

**Estimation des moindres carrés d'une densité discrète  
sous contrainte de k-monotonie et bornes de risque.  
Application à l'estimation du nombre d'espèces dans une  
population.**

Jade Giguelay

► **To cite this version:**

Jade Giguelay. Estimation des moindres carrés d'une densité discrète sous contrainte de k-monotonie et bornes de risque. Application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population.. Théorie [stat.TH]. Université Paris-Saclay, 2017. Français. NNT : 2017SACLS248 . tel-02110252

**HAL Id: tel-02110252**

**<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02110252>**

Submitted on 25 Apr 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



NNT : 2017SACLS248

**THÈSE**  
**DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY**  
**préparée à l'UNIVERSITÉ PARIS-SUD**

ED n°574

Ecole Doctorale de Mathématiques Hadamard  
Spécialité de doctorat: Mathématiques Appliquées

par

**JADE GIGUELAY**

---

Estimation des moindres carrés d'une densité discrète sous contrainte de  $k$ -monotonie et bornes de risque. Application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population.

---

Soutenance à Orsay, le 27 Septembre 2017.

**Composition du Jury :**

BALABDAOUI Fadoua (Professeur des Universités, ETH Zurich) : rapporteur  
DUROT Cécile (Professeur des Universités, Université de Nanterre) : examinatrice  
GIRAUD Christophe (Professeur des Universités, Université Paris-Sud) : directeur de thèse  
HUET Sylvie (Directrice de Recherche, INRA): encadrante  
LAURENT Béatrice (Professeur des Universités, INSA Toulouse) : examinatrice  
MASSART Pascal (Professeur des Universités, Université Paris-Sud) : président du jury

**Rapporteurs :**

BALABDAOUI Fadoua (Professeur des Universités, ETH Zurich)  
BUNGE John (Professeur des Universités, Cornell University)





# Contents

<b>Introduction générale</b>	<b>5</b>
<b>1 Etat de l'art : Estimation d'une densité sous contrainte de forme</b>	<b>8</b>
1.1 La contrainte de forme, qu'est-ce que c'est, à quoi ça sert ?	9
1.2 Les estimateurs et les algorithmes	18
1.3 Résultats classiques en contrainte de forme	21
1.4 Tester ces contraintes de forme	24
1.5 Conclusion	25
<b>2 Vue d'ensemble de la thèse</b>	<b>26</b>
Version Française	26
English Version	32
<b>3 Outils Mathématiques et Notations</b>	<b>38</b>
3.1 Notations générales	38
3.2 Entropie métrique et entropie à crochet	40
3.3 Outils et résultats de Statistiques	41
3.4 Rappels d'analyse	46
<b>I Estimation d'une densité discrète sous contrainte de <math>k</math>-monotonie</b>	<b>49</b>
<b>4 La contrainte de <math>k</math>-monotonie</b>	<b>51</b>
4.1 Définition de la $k$ -monotonie	51
4.2 Motivation	54
4.3 Ecriture en base de splines	56
<b>5 Estimateurs des moindres carrés sous contrainte de <math>k</math>-monotonie</b>	<b>61</b>
5.1 L'estimateur sous contrainte de $k$ -monotonie sur l'espace des fonctions	62
5.2 L'estimateur sous contrainte de $k$ -monotonie sur l'espace des probabilités	64
5.3 Propriétés communes aux deux estimateurs	65
5.4 Implémentation	67
5.5 Simulations	73
<b>6 Preuves de la Partie I</b>	<b>88</b>
6.1 Preuves du chapitre 4 : Propriétés relatives aux fonctions $k$ -monotones	89
6.2 Preuves du chapitre 5 : Propriétés sur les estimateurs sous contrainte de $k$ -monotonie	90
6.3 Preuves de la Section 5.4 : Algorithme	99
6.4 Preuves des lemmes techniques	105
6.5 Preuve de la Propriété 32 : $k$ -monotonie des lois de Poisson	109

---

<b>Conclusion de la Partie I</b>	<b>110</b>
<b>II Bornes de risque</b>	<b>113</b>
<b>7 Une borne oracle adaptative</b>	<b>115</b>
7.1 Introduction . . . . .	116
7.2 Résultat principal . . . . .	122
7.3 Fil de la preuve . . . . .	124
7.4 Discussion . . . . .	129
7.5 Preuves . . . . .	137
<b>8 Quelques extensions</b>	<b>157</b>
8.1 Le passage au paramétrique . . . . .	158
8.2 Entropies à crochet sur l'espace $\mathcal{P}^k$ . . . . .	159
8.3 Lien avec le problème du nombre de points à coordonnées entières dans une boule . . . . .	161
8.4 Preuve des lemmes . . . . .	163
<b>III Tests de <math>k</math>-monotonie et application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population</b>	<b>168</b>
<b>9 Estimation du nombre d'espèces dans une population</b>	<b>170</b>
9.1 Introduction . . . . .	171
9.2 Estimation du nombre d'espèces sous contrainte de $k$ -monotonie . . . . .	179
9.3 Illustration sur jeux de données simulés . . . . .	184
9.4 Illustration sur jeux de données réels . . . . .	194
9.5 Preuves . . . . .	197
<b>10 Tests de <math>k</math>-monotonie</b>	<b>200</b>
10.1 Introduction . . . . .	201
10.2 Testing the $k$ -monotonicity of $p^+$ . . . . .	201
10.3 Estimating the degree of monotonicity of $p^+$ . . . . .	215
10.4 Application to real data sets . . . . .	218
10.5 Conclusion . . . . .	221
10.6 Proofs . . . . .	222
<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>227</b>
<b>Index</b>	<b>232</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>233</b>
<b>Résumé</b>	<b>242</b>

# Introduction Générale

---

## **Avant-Propos**

Cette introduction est structurée en trois parties. Elle commence par un état de l'art sur l'estimation de densité sous contrainte de forme. Le second chapitre résume les résultats principaux du manuscrit ainsi que le cheminement du travail de ces trois années. Il positionne également la thèse par rapport à la littérature existante. Enfin le Chapitre 3 est un chapitre auxiliaire qui regroupe à la fois un rappel des notations standard adoptées dans le manuscrit ainsi que des outils d'analyse et de statistiques qui ont été utiles à ce travail.



# Chapter 1

## Etat de l'art : Estimation d'une densité sous contrainte de forme

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>La contrainte de forme, qu'est-ce que c'est, à quoi ça sert ? . . .</b>	<b>9</b>
1.1.1	Les contraintes en question, point bibliographique. . . . .	9
1.1.2	Une idée naturelle. . . . .	15
1.1.3	Les avantages et les inconvénients par rapport aux méthodes existantes. . . . .	16
1.1.4	La contrainte de forme, un domaine plus général . . . . .	17
<b>1.2</b>	<b>Les estimateurs et les algorithmes . . . . .</b>	<b>18</b>
1.2.1	L'estimateur de Grenander et l'algorithme PAVA . . . . .	19
1.2.2	Les autres estimateurs de maximum de vraisemblance, des moindres carrés, et leurs algorithmes . . . . .	20
<b>1.3</b>	<b>Résultats classiques en contrainte de forme . . . . .</b>	<b>21</b>
1.3.1	Résultats asymptotiques . . . . .	22
1.3.2	Résultats non-asymptotiques . . . . .	23
<b>1.4</b>	<b>Tester ces contraintes de forme . . . . .</b>	<b>24</b>
<b>1.5</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>25</b>

---

## Introduction

L'estimation de densité est une question centrale dans la branche des statistiques non-paramétriques. Parmi les diverses méthodes existantes, l'estimation de densité sous contrainte de forme est un problème ancien introduit par Grenander en 1956. La notion de forme se rapporte à l'idée la plus intuitive que l'on peut s'en faire, c'est-à-dire l'allure générale de la courbe représentative de la densité. Les contraintes de forme les plus utilisées sont la monotonie qui traduit une courbe *descendante* ou *ascendante*, la convexité pour une courbe *en creux* ou encore l'unimodalité qui traduit le fait de ne posséder qu'un seul maximum local.

La problématique générale est la suivante : soit  $p^*$  une densité, soit  $X_1, \dots, X_n$  un  $n$ -échantillon de loi  $p^*$ . On souhaite estimer  $p^*$  sur la base de l'observation de cet échantillon. Comment se servir d'une connaissance sur la forme de  $p^*$  pour améliorer l'estimation ? Quelle robustesse présentent ces estimateurs lorsque la densité  $p^*$  n'a en réalité pas la forme supposée ? Comment justifier le choix de cette forme ?

Dans ce chapitre nous présentons le problème général de l'estimation sous contrainte de forme et nous dressons un état de l'art des estimateurs et des résultats disponibles actuellement. Cet état de l'art ne saurait être exhaustif. En particulier, il ne s'attardera pas sur les contraintes de forme *indirectes*, c'est-à-dire ne portant pas directement sur la densité en elle-même comme c'est le cas dans le cas des modèles de régression isotonique. Pour plus d'informations à propos de l'estimation sous contrainte de forme, il est possible de consulter le livre de Groeneboom et Jongbloed (2014) ou la revue de Saumard et Wellner (2014) qui porte uniquement sur la contrainte de log-concavité. Un très rapide panorama des méthodes à contrainte de forme indirecte est fait à la Section 1.1.4.

## La contrainte de forme, qu'est-ce que c'est, à quoi ça sert ?

### Les contraintes en question, point bibliographique.

L'estimation sous contrainte de forme repose sur la supposition que les densités étudiées présentent une forme connue. Mais quels sont les types de forme considérés ?

Avant de commencer il est nécessaire de préciser que seuls deux types de densités seront discutés, premièrement les densités mesurables par rapport à la mesure de Lebesgue, à support dans un intervalle ou sur  $\mathbb{R}$  (mais des estimateurs analogues existent sur  $\mathbb{R}^d$ ), et deuxièmement les densités à support sur  $\mathbb{N}$  que l'on appellera les densités discrètes. Ces dernières peuvent éventuellement avoir un support fini, souvent non connu. Par ailleurs, le cadre de la régression gaussienne sera également abordé à des fins de comparaison.

