
Sujet 5

• **Rappels:** Soit f une fonction de densité à estimer. Soit (X_1, \dots, X_n) un échantillon i.i.d. de variables aléatoires distribuées comme une variable aléatoire X dont la loi admet la densité $f(\cdot)$ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R} .

↦ **Histogramme:** Soit $(I_j)_{j=1, \dots, J}$ une partition de $[a, b]$ où le segment $[a, b]$ est approprié à la distribution considérée. Supposons que les intervalles I_j sont tous de même longueur notée $|I_j| = h > 0$ de sorte que $I_j = [a + (j-1)h, a + jh]$ pour $j = 1, \dots, J$ et que $h = (b-a)/J$. L'estimateur de $f(\cdot)$ au moyen d'un histogramme est défini pour $x \in \mathbb{R}$ par:

$$\hat{f}_{n,h}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{j=1}^J N_j I(x \in I_j)$$

avec

$$N_j = \sum_{i=1}^n I(X_i \in I_j).$$

L'estimateur ainsi obtenu est une fonction en escalier, constante sur chaque intervalle I_j . En pratique, l'utilisateur doit choisir a , b et J (ou de manière équivalente h).

• **Choix de la fenêtre par validation croisée:** l'idée est de déterminer un choix "optimal" de la fenêtre h noté h_{opt} de la façon suivante

$$\begin{aligned} h_{\text{opt}} &= \arg \min_{h>0} \text{ISE}(\hat{f}_h) \\ &= \arg \min_{h>0} \int (\hat{f}_h(x) - f(x))^2 dx \\ &= \arg \min_{h>0} \left\{ \int (\hat{f}_h(x))^2 dx - 2 \int \hat{f}_h(x) f(x) dx + \int f(x)^2 dx \right\} \\ &= \arg \min_{h>0} \left\{ \int (\hat{f}_h(x))^2 dx - 2 \int \hat{f}_h(x) f(x) dx \right\}. \end{aligned}$$

Notons

$$J(h) = \int (\hat{f}_h(x))^2 dx - 2 \int \hat{f}_h(x) f(x) dx$$

et remarquons que le premier terme est entièrement connu. Ensuite, remarquons que

$$\int \hat{f}_h(x) f(x) dx = \mathbb{E} \left[\hat{f}_h(X) | X_1, \dots, X_n \right]$$

pour une variable aléatoire X de densité f , indépendante de (X_1, \dots, X_n) . On estime alors $\mathbb{E} \left[\widehat{f}_h(X) | X_1, \dots, X_n \right]$ sans biais par la méthode dite du “leave-one-out”. Cela fournit le critère suivant à optimiser le critère en h :

$$\widehat{J(h)} = \int (\widehat{f}_h(x))^2 dx - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \widehat{f}_{-i,h}(X_i)$$

où $\widehat{f}_{-i,h}$ est l’estimateur de f calculé avec la fenêtre h mais en ôtant l’observation i .

Notons que la fonction $\widehat{J(h)}$ est un estimateur sans biais de $\text{MISE}(\widehat{f}_h)$ à une constante indépendante de h près puisque

$$\mathbb{E} \left[\widehat{J(h)} \right] = \text{MISE}(\widehat{f}_h) - \int f(x)^2 dx.$$

• **Critères objectifs:**

Critères ponctuels: pour un estimateur \widehat{f} de f , le biais est ponctuellement donné par

$$b_f \left(\widehat{f}(x) \right) = \mathbb{E} \left[\widehat{f}(x) \right] - f(x),$$

la variance est ponctuellement donnée par

$$\text{Var} \left(\widehat{f}(x) \right) = \mathbb{E} \left[\left(\widehat{f}(x) - \mathbb{E} \left[\widehat{f}(x) \right] \right)^2 \right],$$

et l’écart quadratique moyen est ponctuellement donné par

$$R_f \left(\widehat{f}(x) \right) = \mathbb{E} \left[\left(\widehat{f}(x) - f(x) \right)^2 \right].$$

Critères globaux: le carré du biais intégré est donné par

$$\int \left(\mathbb{E} \left[\widehat{f}(x) \right] - f(x) \right)^2 dx,$$

la variance intégrée est donnée par

$$\int \text{Var} \left(\widehat{f}(x) \right) dx,$$

et l’écart quadratique moyen intégré (MISE = Mean Integrated Squared Error) est donné par

$$\int \mathbb{E} \left[\left(\widehat{f}(x) - f(x) \right)^2 \right] dx.$$

• **Implémentation au moyen du logiciel R:**

Histogramme: La fonction `hist` du logiciel R détermine l’estimateur de la densité par histogramme.

La fonction `histde` du package `ks` propose aussi une implémentation de l’estimateur de la densité par histogramme.

