and Its Applications*, 14(1) :51–64, 1969.
- [185] A. Nagaev. Integral limit theorems taking large deviations into account when cramér’s condition does not hold. ii. *Theory of Probability and Its Applications*, 14(2) :193–208, 1969.
- [186] N.Mammen and A. B. Tsybakov. Smooth discrimination analysis. *Ann. Statist.*, 27(6) :1808–1829, 1999.
- [187] J. E. Oakley and A. O’Hagan. Probabilistic sensitivity analysis of complex models : a Bayesian approach. *J. R. Stat. Soc. Ser. B Stat. Methodol.*, 66(3) :751–769, 2004.
- [188] A. Owen, J. Dick, and S. Chen. Higher order Sobol’ indices. *Inf. Inference*, 3(1) :59–81, 2014.
- [189] A. B. Owen. Variance components and generalized Sobol’ indices. *SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif.*, 1(1) :19–41, 2013.
- [190] B. Pass. Optimal transportation with infinitely many marginals. *J. Funct. Anal.*, 264(4) :947–963, 2013.

- [191] J. L. Pavlov. Limit theorems for the number of trees of a given size in a random forest. *Math. USSR, Sb.*, 32 :335–345, 1977.
- [192] Y. L. Pavlov. Random forest. Karelin Research Institut Centre, Russian Academy of Science, Petrozavodsk (in Russian), 1996.
- [193] M. Pensky and T. Sapatinas. Functional deconvolution in a periodic setting : uniform case. *Annals of Statistics*, 37(1) :73–104, 2009.
- [194] G. De Philippis and A. Figalli. The Monge-Ampère equation and its link to optimal transportation. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 51 :527–580, 2014.
- [195] I. Pinelis. Optimum bounds for the distributions of martingales in Banach spaces. *Ann. Probab.*, 22(4) :1679–1706, 1994.
- [196] I. Pinelis. Optimal tail comparison based on comparison of moments. In *High dimensional probability (Oberwolfach, 1996)*, volume 43 of *Progr. Probab.*, pages 297–314. Birkhäuser, Basel, 1998.
- [197] I. Pinelis and R. Molzon. Berry-esseen bounds for general nonlinear statistics, with applications to pearson’s and non-central student’s and hotelling’s. *Arxiv preprint arXiv :0906.0177v3*, 2012.
- [198] B. Pittel. On growing random binary trees. *J. Math. Anal. Appl.*, 103(2) :461–480, 1984.
- [199] B. Price. On the completeness of a certain metric space with an application to Blaschke’s selection theorem. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 46 :278–280, 1940.
- [200] N. Privault and A. Réveillac. Stein estimation of Poisson process intensities. *Stat. Inference Stoch. Process.*, 12(1) :37–53, 2009.
- [201] J-R. Pycke. Multivariate extensions of the Anderson-Darling process. *Statist. Probab. Lett.*, 63(4) :387–399, 2003.
- [202] M. P. Quine and J. Robinson. A Berry-Esseen bound for an occupancy problem. *Ann. Probab.*, 10(3) :663–671, 1982.
- [203] J. Rabin, G. Peyré, J. Delon, and M. Bernot. Wassertein barycenter and its applications to texture mixing. In *LNCS, Proc. SSVM’11*, volume 6667, pages 435–446. Springer, 2011.
- [204] N. Rachdi, J-C. Fort, and T. Klein. Stochastic inverse problem with noisy simulator—application to aeronautical model. *Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6)*, 21(3) :593–622, 2012.
- [205] N. Rachdi, J-C. Fort, and T. Klein. Risk bounds for new M-estimation problems. *ESAIM Probab. Stat.*, 17 :740–766, 2013.
- [206] M. Raimondo and M. Stewart. The WaveD Transform in R : performs fast translation-invariant wavelet deconvolution. *Journal of Statistical Software*, 21(3) :1–27, 2007.
- [207] J. O. Ramsay and B. W. Silverman. *Functional data analysis*. Springer Series in Statistics. Springer, New York, second edition, 2005.
- [208] B. Reed. The height of a random binary search tree. *Journal of the ACM*, 50(3) :306–332, 2003.