Nous ferons l'abus de langage suivant : nous parlerons du *cas discret* pour désigner l'ensemble des méthodes d'estimation de fonctions discrètes, du *cas de la régression* pour désigner le cadre spécifique de la régression gaussienne sous contrainte de forme qui est défini à la Section 1.1.4, et du *cas continu* ou *cas réel* pour renvoyer à l'estimation d'une densité mesurable par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}$  bien que ces fonctions ne soient pas nécessairement continues.

Nous répertorions dans ce paragraphe les contraintes de forme les plus fréquentes ainsi qu'une partie subjective et non-exhaustive de la bibliographie associée.

## Monotonie

La première contrainte à avoir été considérée pour l'estimation de densité est la contrainte de *monotonie* ainsi que ses deux variantes, la contrainte de croissance et celle de décroissance. Les données présentant une tendance à l'augmentation ou à la diminution surviennent dans de multiples situations, aussi bien dans les jeux de données réels que dans les problèmes mathématiques, l'estimation d'une densité sous contrainte de monotonie est donc apparue très naturellement.

Le premier estimateur sous contrainte de monotonie a été introduit par Grenander en 1956. Il s'agit de l'estimateur du maximum de vraisemblance d'une densité sur  $\mathbb{R}_+$  sous contrainte de décroissance. Grenander montre qu'il est exactement la dérivée à gauche du plus grand majorant concave de la distribution de répartition empirique. Cet estimateur, appelé depuis *estimateur de Grenander* et redéfini dans la Section 1.2 a été largement étudié. Dans le cas où la vraie densité  $p^*$  est effectivement décroissante, Rao (1969) et Groeneboom (1984) ont montré une vitesse de convergence asymptotique ponctuelle en  $n^{-1/3}$  et étudié la loi limite pour cet estimateur tandis que Birgé (1989) a développé des bornes de risque non-asymptotiques. Woodroof et Sun (1993) et Balabdaoui et al. (2011) se sont intéressés au problème de l'inconsistance de l'estimateur en 0. On pourra également consulter au sujet de cette contrainte les travaux de Groeneboom et al. (1999) et Durot (2007) concernant les pertes  $\mathbb{L}^p$ , de Huang et Wellner (1995) à propos des modèles censurés ou encore de Groeneboom et al. (2015) sur la recherche d'intervalles de confiance. Pour finir avec le cadre des densités réelles, Jankowski et al. (2014) ont récemment étudié la question de la consistance de l'estimateur de Grenander dans le cas où  $p^*$  n'est pas monotone.

Dans le cadre des densités discrètes, Jankowski et Wellner (2009) ont récemment étudié cette contrainte, motivés par l'essor de données de comptage et notamment des données de distribution d'abondance (voir Partie III). Ils montrent la consistance de trois estimateurs et étudient leurs comportements asymptotiques.

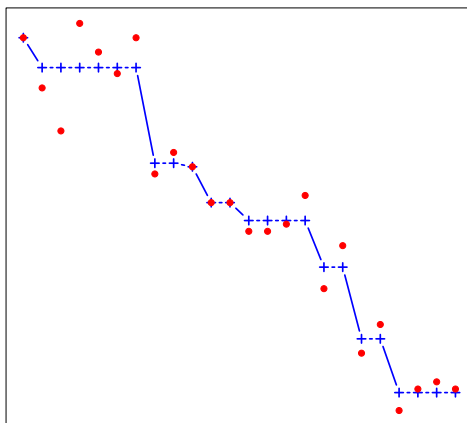


Figure 1.1: Estimation sous contrainte de monotonie discrète. En bleu l'estimateur de Grenander, en rouge l'estimateur empirique.

La Figure 1.1 illustre une estimation sous contrainte de décroissance dans le cas d'une

distribution discrète. Le jeu de données d'allure décroissant (en rouge) est approché par l'estimateur de Grenander (en bleu).

### Convexité, concavité

Une autre contrainte de forme usuelle est la contrainte de *convexité* fréquemment utilisée pour modéliser des fonctions présentant une forme creusée vers l'intérieur. De façon duale la contrainte de *concavité* traduit la forme en creux extérieur de la fonction. Les fonctions convexes peuvent en effet être définies comme l'ensemble des fonctions situées au-dessus de toutes leurs pentes tandis que les fonctions concaves sont celles situées en-dessous de toutes leurs pentes (voir Chapitre 4 pour une définition plus formelle).

L'estimation sous contrainte de convexité a été introduite par Groeneboom et al (2001) dans le cas continu. Ils ont défini deux estimateurs sous contrainte de convexité et étudié leurs lois limites et leurs vitesses de convergence. Leur travail a été poursuivi par Balabdaoui (2007) qui a prouvé la consistance en 0 de l'estimateur puis par Balabdaoui et Rufibach (2008) qui ont montré une inégalité de Marshall. Récemment, Chen et Wellner (2016) ont étudié le comportement de l'estimateur dans le cas limite c'est-à-dire quand la vraie distribution est linéaire.

Dans le cas discret, un estimateur des moindres carrés sous contrainte de convexité a été introduit et étudié par Durot et al. (2013). Balabdaoui et Durot (2015) ont ensuite développé une inégalité de Marshall pour cet estimateur tandis que Balabdaoui et al. (2017) se sont intéressés à sa distribution limite.

La Figure 1.2 illustre une estimation sous contrainte de convexité dans le cas discret. L'estimateur utilisé est disponible au package `pkmon`<sup>1</sup>. Les estimateurs sont affines par morceaux.

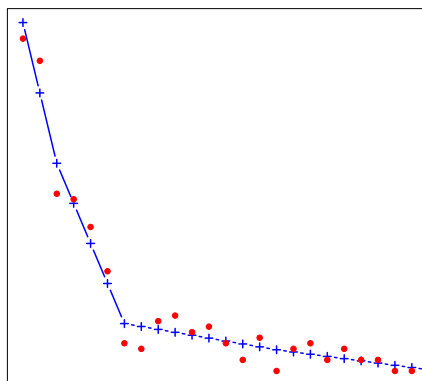


Figure 1.2: Estimation sous contrainte de convexité discrète. En bleu l'estimateur des moindres carrés, en rouge l'estimateur empirique.

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

## Unimodalité

L'*unimodalité* qui traduit le fait pour une fonction de ne posséder qu'un seul mode, c'est-à-dire un unique maximum local, est également une contrainte naturelle. Elle modélise notamment les phénomènes de pics. La difficulté de l'estimation est très différente selon que l'on choisisse un modèle à mode connu ou à mode inconnu.

L'estimation d'une densité sous contrainte d'unimodalité à mode connu a été introduite brièvement par Grenander (1956) puis simultanément développée par Wegman (1968) et Rao (1969). Dans le cas où la localisation du mode est connu, les densités unimodales peuvent en effet être vues comme la concaténation de densités croissantes puis décroissantes, les estimateurs de maximum de vraisemblance de Wegman et Rao sont ainsi obtenus par extension de l'estimateur de Grenander.

Dans le cas où le mode est inconnu, l'estimateur du maximum de vraisemblance n'existe pas; Birgé (1997) parvient néanmoins à contourner cette difficulté et développe un estimateur à mode inconnu asymptotiquement équivalent à ceux de Wegman et Rao. Cet estimateur a été étudié plus en détail par Reboul (1998) et Wang (1995). Des méthodes alternatives ont été proposées par Fougères (1997), Meyer et Roodroof (2004) et Turnbull et Gosh (2014). Le principal problème auquel sont confrontés tous ces auteurs est la non-consistance au mode, phénomène appelé *picking* (voir Bickel et Fan, 1996) qu'il est possible d'éviter en se plaçant -lorsque c'est adapté- sous des modèles à contrainte de log-concavité (voir paragraphe suivant) plus restrictifs.

Dans le cas discret, en revanche, le maximum de vraisemblance existe toujours, sa consistance et sa loi limite ont été étudiées par Balabdaoui et Jankowski (2015) dans le cas bien-spécifié et dans le cas où la vraie distribution n'est pas unimodale.

La Figure 1.4 illustre une estimation sous contrainte d'unimodalité discrète.

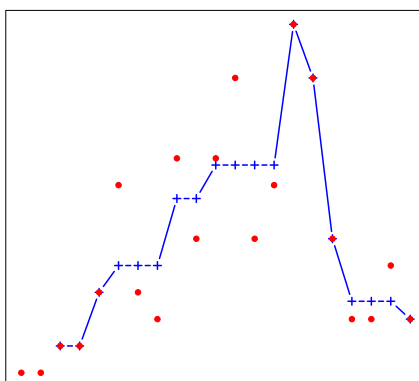


Figure 1.3: Estimation sous contrainte d'unimodalité, cas discret. En bleu l'estimateur de Balabdaoui et Jankowski (2015), en rouge l'estimateur empirique.

Les méthodes développées pour étudier des estimateurs sous contrainte d'unimodalité peuvent pour la plupart être adaptées pour calculer un estimateur de forme en U, c'est-à-dire une fonction composée successivement d'une partie strictement décroissante, d'une partie constante puis d'une partie strictement croissante. Cette contrainte de forme dérivée de l'unimodalité a été étudiée par Reboul (1998) en vue d'une application à la modélisation

des taux de pannes. Ci-dessous une illustration de la contrainte de forme en U :

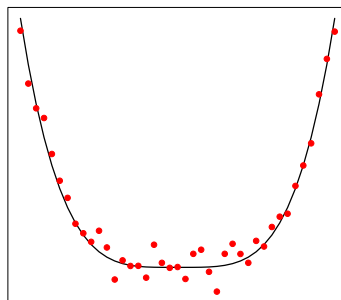


Figure 1.4: Estimation sous contrainte de forme en U, cas continu. En noir la vraie distribution, en rouge l'estimateur empirique.