La relation entre le nombre de classes J et la longueur h des intervalles est donnée par:

$$J = \left\lceil \frac{\max(x_1, \dots, x_n) - \min(x_1, \dots, x_n)}{h} \right\rceil.$$

La règle de Sturges¹ est utilisée par défaut par la fonction `hist`:

$$J = 1 + \lceil \log_2 n \rceil .$$

Deux autres choix sont implémentés dans la fonction `hist`, à savoir la règle de Diaconis et Freedman²:

$$h = 2 \frac{\text{IQR}}{n^{1/3}}$$

en notant IQR l'intervalle inter-quartile, ainsi que la règle de référence gaussienne de Scott³:

$$h = 3.5 \frac{\hat{\sigma}}{n^{1/3}}$$

en notant $\hat{\sigma}$ un estimateur de l'écart-type. D'autres choix ont été proposés dans la littérature dont la règle de la racine carrée (choix du logiciel `Excel`):

$$J = \lceil \sqrt{n} \rceil ,$$

la règle de Rice⁴:

$$J = \lceil 2n^{1/3} \rceil ,$$

et la formule de Doane⁵:

$$J = 1 + \left\lceil \log_2 n + \log_2 \left(1 + \frac{\hat{\kappa}_1}{c} \right) \right\rceil$$

où $\hat{\kappa}_1$ est le coefficient d'asymétrie empirique (disponible dans le package `moments`) et où c est donné par:

$$c = \sqrt{\frac{6(n-2)}{(n+1)(n+3)}} .$$

Exercice 1.

On note $\varphi_{(m,\sigma^2)}$ la densité de la loi gaussienne de paramètres $m \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 > 0$. Considérons les distributions suivantes:

- la loi gaussienne standard $\mathcal{N}(0, 1)$ de densité $\varphi_{(0,1)}$,
- les lois $\Gamma(1, 1/2)$, $\Gamma(2, 1/2)$ et $\Gamma(5, 1)$,
- la loi triangulaire de densité donnée pour $x \in \mathbb{R}$ par

$$g(x) = \max(1 - |x|, 0) ,$$

- la loi de Student à 2 degrés de liberté, dilatée, translatée: $X = 0.25Y - 0.5 = (Y - 2)/4$ où $Y \sim T(2)$,

¹Sturges H A. (1926) *The choice of a class interval*, Journal of the American Statistical Association, 21 (153): 65-66.

²Freedman D., Diaconis P. (1981) *On the histogram as a density estimator: L2 theory*, Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete, 57 (4): 453-476.

³Scott D.W. (1979) *On optimal and data-based histograms*, Biometrika, 66 (3): 605-610.

⁴http://onlinestatbook.com/2/graphing_distributions/histograms.html

⁵Doane D.P. (1976) *Aesthetic frequency classification*, American Statistician, 30: 181-183.

- la loi de Student à 3 degrés de liberté, dilatée, translatée: $X = 0.25Y - 0.5 = (Y - 2)/4$ où $Y \sim T(3)$,
- on note $\tilde{\varphi}_{(0,1)}$ la restriction de $\varphi_{(0,1)}$ à $[-1, 2]$ puis l'on considère la loi de densité définie comme suit:

$$f(x) = \frac{\tilde{\varphi}_{(0,1)}(x)}{\int_{-1}^2 \varphi_{(0,1)}(u) du}, \quad x \in \mathbb{R},$$

- la loi de densité donnée par la fonction en escalier suivante:

$$f(x) = \begin{cases} 1/2 & \text{si } 0 \leq x < 1/2, \\ 2 & \text{si } 1/2 \leq x < 2/3, \\ 5/4 & \text{si } 2/3 \leq x \leq 1, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

- la loi dont la densité est en dents de scie comme ci-dessous:

$$f(x) = g(x + 9) + g(x + 7) + \dots + g(x - 7) + g(x - 9),$$

- la loi de densité:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{c} \varphi_{(1,0.4)}(x) & \text{si } 0 \leq x < 1/2, \\ \frac{1}{c} \varphi_{(0,0.4)}(x) & \text{si } 1/2 \leq x \leq 1, \end{cases}$$

$$\text{où } c = \int_0^{1/2} \varphi_{(1,0.4)}(u) du + \int_{1/2}^1 \varphi_{(0,0.4)}(u) du,$$

- le mélange de lois gaussiennes de densité:

$$\frac{1}{2} \varphi_{(0,0.1)}(x) + \frac{1}{2} \varphi_{(1,0.4)}(x),$$

- la loi de densité:

$$f(x) = \frac{32}{63} \varphi_{(-31/21, 32/63)}(x) + \frac{16}{6} \varphi_{(17/21, 16/63)}(x) + \frac{8}{63} \varphi_{(41/21, 8/63)}(x) \\ + \frac{4}{63} \varphi_{(53/21, 4/63)}(x) + \frac{2}{63} \varphi_{(59/21, 2/63)}(x) + \frac{1}{63} \varphi_{(62/21, 1/63)}(x).$$

1. Simuler M échantillons de taille n suivant les distributions exposées ci-dessus pour différentes valeurs de n .
2. Déterminer les estimateurs de la densité par histogramme obtenus avec les différentes tailles de fenêtre proposées dans les règles ci-dessus et par la méthode de la validation croisée.
3. Analyser alors le comportement de l'histogramme à l'aide des critères objectifs précédemment présentés.