- [209] P. Reynaud-Bouret. Compensator and exponential inequalities for some suprema of counting processes. *Statist. Probab. Lett.*, 76(14) :1514–1521, 2006.
- [210] Patricia Reynaud-Bouret, Vincent Rivoirard, and Christine Tuleau-Malot. Adaptive density estimation : a curse of support ? *J. Statist. Plann. Inference*, 141(1) :115–139, 2011.

- [211] P. Reynaud-Bourret. Adaptive estimation of the intensity of inhomogeneous poisson processes via concentration inequalities. *Probability Theory and Related Fields*, 126 :103–153, 2003.
- [212] P. Reynaud-Bourret and V. Rivoirard. Near optimal thresholding estimation of a poisson intensity on the real line. *Electronic Journal of Statistics*, 4 :171–238, 2010.
- [213] E. Rio. Une inégalité de bennett pour les maxima de processus empiriques. *Annales de l'Institut Henri Poincaré (B) Probability and Statistics*, 38(6) :1053 – 1057, 2002.
- [214] J. Robinson, T. Höglund, L. Holst, and M.P. Quine. On approximating probabilities for small and large deviations in \mathbf{R}^d . *Ann. Probab.*, 18(2) :727–753, 1990.
- [215] J.M. Robson. Constant bounds on the moments of the height of binary search trees. *Theor. Computer Sci.*, 276 :435–444, 2002.
- [216] R.T. Rockafellar and J.O. Royset. Random variables, monotone relations, and convex analysis. *Math. Program.*, pages 1–35, 2014.
- [217] F. Russo and P. Vallois. Forward, backward and symmetric stochastic integration. *Probab. Theory Related Fields*, 97(3) :403–421, 1993.
- [218] F. Russo and P. Vallois. Itô formula for C^1 -functions of semimartingales. *Probab. Theory Related Fields*, 104(1) :27–41, 1996.
- [219] S. S. Haker and A. Tannenbaum. On the Monge-Kantorovich problem and image warping. In *Mathematical methods in computer vision*, volume 133 of *IMA Vol. Math. Appl.*, pages 65–85. Springer, New York, 2003.
- [220] A. Saltelli. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. *Computer Physics Communications*, 145(2) :280–297, 2002.
- [221] A. Saltelli, K. Chan, and E.M. Scott. *Sensitivity analysis*. Wiley Series in Probability and Statistics. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, 2000.
- [222] A. Saltelli, M. Ratto, T. Andres, F. Campolongo, J. Cariboni, D. Gatelli, M. Saisana, and S. Tarantola. *Global sensitivity analysis : the primer*. Wiley Online Library, 2008.
- [223] A. Saltelli, S. Tarantola, Campolongo F., and Ratto M. *Sensitivity analysis in practice : a guide to assessing scientific models*, 2004.
- [224] R. Samworth. Optimal weighted nearest neighbour classifiers. *Annals of Statistics*, 40 :2733–2763, 2012.
- [225] A. Schwartzman, Y. Gavrilov, and R. Adler. Multiple testing of local maxima for detection of peaks in 1d. *Annals of Statistics*, 39 :3290–3319, 2011.
- [226] A. Schwartzman, A. Jaffe, Y. Gavrilov, and C. Meyer. Multiple testing of local maxima for detection of peaks in chip-seq data. *Ann. Appl. Stat.*, 7(1) :471–494, 03 2013.
- [227] Q-M. Shao. A comparison theorem on moment inequalities between negatively associated and independent random variables. *J. Theoret. Probab.*, 13(2) :343–356, 2000.
- [228] G. Shorack and J. A. Wellner. *Empirical processes with applications to statistics*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics : Probability and Mathematical Statistics. John Wiley & Sons Inc., New York, 1986.
- [229] B. W. Silverman. Smoothed functional principal components analysis by choice of norm. *Ann. Statist.*, 24(1) :1–24, 1996.

- [230] I. M. Sobol. Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Math. Modeling Comput. Experiment*, 1(4) :407–414 (1995), 1993.
- [231] I.M. Sobol. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Mathematics and Computers in Simulation*, 55(1-3) :271–280, 2001.