### Log-concavité

La contrainte de *log-concavité* est particulièrement populaire. La définition est la suivante : on dit qu'une fonction  $f$  est log-concave si  $\log(f)$  est concave c'est-à-dire si elle vérifie l'une des propriétés équivalentes suivantes :

- $\forall 0 \leq \lambda \leq 1, \forall x, y, \lambda \log(f(x)) + (1 - \lambda) \log(f(y)) \leq \log(f(\lambda x + (1 - \lambda)y))$ .
- $\forall 0 \leq \lambda \leq 1, \forall x, y, f(x)^\lambda f(y)^{1-\lambda} \leq f(\lambda x + (1 - \lambda)y)$ .
- $\forall x, y, \sqrt{f(x)f(y)} \leq f\left(\frac{x+y}{2}\right)$ .

Les fonctions log-concaves sont donc des fonctions possédant des queues de distribution sous-exponentielles. En particulier les distributions à queue lourde ne sont donc pas log-concaves. Notons que les fonctions log-concaves sont unimodales. La contrainte de log-concavité peut donc constituer une alternative intéressante à la contrainte d'unimodalité qui présente de nombreux inconvénients.

La grande popularité de cette contrainte s'explique également par le fait que de très nombreuses lois usuelles sont log-concaves parmi lesquelles les lois normales, exponentielles, la loi uniforme sur un ensemble convexe fermé, la densité de Laplace ou encore les lois Gamma de paramètre supérieur à 1. Cette contrainte de forme englobe donc de très nombreux modèles paramétriques.

L'étendue de ce modèle explique le nombre conséquent de travaux à ce sujet que nous ne développons pas ici. La revue de Saumard et Wellner (2009) est un point de départ très complet pour aborder cette contrainte.

La Figure 1.5 présente quelques exemples de densités log-concaves ainsi que l'estimateur du maximum de vraisemblance sous contrainte de log-concavité associé. Elle est tirée de la thèse de Hu (2016).

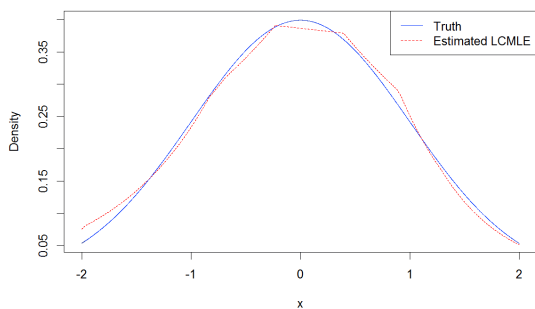
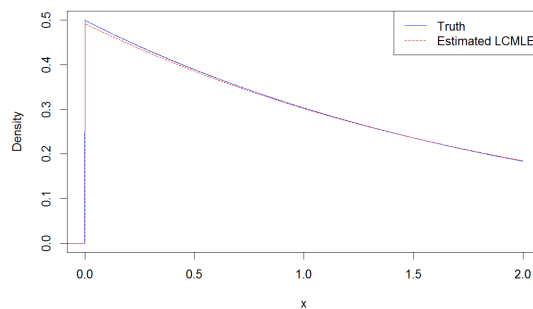
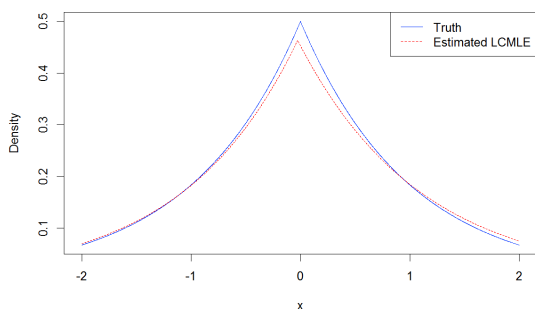
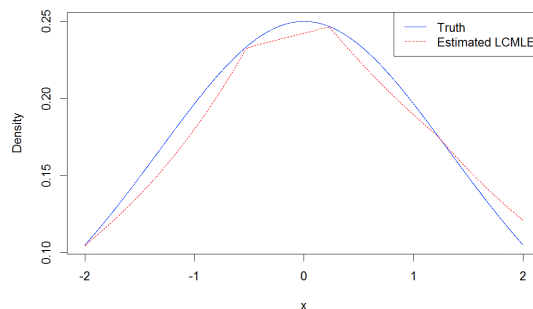
(a) Loi normale  $\mathcal{N}(0, 1)$ .(b) Loi Gamma  $\Gamma(1, 2)$ .(c) Loi Laplace  $\mathcal{L}(0, 1)$ .(d) Loi Logistique  $L(0, 1)$ .

Figure 1.5: Quelques exemples de fonctions log-concaves continues ("—") et l'estimateur du maximum de vraisemblance sous contrainte de log-concavité associé ("- -") pour  $n = 400$ . D'après Hu (2016).

L'estimation sous contrainte de log-concavité a été introduite par Dümbgen et Rufibach (2009) qui ont également étudié les propriétés et la consistance de l'estimateur du maximum de vraisemblance sous cette contrainte. L'aspect algorithmique avait préalablement été abordé par Dümbgen et al. (2007) et Rufibach (2007) puis amélioré par Dümbgen et Rufibach (2010). La convergence globale de l'estimateur du maximum de vraisemblance a été montrée par Balabdaoui (2014A) dans le cas où la vraie distribution est géométrique et dans un cadre plus général par Doss et Wellner (2016). Enfin Balabdaoui et al. (2009) ont caractérisé la loi limite de cet estimateur, Azadbakhsh et al. (2014) ont proposé des intervalles de confiance et Kim et al. (2016) et Kim et Samworth (2017) se sont intéressés à sa concentration non-asymptotique globale ou locale.

Dans le cadre discret, le seul papier disponible à notre connaissance est celui de Balabdaoui et al. (2013).

### ***k*-monotonie**

Enfin, la dernière contrainte de forme considérée dans cet état de l'art est la contrainte de *k-monotonie*, *k* faisant référence à un entier supérieur à 2 fixé. Cette forme vient formaliser l'idée de creux des densités convexes, aussi nommées densités 2-monotones. Une définition formelle de la *k-monotonie* est donnée au chapitre 4. Plus l'entier *k* est élevé et plus la fonction est creuse. Une fonction *k-monotone* est typiquement une spline d'ordre  $k - 1$ . Voir aux Chapitres 4 et 5 pour des illustrations de cette contrainte de forme; et en particulier la Figure 4.4.

Jewell (1982) fut le premier à évoquer l'intérêt de l'estimation non-paramétrique d'une densité  $k$ -monotone définie sur  $\mathbb{R}_+$ . Sa motivation était alors d'approcher des distributions de type mélange exponentiels afin de modéliser l'espérance de vie d'une population hétérogène. Les estimateurs du maximum de vraisemblance et des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie ont ensuite été définis et étudiés par Balabdaoui (2003) et Balabdaoui et Wellner (2007, 2010). Ils montrent la consistance de ces estimateurs et calculent leurs distributions asymptotiques. L'aspect algorithmique y est également abordé. Pour  $\geq 3$  ces estimateurs ne sont pas, en général, des probabilités. Chee et Wang (2014) ont donc poursuivi ces travaux en proposant un estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie contraint à être de masse 1 ainsi qu'un algorithme pour le calculer.

L'objet de cette thèse est l'étude de l'estimation d'une densité discrète sous contrainte de  $k$ -monotonie par moindres carrés. Chee et Wang (2016) ont proposé un estimateur du maximum de vraisemblance sous contrainte de  $k$ -monotonie. Leur approche empirique consiste à se placer sous un sous-ensemble paramétrique de l'ensemble des lois  $k$ -monotones discrètes.

La Figure 1.2 illustre une estimation sous contrainte de 3-monotonie dans le cas discret. L'estimateur utilisé est disponible au package `pkmon`<sup>2</sup>, c'est un mélange de splines de degré 2.

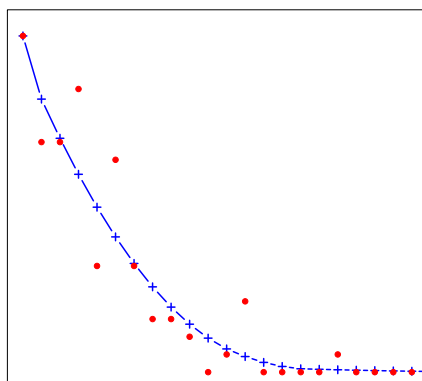


Figure 1.6: Estimation sous contrainte de 3-monotonie dans le cas discret. En bleu l'estimateur des moindres carrés définis en Partie I, en rouge l'estimateur empirique.

### Une idée naturelle.

L'objectif de la contrainte de forme est d'estimer une densité  $p^*$  sur la base de  $n$  observations  $X_1 \dots X_n$ . L'estimation sous contrainte de forme est basée sur l'idée que  $p^*$  possède une forme connue et qu'on peut se servir de cette information pour obtenir des méthodes d'estimation efficaces. Cette idée est très naturelle lorsque l'on s'intéresse à des jeux de données réels. La forme (ou l'allure) du graphe des observations est, en effet, naturellement dictée par le pragmatisme ou l'observation, d'autant plus lorsqu'une connaissance (physique, biologique, économique...) sur les phénomènes à l'origine de ces données vient

<sup>2</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>



conforter cette modélisation. Comme toute modélisation, l'estimation sous contrainte de forme doit être soumise à discussion dès lors qu'elle est appliquée à un problème pratique. Néanmoins il existe de nombreux cadres dans lesquels cette idée émerge naturellement.

Par exemple, concernant la contrainte de forme *monotonie*, la fertilité a tendance à décroître avec l'âge tandis que le risque de diabète a tendance à croître avec le score de précarité. Les jeux de données d'allure convexe sont présents dans de très nombreuses applications. On les retrouve en informatique (Chen and Yao, 2013), en optimisation convexe (Boyd and Vandenberghe, 2004), en reconstruction d'image (Lele et al., 1992), en économie (Kacem, 2013), en métagénomique (Allen et al., 2013) ou encore en écologie (?). La log-concavité se justifie naturellement dans les cadres (nombreux) où l'on a l'habitude d'appliquer des modèles gaussiens, exponentiels, ou de loi Gamma. L'unimodalité vient logiquement modéliser les phénomènes de pics de pollution ou de consommation d'électricité (Reboul, 1998). Enfin nous aborderons un exemple d'application en écologie dans la Partie III de ce manuscrit où la contrainte de  $k$ -monotonie est pertinente.

La plupart des travaux sur l'estimation sous contrainte de forme concerne l'estimation de densité sur  $\mathbb{R}$  ou sur un intervalle mais depuis quelques années l'estimation d'une densité discrète sous contrainte de forme a trouvé une attention particulière portée par de nombreuses applications. En effet, d'une part les temps d'observation de certains phénomènes sont souvent discrets comme l'expliquent Maathuis and Hudgens (2011), d'autre part certaines mesures sont obtenues par comptage (c'est le cas du nombre de personnes infectées par le virus Ebola dans l'étude de Breman et Johnson (2014) que l'on retrouve dans l'article de Balabdaoui et Jankowski (2015)), rendant les modèles continus inappropriés. A titre d'exemple les estimateurs discrets sous contrainte de forme ont été utilisés récemment en écologie pour aider à la préservation des ressources de pêche tandis qu'en mathématiques financières ils peuvent modéliser des risques en assurance, on pourra consulter la thèse de Koladjo (2013) et le papier de Lefevre and Loisel (2013) à ce propos.

### **Les avantages et les inconvénients par rapport aux méthodes existantes.**

De nombreuses méthodes non-paramétriques existent pour estimer des densités. On peut notamment citer les méthodes à noyaux, les forêts aléatoires, ou encore les méthodes bayésiennes. Ces méthodes sont flexibles et puissantes. Leur inconvénient majeur est d'ordre pratique; en particulier ces méthodes ne sont pas "clés-en-main". Les choix de paramètres d'échelle (estimation à noyaux), de lissage (forêts aléatoires) ou encore le choix d'une loi a priori (bayésien) sont laissés à l'utilisateur et parfois difficiles à justifier. Le calcul de ces estimateurs peut également s'avérer ardu dans certains cas : temps de calculs longs, instabilités numériques et même parfois non-convergence des algorithmes ou non-identifiabilité des modèles. En particulier la qualité d'estimation des méthodes à noyaux est parfois peu satisfaisante en présence de faibles échantillons ou de sauts et cette méthode impose des hypothèses fortes, notamment en terme de continuité, qui sont parfois impossibles à justifier voire non-pertinentes. Enfin, il arrive que les méthodes de type forêts aléatoires ou bayésiennes, très performantes en pratique, n'offrent pas de cadre théorique pour justifier les convergences des estimateurs ainsi que pour calculer des lois limites.

Une autre possibilité pour estimer une densité est de se placer dans un cadre paramétrique et donc de supposer que la densité à estimer appartient à une famille de lois usuelles (gaussiennes, Poisson, Poisson-Gamma, ...). Ces modèles présentent l'avantage de donner de nombreuses garanties théoriques du fait que de nombreux calculs sont explicites, notamment certains calculs liés à l'estimation du maximum de vraisemblance. De plus la connaissance de la loi limite et la mise en œuvre de théorèmes de normalité asymptotique

sont des atouts indéniables lorsqu'il s'agit d'effectuer par la suite des tests d'hypothèse. Les modèles paramétriques sont également en général facilement implémentables et la classique borne en  $\sqrt{n}$  pour la vitesse d'estimation montrée par Rao assure des estimateurs fortement consistants à convergence rapide. Néanmoins ces modèles sont également assez restreints et nombreux sont les jeux de données dont les tests d'adéquation à ces lois se révèlent peu concluants. La difficulté majeure réside donc dans la nécessité de choisir un modèle adéquat aux données et de justifier ce choix.

La contrainte de forme peut être vue comme un compromis entre l'estimation non-paramétrique classique et l'estimation paramétrique. Citons Kim et al. (2016) à ce propos :

*« Nonparametric shape constraints such as monotonicity, convexity or log-concavity have the potential to offer the practitioner the best of both the nonparametric and parametric worlds. »*

La contrainte de forme allie en effet la grande flexibilité propre à la dimension infinie et la facilité d'utilisation des modèles paramétriques; les estimateurs de maximum de vraisemblance par exemple y sont généralement explicitables comme dans les modèles paramétriques, aucun choix de fenêtre ou d'ajustement n'est demandé à l'utilisateur et le cadre est propice à la justification théorique des méthodes et à la mise en œuvre d'algorithmes rapides, stables et dans certains cas exacts. Ces contraintes ne sont pas très restrictives puisque de très nombreux modèles paramétriques sont inclus dans les modèles à contraintes de forme les plus usuels. De plus dans le cas continu les résultats obtenus pour les estimateurs sous contrainte de forme sont globalement plus robustes à la non-régularité que ceux obtenus par méthode à noyaux (voir Birgé (1997)). Enfin une propriété fréquente partagée par de nombreuses méthodes sous contrainte de forme est leur adaptativité aux données. En effet il n'est pas rare de constater que la vitesse d'estimation s'améliore en présence de jeux de données présentant une certaine propriété. Ce point sera abordé plus en détail dans la section 1.3.

Pour toutes ces raisons l'estimation sous contrainte de forme peut représenter une alternative intéressante aux modèles paramétriques lorsqu'ils s'avèrent trop restrictifs, aux méthodes à noyaux en l'absence de régularité ou aux forêts aléatoires et au cadre bayésien lorsque le problème nécessite des justifications théoriques.

Remarquons toutefois que d'un point de vue pratique l'estimation par noyaux est plus performante que l'estimation sous contrainte de forme en présence de fonctions fortement régulières, ainsi que le souligne Birgé (1997). Quelques auteurs, dont Mammen (1991) ou Chen et Samworth (2013) proposent d'allier les deux méthodes en imposant par exemple une contrainte de forme dans une estimation à noyau. Ces estimateurs ne seront pas davantage développés plus dans le cadre de cet état de l'art mais plus de détails sont donnés dans l'Annexe A.

## **La contrainte de forme, un domaine plus général**

Si dans cette section il a été choisi de ne dresser un état de l'art que de l'estimation de densité sous contrainte de forme, il est en revanche indispensable de préciser que la contrainte de forme recouvre en réalité un domaine plus large que la simple inférence de densité. Ce paragraphe vient de façon complémentaire donner un rapide panorama d'autres types d'approche en statistique sous contrainte de forme. Le livre de Groeneboom and Jongbloed (2014) fournit de très complets développements de chacune de ces thématiques. D'autres exemples classiques y sont abordés tels les problèmes de Monotone Hazard Rate ou

le problème de corpuscule de Wicksell. Trois cadres classiques sont développés ci-dessous. Le premier, celui de la régression, est très populaire en raison de sa grande modularité et des nombreuses applications. Les deux autres cadres sont des exemples d'un type de problème appelé *problèmes inverses*.

### Régression sous contrainte de forme

Dans ce modèle on observe un  $n$ -échantillon  $Y_1, \dots, Y_n$  et on s'intéresse à un vecteur  $\mu \in \mathbb{R}^n$  inconnu. Les deux sont liés par la relation suivante :

$$Y_i = \mu_i + \varepsilon_i$$

où  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$  est un vecteur de variables aléatoires i.i.d et centrées, souvent gaussien, dit vecteur de bruit. C'est sur le vecteur  $\mu$  que porte la contrainte de forme. Dans les cas particuliers où  $\mu$  est un vecteur respectivement monotone ou convexe on parlera de *régression isotonique* ou de *régression convexe*.

### Données censurées

Un thème classique en analyse de survie est d'arriver à contourner un problème de censure. Dans ce modèle  $X_1, \dots, X_n$  est un échantillon i.i.d. de fonction de distribution  $F$  que l'on cherche à estimer. Une contrainte liée à l'expérience empêche d'observer directement les  $X_i$ . On observe à la place un couple de variables aléatoires  $(T_i, \mathbb{1}_{X_i \leq T_i})$  où les  $T_i$  sont des variables i.i.d. et indépendantes des  $X_i$  qui représentent les temps d'observation. La fonction de distribution  $F$  étant par définition croissante, il y a intérêt à inclure une contrainte de monotonie dans les définitions des divers estimateurs considérés.

### Problèmes de déconvolution

On s'intéresse à un échantillon  $X_1 \dots X_n$  de fonction de répartition commune  $F$  que l'on cherche à estimer. Dans ce modèle l'échantillon observé n'est pas  $X_1 \dots X_n$  mais  $Z_1 \dots Z_n$  avec  $Z_i = X_i + Y_i$  où  $Y_i$  sont i.i.d de loi connue  $g$  et indépendants de l'échantillon d'intérêt  $(X_1, \dots, X_n)$ . La densité  $h$  commune aux  $Z_i$  s'écrit alors comme un produit de convolution :

$$h(z) = (g * dF)(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(z-x)dF(x).$$

L'estimation de  $F$  revient donc à un problème de déconvolution :

$$F(x) = \frac{d}{dx} \int_0^x p(x-z)h(z)dz$$

où  $p$  est choisi de telle sorte que  $(p * g)(x) = x$  (par exemple si  $g(x) = \exp(-x)$  on pose  $p(x) = 1 + x$ ). Là encore la croissance de la fonction de distribution  $F$  incite à inclure une contrainte de monotonie dans la définition des estimateurs.