- [232] S. Sommer, F. Lauze, S. Hauberg, and M. Nielsen. Manifold valued statistics, exact principal geodesic analysis and the effect of linear approximations. In Kostas Daniilidis, Petros Maragos, and Nikos Paragios, editors, *Computer Vision – ECCV 2010*, volume 6316 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 43–56. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [233] G. P. Steck. Limit theorems for conditional distributions. *Univ. California Publ. Statist.*, 2 :237–284, 1957.
- [234] I. Steinwart. Consistency of support vector machines and other regularized kernel classifiers. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 51(1) :128–142, 2005.
- [235] C. J. Stone. Consistent nonparametric regression. *Ann. Statist.*, 5(4) :595–645, 1977. With discussion and a reply by the author.
- [236] K.T. Sturm. Probability measures on metric spaces of nonpositive curvature. In *Heat kernels and analysis on manifolds, graphs, and metric spaces (Paris, 2002)*, volume 338 of *Contemp. Math.*, pages 357–390. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2003.
- [237] M. Talagrand. New concentration inequalities in product spaces. *Invent. Math.*, 126(3) :505–563, 1996.
- [238] S. Tavaré. The birth process with immigration, and the genealogical structure of large populations. *J. Math. Biol.*, 25(2) :161–168, 1987.
- [239] J.Y. Tissot and C. Prieur. Bias correction method for the estimation of sensitivity indices based on random balanced designs. *Reliability Engineering and System Safety*, 107 :205–213, 2012.
- [240] A. Trouvé and L. Younes. Local geometry of deformable templates. *SIAM J. Math. Anal.*, 37(1) :17–59 (electronic), 2005.
- [241] A. Trouvé and L. Younes. Shape spaces. In *Handbook of Mathematical Methods in Imaging*. Springer, 2011.
- [242] A. B. Tsybakov. Optimal aggregation of classifiers in statistical learning. *Ann. Statist.*, 32(1) :135–166, 2004.
- [243] K. Uchiyama. Spatial growth of a branching process of particles living in R^d . *Ann. Probab.*, 10(4) :896–918, 1982.
- [244] A. W. van der Vaart. *Asymptotic statistics*, volume 3 of *Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [245] V. N. Vapnik. *Statistical learning theory*. Adaptive and Learning Systems for Signal Processing, Communications, and Control. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1998. A Wiley-Interscience Publication.
- [246] S. Da Veiga. Efficient estimation of sensitivity indices. *J. Nonparametr. Stat.*, 25(3) :573–595, 2013.
- [247] S. Da Veiga. Global sensitivity analysis with dependence measures. *J. Stat. Comput. Simul.*, 85(7) :1283–1305, 2015.
- [248] C. Villani. *Topics in Optimal Transportation*, volume 58 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, 2003.

- [249] C. Villani. *Topics in Optimal Transportation*. American Mathematical Society, 2003.
- [250] J. von Neumann and O. Morgenstern. *Theory of Games and Economic Behavior*. Princeton, NJ. Princeton University Press, 1953.
- [251] J. Wang, A. Huda, V. Lunyak, and I. Jordan. A gibbs sampling strategy applied to the mapping of ambiguous short-sequence tags. *Bioinformatics*, 26 :2501–2508, 2010.
- [252] R. M. Willett and R. D. Nowak. Multiscale Poisson intensity and density estimation. *IEEE Transactions on Information Theory*, 53(9) :3171–3187, 2007.
- [253] B. Zhang, J. M. Fadili, and J.-L. Starck. Wavelets, ridgelets, and curvelets for Poisson noise removal. *IEEE Transactions on Image Processing*, 17(7) :1093–1108, 2008.
- [254] Y. Zhang, T. Liu, C. Meyer, J. Eeckhoutte, D. Johnson, B. Bernstein, C. Nusbaum, R. Myers, M. Brown, and W. Li. Model-based analysis of chip-seq (macs). *Genome Biology*, 9(9) :R137, 2008.
- [255] Z. Zhang and H.-G. Müller. Functional density synchronization. *Comput. Stat. Data Anal.*, 55(7) :2234–2249, 2011.
- [256] H. Ziezold. On expected figures and a strong law of large numbers for random elements in quasi-metric spaces. In *Trans. 7th Prague Conf. Inf. Theory, Stat. Dec. Func., Random Processes*, volume A, pages 591–602. Reidel, Dordrecht, 1977.