## Les estimateurs et les algorithmes

Le premier estimateur défini dans le cadre de la contrainte de forme est appelé l'estimateur de Grenander et calcule un estimateur sous contrainte de décroissance en déterminant sa fonction de répartition comme le plus petit minorant concave de la fonction de répartition empirique. Il a été montré (Grenander, 1956) que cet estimateur est à la fois l'estimateur du maximum de vraisemblance sous la contrainte de monotonie et l'estimateur des moindres carrés sous cette même contrainte. Plus généralement les estimateurs développés dans

le domaine de la contrainte de forme sont soit des estimateurs de maximum de vraisemblance (MLE) soit des estimateurs des moindres carrés (LSE) choisis comme les projetés de l'estimateur empirique sur un ensemble convexe.

## L'estimateur de Grenander et l'algorithme PAVA

Rappelant que la dérivée, lorsqu'elle existe, d'une fonction concave (définie sur un intervalle) est décroissante (et respectivement la dérivée d'une fonction convexe est croissante), Grenander (1956) propose d'estimer une densité continue  $f$  sous contrainte de décroissance (respectivement croissance) en estimant sa fonction de répartition  $F$  par une fonction concave (respectivement convexe). Il propose alors d'estimer  $F$  par la fonction  $U$  définie comme le plus petit majorant concave (respectivement le plus grand minorant convexe) de la fonction de répartition empirique  $F_n$ . Le graphique ci-dessous illustre cette méthode d'estimation.

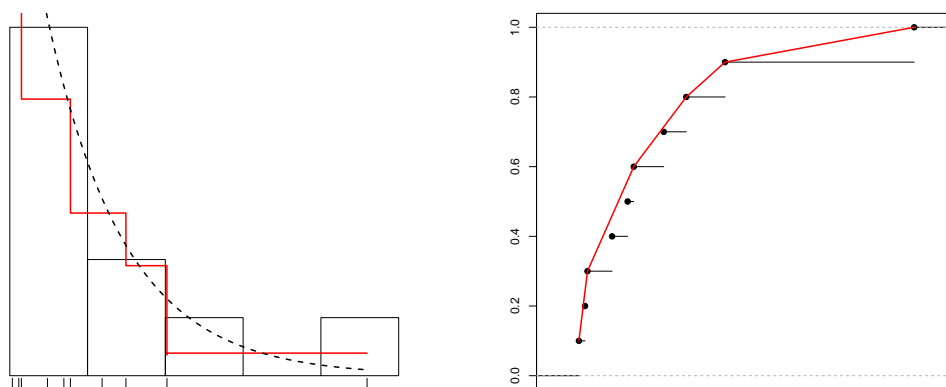


Figure 1.7: Estimateur de Grenander et estimateur empirique (à gauche) et leurs fonctions de répartition (à droite). En trait plein noir l'estimateur empirique, en rouge l'estimateur de Grenander. En "-" la vraie distribution.

L'algorithme PAVA, pour *Pool Adjacent Violator Algorithm* est un algorithme fondateur de l'estimation sous contrainte de forme. Il a été introduit par Barlow et al. (1972). Cet algorithme calcule l'estimateur de Grenander sous contrainte de monotonie de manière particulièrement efficace. Il renvoie la fonction de répartition  $U$  de l'estimateur de Grenander, c'est-à-dire le meilleur estimateur sous contrainte de croissance. La fonction  $U$  est alors définie comme le plus grand minorant convexe de la fonction de répartition empirique. Son principe est le suivant : étant donné un échantillon  $X_1, \dots, X_n$  et la fonction de répartition empirique associée  $F_n$  on peut tracer à l'étape 1 la courbe  $U_1$  affine par morceaux située en dessous de  $F_n$  et qui approche le mieux  $F_n$  au sens de la norme infinie. Cette courbe est obtenue simplement en reliant les limites à gauche des points de discontinuité de  $F_n$ . A chaque boucle  $i$ , l'algorithme supprime ensuite un nœud  $r_i$  de la fonction  $U_i$  ambiante et remplace les deux portions de droite autour du nœud  $r_i$  par une seule jusqu'à ce que la fonction  $U_i$  soit convexe. Mair et al. (2009) ont développé un package R<sup>3</sup> pour le calcul de cet estimateur.

<sup>3</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/isotone/index.html>

Les fonctions unimodales de mode fini pouvant être perçues comme la concaténation d'une fonction croissante et d'une fonction décroissante il est possible d'adapter le PAVA pour calculer des estimateurs sous contrainte d'unimodalité. Pour plus d'information sur cet algorithme il est possible de consulter l'Annexe A.

## Les autres estimateurs de maximum de vraisemblance, des moindres carrés, et leurs algorithmes

### Définition des MLE et des LSE

Les fonctions vérifiant une même contrainte de forme présentent parfois l'avantage de vérifier également une caractérisation sous forme de mélange. C'est le cas des fonctions monotones, convexes ou plus généralement  $k$ -monotones de la variable réelle pour lesquelles il a été montré (Williamson, 1955) la décomposition suivante :

$$\forall x \geq 0, g(x) = \int_0^\infty (t-x)_+^{k-1} d\mu(t). \quad (1.1)$$

où  $\mu$  désigne une mesure borélienne par rapport à la mesure de Lebesgue. Nous montrons dans le Chapitre 4 une décomposition analogue dans le cas discret. Une telle décomposition permet d'obtenir l'existence d'un estimateur du maximum de vraisemblance (dit *MLE*) de façon immédiate grâce au résultat de Lindsay (1995) sur les modèles de mélange. La définition du maximum de vraisemblance dans le cas des distributions log-concaves a nécessité le développement d'outils plus spécifiques.

Les fonctions satisfaisant une même contrainte forment souvent des espaces convexes et fermés ce qui incite à considérer un estimateur des moindres carrés. Plus formellement soit une certaine contrainte de forme et soit  $\mathcal{C}$  l'ensemble des fonctions (ou densités) vérifiant cette contrainte. L'estimateur des moindres carrés de  $p^*$  est défini ainsi :

$$\hat{p}_n = \operatorname{argmin}\{\|f - \tilde{p}_n\|_2, f \in \mathcal{C}\}$$

où  $\|\cdot\|_2$  désigne la norme quadratique usuelle et  $\tilde{p}_n$  l'estimateur empirique de  $p^*$  :

$$\tilde{p}_n(j) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}_{\{X_i=j\}}.$$

La preuve de l'existence et de l'unicité de cet estimateur peut être immédiate, c'est le cas dans le cas discret si l'ensemble  $\mathcal{C}$  est convexe et fermé grâce au Théorème de projection sur un convexe fermé de Banach. Dans le cas continu en revanche elle peut être délicate comme c'est le cas pour l'estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie.

### L'Algorithme de Réduction de Support

Le point de départ du calcul effectif des estimateurs discrets et continus sous contrainte de convexité, de  $k$ -monotonie et de log-concavité (de type MLE ou LSE) est leur caractérisation en un mélange d'un nombre fini de splines. Ce nombre  $m$  est inconnu mais permet de ramener le problème de calcul de l'algorithme à un problème de minimisation du type :

$$\hat{\theta} = \sup_{\theta_1, \dots, \theta_m \geq 0} \Psi(\theta_1, \dots, \theta_m)$$

où  $m$  est fixé et  $\Psi$  désigne une fonctionnelle convexe. L'Algorithme de Réduction de Support est très efficace pour calculer de tels problèmes de minimisation. Il appartient à la famille des algorithmes de type *vertex direction* et a été introduit par Groeneboom et al. Groeneboom et al. (2008). Le principe de cet algorithme est celui de tous les algorithmes de descente de gradient, la différence résidant dans le caractère positif de la contrainte. Il

s'agit de prendre à chaque fois une direction qui fait décroître le gradient de  $\Psi$ .

L'Algorithme de Réduction de Support se compose de boucles de deux étapes, chacune consistant à mettre à jour le support ambiant  $\Theta_i$  jusqu'à obtention du support de l'estimateur. Plus précisément les deux étapes sont les suivantes :

- **L'étape de minimisation** durant laquelle l'algorithme ajoute un point au support ambiant puis calcule un minimiseur sur toutes les suites (éventuellement négatives) du nouveau support. Le point est choisi pour réduire la dérivée directionnelle.
- **L'étape d'élagage** durant laquelle le support est réduit d'un point, également choisi pour réduire la dérivée directionnelle. Cette étape est répétée jusqu'à l'obtention d'une suite de poids positifs. L'algorithme s'arrête alors en cas de convergence ou retourne à l'étape de minimisation.

Le cas discret et le cas continu se distinguent alors :

**Dans le cas discret,** la recherche de l'estimateur  $\hat{p}$  est effectuée en recherchant d'abord les estimateurs  $\hat{p}_{L_m}$  sous contrainte de forme restreints sur le support  $\Theta_m = \{0, \dots, L_m\}$ , ( $L_m$ ) désignant une suite croissante d'entiers. Ces estimateurs sont calculés grâce à l'Algorithme de Réduction de Support. Par ailleurs le calcul d'un critère d'arrêt (voir par exemple le chapitre 5), c'est-à-dire d'une caractérisation de l'estimateur  $\hat{p}$  calculable en pratique, assure l'arrêt de l'algorithme lorsque l'estimateur  $\hat{p}_{L_m}$  est égal au vrai estimateur  $\hat{p}$  et non, comme c'est le cas habituellement dans les algorithmes de descente de gradient, quand le critère de minimisation ne décroît plus. Ainsi dans le cas discret l'utilisation de l'Algorithme de Réduction de Support additionné d'un critère d'arrêt permet le calcul exact de  $\hat{p}$ . Dans la pratique les temps de calculs sont relativement courts.

**Dans le cas continu,** en revanche, lors de la recherche d'estimateurs sous contrainte de convexité et de  $k$ -monotonie, une question délicate consiste à choisir des grilles de valeurs  $\Theta_m = \{\theta_1, \dots, \theta_m\}$  sur lesquelles appliquer l'Algorithme de Réduction de Support. En effet la minimisation des dérivées directionnelles ne peut s'effectuer que sur un ensemble fini de valeurs. Cette étape est répétée avec de nouvelles grilles jusqu'à ce que le gradient ne décroisse plus. L'algorithme final a été développé par Groeneboom et al. Groeneboom et al. (2001) dans le cas convexe, et Balabdaoui Balabdaoui (2004) dans le cas  $k$ -monotone. Dümbgen et al. Dümbgen et al. (2007) ne rencontrent pas cette difficulté dans le cas log-concave, les points du mélange de leur MLE étant inclus dans l'ensemble  $\{X_1, \dots, X_n\}$ . Dans tous ces cas l'utilisation d'algorithme de type *vertex direction* entraîne des calculs d'une grande rapidité.

## Résultats classiques en contrainte de forme

L'estimation sous contrainte de forme présente globalement les mêmes enjeux que l'estimation de densité en général. Il s'agit à la fois d'étudier la qualité d'estimation asymptotique (consistance, lois limites, analyse de la vitesse de convergence) et de garantir leur concentration non-asymptotique (bornes oracles, inégalités de Marshall). A ces enjeux statistiques généraux s'ajoutent ceux spécifiques de la contrainte de forme, en particulier celui d'être capable de montrer une robustesse d'estimation dans le cas où la vraie densité ne présente pas la forme considérée et de justifier la pertinence de la contrainte choisie dans le cadre d'une application. Ce dernier point peut être discuté au moyen de tests statistiques. Cette section met en lumière les points communs entre les différents estimateurs sous contrainte de forme.

## Résultats asymptotiques

### Consistance

La contrainte de forme offre un cadre propice à la justification théorique de la consistance des estimateurs. Les diverses notions de consistance usuellement montrées en contrainte de forme sont classiques. Les estimateurs sous contrainte, lorsqu'il existent, sont en général consistants en probabilité, en norme  $\mathcal{L}^p$  ou pour la distance de Hellinger. L'estimateur de Grenander est même localement uniformément consistant, c'est-à-dire uniformément consistant sur les intervalles compacts (excluant 0). En revanche les auteurs ont été confrontés à quelques problèmes d'inconsistance :

- l'estimateur de Grenander est inconsistant en 0. La loi limite de l'estimateur  $\hat{p}_n(0^+)$  est en effet de la forme  $p^*(0)/U$  où  $U$  est une variable aléatoire de loi uniforme sur  $[0, 1]$ .
- Les estimateurs de fonctions unimodales sont inconsistants au mode. Ce phénomène appelé *picking* est développé dans l'Annexe A.
- Lorsque la vraie densité  $p^*$  s'écrit comme un mélange de splines comme à l'équation (10) l'estimation des points du mélange (ou *nœuds*) n'est pas consistante.

Les deux premiers problèmes sont liés à l'uniforme continuité de  $p^*$  et n'existent pas dans le cas discret. Dans ce cadre une propriété de consistance forte usuellement montrée est la comparaison à l'estimateur empirique.

### Vitesse de convergence et lois limites

Développer les distributions limites pour les estimateurs de densité sous contrainte de forme est un problème relativement difficile. La première difficulté provient du fait que les distributions limites ne sont pas gaussiennes. De plus les estimateurs typiques de la contrainte de forme ne vérifient pas les hypothèses de normalité asymptotique des estimateurs du maximum de vraisemblance classiques. En particulier ce ne sont pas des estimateurs de type moment et les lois limites ne peuvent pas s'obtenir par le Théorème Central Limite ou des application de la Méthode-Delta. Plus de précisions à propos de ces résultats classiques sont données par Shao (2003).

Cependant les lois limites des estimateurs sous contrainte de forme sont généralement explicitables. Dans le cas continu elles dépendent des primitives de mouvements browniens. Le résultat fondamental suivant a notamment été montré par Rao (1969) : l'estimateur de Grenander converge vers la distribution de Chernoff définie comme la fonction de distribution de la variable aléatoire suivante :

$$Z = \operatorname{argmax}_{s \in \mathbb{R}} (W(s) - s^2)$$

où  $W$  est un mouvement brownien bilatéral tel que  $W(0) = 0$ .

Dans le cas discret Balabdaoui et al. (2014) ont montré que la loi limite de l'estimateur des moindres carrés sur l'espace des suites convexes s'écrivait comme le projeté d'un processus gaussien sur l'ensemble des suites convexes.

Les vitesses de convergence sont de nature très différente dans le cas discret et dans le cas continu. Le premier cas est souvent considéré comme un cadre semi-paramétrique en raison des convergences de type paramétrique. La borne classique en  $1/\sqrt{n}$  pour la vitesse quadratique est en effet classique dans les modèles à contrainte de forme discrets.

Dans le cas des lois continues en revanche les vitesses de convergence sont plus lentes. L'estimateur de Grenander, par exemple, converge à vitesse  $n^{-1/3}$  vers la distribution de Chernoff, tandis que les estimateurs sous contrainte de  $k$ -monotonie continue présentent une vitesse en  $n^{-k/(2k+1)}$ . Les lois asymptotiques des dérivées de ces estimateurs sont également fréquemment étudiées, leurs vitesses de convergence sont d'autant plus lentes que le degré de dérivation est élevé.

## Résultats non-asymptotiques

### Inégalités de Marshall

Une première façon de mesurer la qualité d'estimation non asymptotique, fréquemment utilisée dans le cadre de la contrainte de forme, est d'établir des inégalités de Marshall. Soit  $\mathcal{F}$  l'ensemble des fonctions satisfaisant une certaine contrainte de forme. Si  $\mathbb{F}_n$  désigne la fonction de répartition empirique et  $\widehat{F}_n$  la fonction de répartition associée à l'estimateur  $\widehat{p}_n$ , c'est-à-dire sa primitive, l'inégalité de Marshall classique est de la forme suivante :

$$\forall F \text{ primitive d'une fonction de } \mathcal{F} : \|\widehat{F}_n - F\|_\infty \leq \alpha \|\mathbb{F}_n - F\|_\infty.$$

La constante  $\alpha$  désigne alors un réel strictement positif fixé, typiquement  $\alpha = 1$  ou  $\alpha = 2$ . Une inégalité de Marshall du second ordre correspond alors à une inégalité du type :

$$\|\widehat{H}_n - H\|_\infty \leq \alpha \|\mathbb{H}_n - H\|_\infty$$

où  $\widehat{H}_n$ ,  $\mathbb{H}_n$  et  $H$  désignent les primitives respectives de  $\widehat{F}_n$ ,  $\mathbb{F}_n$  et d'une fonction  $F$  elle-même primitive d'une fonction de  $\mathcal{F}$ .

De telles inégalités peuvent servir à étudier la loi limite de la variable  $\|\widehat{F}_n - \mathbb{F}_n\|_\infty$  (inégalités de Kiefer-Wolfowitz) et en déduire des tests de contrainte de forme. Dans le cas continu l'utilisation de la continuité et des intégrales de Lebesgue rendent l'étude plus aisée que dans le cadre discret.

### Des bornes oracles adaptatives

Celle-ci est souvent évaluée en terme de risque quadratique :

$$\mathcal{R}^2(p^*, \widehat{p}) = \mathbb{E}_{p^*} [\|p^* - \widehat{p}\|_2^2]$$

ou de Hellinger :

$$H^2(p^*, \widehat{p}) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} (\sqrt{p^*(t)} - \sqrt{\widehat{p}(t)})^2 p^*(t) dt$$

avec  $p^*$  la vraie densité et  $\widehat{p}$  un estimateur sous contrainte de forme. La première distance est usuellement utilisée pour les estimateurs des moindres carrés tandis que la seconde est plutôt utilisée pour les estimateurs de maximum de vraisemblance dans les modèles continus.

Les auteurs cherchent à montrer des bornes de risques globales optimales au sens oracle ou au sens minimax (voir Chapitre 3 pour un rappel sur ces notions). Ces bornes globales, et de surcroît leur optimalité, sont parfois difficiles à montrer lorsque l'estimateur  $\widehat{p}$  n'a pas d'expression formelle ou lorsque l'espace sur lequel il est défini n'est pas compact. En effet, elles découlent souvent de calculs d'entropies métriques et d'entropies à crochet (voir Chapitre 3 également). De plus, elles sont pessimistes car elles contrôlent le pire des cas et le risque pour certains  $p^*$  peut être bien plus faible que ces bornes. Une façon de contrer ces problèmes est de chercher des bornes locales, c'est-à-dire ici des bornes qui dépendent



de la position de la vraie densité  $p^*$ .

Une propriété fréquente des estimateurs sous contrainte de forme -tous cadres confondus y compris la régression- est alors leur *adaptativité*. Le terme *adaptativité* est généralement utilisé en contrainte de forme pour décrire le fait que la vitesse de convergence d'un estimateur, par exemple au sens du risque quadratique, s'adapte à la distance de la vraie densité  $p^*$  par rapport à *un bord* de l'espace métrique concerné, et à la *dimension* du bord, dans un sens qui dépend du contexte.

Dans le cas particulier où la contrainte est la monotonie (respectivement la convexité), et le cadre est celui de la régression, les vecteurs monotones sont constants (respectivement affines) par morceaux, ils sont donc caractérisés par la positivité du vecteur de leurs pentes (respectivement laplaciens). *Un bord* peut alors s'entendre comme la restriction de l'espace des vecteurs pentes à un sous-espace dont les coordonnées selon certaines directions sont nulles, sa *dimension* équivaut au nombre de directions en question. Il a alors été montré (voir Bellec (2016), Bellec et Tsybakov (2016), Chatterjee et al. (2015) et Guntuboyina et Sen (2014)) que la vitesse de convergence dépend du nombre de morceaux (respectivement de changement de pentes) nécessaire pour approcher le vrai vecteur  $\mu^*$ . Une propriété d'adaptativité semblable a été récemment montrée dans le cadre de l'estimation de densité log-concave par Kim et al. (2016). La vitesse de convergence de l'estimateur du maximum de vraisemblance s'adapte au nombre de morceaux affines nécessaires pour approcher suffisamment le logarithme de la vraie densité  $p^*$ .

Dans tous ces travaux les estimateurs vérifient cette propriété commune : leur vitesse d'estimation se comporte au voisinage des bords de l'espace métrique de la même manière que les estimateurs construits sous la connaissance de l'appartenance de  $p^*$  à ces bords. Cette propriété d'adaptativité est développée au Chapitre 7 et étendue à la contrainte de  $k$ -monotonie.

## Tester ces contraintes de forme

Si l'estimation d'une densité sous contrainte de forme est très naturelle dans de nombreux domaines d'application, l'utilisation de cette méthode peut être malencontreuse lorsqu'aucune information sur le problème ne vient conforter le choix de la forme considérée. Dans ce cas l'existence d'un test spécifique à la contrainte de forme choisie est un moyen d'évaluer la pertinence du modèle sous contrainte. Quelques tests de contraintes de forme ont ainsi vu le jour, motivés par l'idée d'assurer une légitimité aux méthodes d'estimation sous contrainte de forme. Les plus anciens concernent l'estimation de densités continues et monotones, unimodales ou convexes mais plus récemment l'essor des données de comptage a justifié la multiplication de tests pour des densités discrètes comme l'attestent les très récents papiers de Diakonikolas et al. (2015) ou Cannonne et al. (2016).

Les méthodes considérées sont diverses. Certains tests sont basés sur la connaissance d'une loi asymptotique de l'estimateur sous contrainte de forme, ou d'une fonctionnelle de cet estimateur. Le procédure de test rejette alors l'hypothèse nulle lorsque la distance des sommes cumulées de l'estimateur empirique et de l'estimateur sous contrainte de forme est trop importante. C'est l'idée sous-jacente aux tests de Balabdaoui et al. (2017) dans le cas convexe discret, Akakpo et al. (2014) dans le cas monotone continu ou de Hartigan et Hartigan (1985) dans le cas unimodal continu. Cette approche présente trois principales difficultés. Premièrement elle nécessite d'être capable de calculer la loi limite de l'estimateur des moindres carrés; ce point n'est pas évident en l'absence de théorèmes de

normalité asymptotique. De plus ces lois, non gaussiennes, doivent pouvoir être implémentées efficacement. Enfin les vitesses d'estimation du cas continu, relativement lentes, nécessitent une taille d'échantillon conséquente pour assurer les bonnes propriétés du test en pratique.

Un autre point de vue consiste à tester la contrainte de forme choisie (par exemple la monotonie) contre un modèle paramétrique, c'est le cas notamment dans l'article de Durot et Reboul (2010) dans le cas de la monotonie continue. Le test est alors choisi de telle sorte que l'on rejette lorsque l'estimateur sous contrainte de forme se situe *trop loin* (pour une norme considérée, souvent  $\mathcal{L}_p$ ) du meilleur estimateur dans la famille paramétrique.

D'autres auteurs choisissent de ne pas considérer l'estimateur sous contrainte de forme. Là encore de nombreuses méthodes existent. Certains tests se basent sur l'existence d'autres estimateurs non-paramétriques tels les estimateurs à noyaux. Cette méthode a par exemple été développée par Silverman (1983) dans le cas de l'unimodalité et de la multimodalité. Dans le cadre discret il est également possible d'estimer la loi d'une statistique de test par méthode Bootstrap. C'est l'idée du test de convexité publié par Durot et al. (2017) pour tester la convexité d'une loi discrète. En effet sous l'hypothèse  $H_0$  la statistique de test suivante :

$$T_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \min_{2 \leq j \leq X_{\max}} (\tilde{p}_n(j+1) - 2\tilde{p}_n(j) + \tilde{p}_n(j-1)).$$

où  $\tilde{p}_n$  désigne l'estimateur empirique, converge vers une loi gaussienne que l'on peut approcher par méthode Bootstrap. Pour finir Scott et al. (2013) dans le cas de la monotonie réelle et Li (2015) dans un cadre plus général basent leurs tests sur des modèles bayésiens.

Dans le cas particulier de la  $k$ -monotonie discrète, un test généralisant celui du livre de Durot et al. (2017) est proposé dans le Chapitre 10.

## Conclusion

L'estimation d'une densité sous contrainte de forme constitue une branche de l'estimation non-paramétrique qui présente de multiples avantages. Elle intervient naturellement dans des cadres divers et l'existence de nombreux tests de forme justifient son utilisation. Elle peut être une alternative flexible et riche aux modèles paramétriques parfois trop restreints ou aux modèles à noyaux dont l'utilisation est délicate en l'absence de régularité. Sa mise en pratique est très simple, ne nécessitant aucun paramètre ou aucune loi a priori à décider pour l'utilisateur et les algorithmes mis en œuvre, dérivés du PAVA ou des algorithmes de type *vertex direction*, sont en général stables et rapides. En outre le cadre est propice à la justification théorique des résultats et notamment au calcul de bornes de risques adaptatives ou de lois limites non-gaussiennes. Enfin la multiplication de jeux de données de comptage ou de séries temporelles nécessite la mise en place de modèles spécifiques pour les densités discrètes ce qui explique l'émergence actuelle d'estimateurs de contrainte de forme sur  $\mathbb{N}$ .

# Chapter 2

## Vue d'ensemble de la thèse

### Version Française

Dans cette thèse nous présentons une méthode non-paramétrique pour l'estimation d'une densité discrète  $p^*$  sous une certaine contrainte de forme, la  $k$ -monotonie ( $k$  désignant un entier supérieur à 2 fixé), qui est une généralisation de la convexité, aussi appelée 2-monotonie. Cet entier  $k$  constitue un indicateur du degré de creux d'une fonction convexe. La thèse s'articule en trois parties, en plus d'une introduction, de la conclusion et d'une annexe.

L'objet de la **Partie I** est l'étude de l'existence et de l'unicité de l'estimateur des moindres carrés sur l'espace des fonctions (ou probabilités) discrètes  $k$ -monotones ainsi que de ses propriétés statistiques. Dans la **Partie II** une borne adaptative<sup>1</sup> pour le risque quadratique lié à cet estimateur est développée. La **Partie III** propose une application en écologie pour l'estimation du nombre d'espèces dans une population basée sur des tests de  $k$ -monotonie.

Ayant pour objet principal l'étude d'un estimateur des moindres carrés d'une densité discrète sous contrainte de  $k$ -monotonie,  $k$  quelconque, cette thèse est naturellement liée aux deux travaux de thèse suivants déjà évoqués dans l'état de l'art :

- La thèse de Fadoua Balabdaoui qui traite de l'estimation d'une densité continue sous contrainte de  $k$ -monotonie.
- La thèse de François Koladjo qui a étudié un estimateur des moindres carrés d'une densité discrète sous contrainte de convexité, c'est-à-dire pour  $k = 2$ , ainsi qu'une application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population.

La première partie de la thèse notamment, présente de grandes analogies avec les résultats trouvés dans ces deux travaux. Néanmoins nous expliquerons en quoi l'hypothèse de régularité dans le cas continu d'une part, et des difficultés nouvelles dès que  $k$  est supérieur à 3 d'autre part, ont entraîné l'impossibilité de déduire la plupart de nos résultats directement des leurs. La seconde partie présente des résultats sur les bornes de risques adaptatives<sup>1</sup>. De tels résultats n'avaient, à notre connaissance, jamais été montrés dans le cadre de l'estimation de densité sous contrainte de  $k$ -monotonie, discrète ou continue. Enfin, la dernière partie généralise le travail de Koladjo et ses co-auteurs, concernant l'estimation du nombre d'espèces dans une population, à tout  $k \geq 3$ , puis se focalise sur une nouvelle question, celle de choisir l'entier  $k$  sur la base des observations par une procédure de tests emboîtés.

---

<sup>1</sup>Voir Chapitre 3 pour plus de précisions sur ces notions

La première partie a donné lieu à un article (Giguelay, 2017) publié dans *Electronic Journal of Statistics* ainsi qu'à la création du package `pkmon`<sup>1</sup> disponible sur le CRAN. L'essentiel des résultats des deux parties suivantes fera l'objet d'articles prochainement soumis. Enfin la dernière partie généralise des résultats de mon stage de Master 2 (Giguelay, 2014) ainsi qu'une partie d'un travail commun réalisé avec Durot, Huet, Koladjo et Robin que l'on peut trouver au chapitre *Convex Estimation* du livre *Capture and Recapture* (Durot et al., 2017), disponible en annexe.

Les Parties II et III sont indépendantes et reposent sur l'estimateur des moindres carrés sous-contrainte de  $k$ -monotonie présenté à la Partie I. Chaque partie a été rédigée afin de pouvoir être lue de manière (relativement) indépendante, il s'en suit donc quelques répétitions. Toutes les notations peuvent être retrouvées dans l'Index. Le présent chapitre est un résumé des différentes parties.

## Première Partie : Estimation d'une densité discrète sous contrainte de $k$ -monotonie

Soit  $k$  un entier supérieur à 2 fixé. Cette partie traite de l'estimation non-paramétrique d'une densité discrète sous contrainte de  $k$ -monotonie dont la définition est donnée à la **Section 4.1**. Deux estimateurs des moindres carrés ont été définis, puis implémentés en pratique.

Cette partie est composée des chapitres 4 à 6 et est organisée comme suit :

- Au **Chapitre 4** les fonctions  $k$ -monotones discrètes et continues sont introduites et leurs principales propriétés sont rappelées. Ces fonctions sont caractérisées par une écriture dans une base de splines. La base de splines, montrée initialement par Lefevre and Loisel (2013), est explicitée. Ce chapitre revient également rapidement sur les objectifs de l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie dans le cas des fonctions discrètes ou des fonctions continues.
- Le **Chapitre 5** propose d'étudier deux estimateurs des moindres carrés :
  - Dans la **Section 5.1** l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie est défini. Il s'agit du projeté de l'estimateur empirique sur l'ensemble des séquences  $k$ -monotones, son existence et son unicité sont montrées. Les propriétés sur sa forme (masse, support) ainsi que ses propriétés asymptotiques sont étudiées, notamment en comparant sa qualité d'estimation avec celle de l'estimateur empirique. La vitesse d'estimation, mesurée en terme d'erreur quadratique, est de type paramétrique, avec une décroissance en  $\sqrt{n}$ , ce qui est très différent des vitesses obtenues dans le cas des densités continues. Une caractérisation de l'estimateur en fonction de ses primitives permet de déduire certains résultats pour  $k \geq 3$ , du cas convexe ( $k = 2$ , voir Durot et al. (2013)) par récurrence. C'est le cas notamment des résultats asymptotiques, comme par exemple ceux énoncés au Théorème 22. Néanmoins, des différences surviennent entre le cas convexe et la  $k$ -monotonie, pour  $k \geq 3$ . La première différence provient du fait que la projection d'une probabilité discrète sur l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones n'est -en général- pas une probabilité dès que  $k > 2$ .
  - Dans la **Section 5.2** un second estimateur des moindres carrés est défini, comme la projection de l'estimateur empirique sur l'espace des probabilités  $k$ -monotones. Ce dernier est noté  $\hat{p}^k$ . Notons que dans le cas convexe les

---

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

- deux estimateurs étaient confondus . De plus, lorsque  $k \geq 3$ , la nature des outils nécessaires pour la preuve de certains résultats diffère. Les propriétés concernant les supports des estimateurs notamment, ont nécessité de contrôler la décroissance des queues de distribution des fonctions  $k$ -monotones, tandis que dans le cas convexe une troncature suffisait.
- La **Section 5.4** est consacrée à l’implémentation pratique des estimateurs. Ces derniers étant définis comme les lieux du minimum d’un critère convexe et positif sur un ensemble fini, l’algorithme choisi pour leur calcul est basé sur l’Algorithme de Réduction de Support introduit par Groeneboom et al. (2008) et rappelé dans l’état de l’art. Cet algorithme de descente de gradients renvoie le meilleur estimateur des moindres carrés sur un support fini et s’arrête si cet estimateur vérifie une propriété caractéristique de l’estimateur des moindres carrés appelée aussi *critère d’arrêt*. Le critère d’arrêt est explicité pour tout  $k \geq 2$ . Dans le cas où  $k \in \{3, 4\}$  le nombre de vérifications à effectuer ne dépend pas des coefficients de l’estimateur empirique, mais seulement du maximum de son support.
  - La **Section 5.5** présente des résultats de simulation mis en œuvre pour valider la qualité d’estimation de nos estimateurs. Elle compare l’estimateur des moindres carrés avec l’estimateur empirique sur des données simulées. Les critères choisis pour mesurer la qualité des estimateurs sont la norme quadratique, la norme en variation totale, la norme de Hellinger et les erreurs de prédiction de l’entropie, de la variance ou de la masse en 0.
- Le **Chapitre 6** regroupe toutes les preuves de cette partie. Il est rédigé en anglais.
  - Enfin une courte conclusion résume les résultats obtenus.

## Deuxième Partie : Bornes de risque

Cette partie traite du contrôle du risque quadratique lié à l’estimateur  $\hat{p}^k$  défini à la Partie I. Ce contrôle est évalué de façon non-asymptotique sous la forme de bornes de type oracle<sup>1</sup> locales. La partie est structurée en deux chapitres :

- Le **Chapitre 7** présente le résultat principal de ce travail : une borne de risque pour  $\hat{p}^k$ . Ce chapitre est organisé ainsi :
  - La **Section 7.1** est une section introductive. Elle dresse un état de l’art concernant l’étude de bornes de risque adaptatives de type oracle en contrainte de forme. Ce sujet d’étude est très récent, tous les papiers considérés ont moins de trois ans. L’objectif de ce chapitre, en particulier, est d’étendre certains résultats montrés par Bellec (2016) à l’estimation de densités  $k$ -monotone discrètes. La majeure partie des articles existants considère le cadre de la régression et s’appuie sur une formulation variationnelle<sup>1</sup> introduite par Chatterjee (2014) ainsi que des inégalités de concentration liées à des calculs d’entropie<sup>1</sup>. Un plan de la preuve du résultat principal est donné; elle est basée sur ces mêmes outils.
  - Le résultat principal est énoncé à la **Section 7.2**. Il s’agit d’une borne de type oracle locale -elle dépend de la position de la vraie densité  $p^*$ - moyenne ainsi que d’une variante en déviation<sup>1</sup>. Un énoncé général est donné dans le cas où aucune information sur  $p^*$  n’est disponible, puis un second dans le cas où l’on suppose que le support de  $p^*$  est fini et connu. Cette borne est *adaptive* dans le sens où elle s’adapte à la position de  $p^*$  par rapport à un bord de l’espace des probabilités

<sup>1</sup>voir Chapitre 3 pour plus de précisions sur ces notions

$k$ -monotones à support fini et à la *dimension* (dans un sens à définir) de ce bord. En d'autres termes la vitesse de convergence de  $\widehat{p}^k$  est accélérée lorsqu'il est possible d'approcher  $p^*$  *suffisamment près* d'une probabilité  $k$ -monotone à support fini possédant peu de  $k$ -nœuds (ou point à coordonnée non-nulle dans la décomposition en base de splines définie au Chapitre 4) et un support réduit. Dans le cas particulier où  $p^*$  est  $k$ -monotone à support fini, la vitesse de concentration de  $\widehat{p}^k$  s'adapte donc à la *complexité* de  $p^*$  dans la décomposition dans la base de splines.

- La **Section 7.3** regroupe les résultats intermédiaires à la preuve du résultat principal. La **Sous-Section 7.3.1** présente une adaptation de la formulation variationnelle à l'estimation de densité ainsi qu'une heuristique permettant de démarrer la preuve. La **Sous-Section 7.3.2** découpe le problème en sous-problèmes portant sur des suprema de processus empiriques sur des sous-espaces. Ces derniers sont choisis pour faciliter les calculs d'entropies à crochet. L'énoncé de ces calculs se trouve à la **Sous-Section 7.3.4**. Enfin la **Sous-Section 7.3.3** fait le lien entre les suprema de processus empiriques et les calculs entropiques grâce aux inégalités de chaînage.
- Dans la **Section 7.4** une discussion à propos de la borne oracle est engagée. Les bornes oracles calculées sont intrinsèquement liées aux majorations des entropies à crochet des espaces considérés. L'optimalité de ces bornes supérieures est donc fondamentale dans ce problème. Deux raisons principales incitent à penser que le résultat pourrait être amélioré lorsque  $k \geq 2$  : d'une part les résultats prouvés par Gao et Wellner (2009) dans le cas continu, et d'autre part une heuristique sur le lien entre l'espace des probabilités  $k$ -monotones discrètes et l'espace des probabilités  $k$ -monotones continues. Néanmoins cette heuristique n'est pas évidente à mettre en œuvre et nous détaillons également les principales difficultés qui émergent dans le cas discret. Pour finir la démarche globale choisie dans ce chapitre, inspirée des papiers de Flammarion et al. (2016) et Chatterjee et Lafferty (2015), est confrontée à la démarche proposée par Bellec (2016) dans le cadre de la régression. Les calculs des bornes oracles de ce dernier, en effet, sont basés sur une notion empruntée au domaine du dénombrement, la *dimension statistique* d'un cône, qui permet de calculer des suprema non-localisés par des arguments combinatoires.
- La **Section 7.5** regroupe toutes les preuves de ce chapitre.
- Le **Chapitre 8** regroupe divers résultats d'entropie<sup>1</sup> pour les espaces de fonctions  $k$ -monotones discrètes. Ils sont basés sur le fait que les calculs d'inégalités entropiques sur les espaces de fonctions  $k$ -monotones, à support dans  $\mathbb{N}$ , peuvent se ramener à des calculs d'inégalités entropiques sur des espaces de dimension finie. On retrouve ainsi le caractère *quasi-paramétrique* de la contrainte de forme discrète. Le chapitre est organisé ainsi :
  - Dans la **Section 8.1** nous donnons l'énoncé du résultat permettant de réduire le problème à un problème de dimension finie (Lemme 57). Ces calculs sont basés sur l'existence d'une enveloppe pour l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones discrètes, c'est-à-dire d'une fonction (dont on connaît un équivalent) qui majore uniformément toutes les densités  $k$ -monotones discrètes. Cette enveloppe est également calculée.
  - Dans la **Section 8.2** une majoration de l'entropie à crochet est calculée. Elle porte sur des ensembles de probabilités  $k$ -monotones discrètes sur l'ensemble

<sup>1</sup>La définition de l'entropie est donnée au Chapitre 3

- $\mathbb{N}$  tout entier pour les métriques quadratiques usuelles.
- Enfin la **Section 8.3** relie le problème d'entropie qui nous intéresse au problème de recherche du nombre de points à coordonnées entières dans une boule, un problème de dénombrement classique et difficile.
  - La **Section 8.4** regroupe l'ensemble des lemmes du chapitre.

### Troisième Partie : Tests de $k$ -monotonie et application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population

Le nombre d'espèces composant un écosystème est un indicateur de la biodiversité couramment utilisé. L'estimation de la biodiversité présente un enjeu dans de nombreux domaines de l'écologie : elle peut aider par exemple à la gestion des pêches afin d'assurer la durabilité des ressources. C'est aussi un point clef dans l'étude des services écosystémiques, permettant entre autres d'inférer la relation entre la biodiversité génique du microbiote intestinal et certaines pathologies (cancer, maladie de Crohn, obésité...). Il est donc utile de développer des méthodes statistiques qui permettent d'estimer la biodiversité dans une population, et en particulier d'estimer le nombre  $N$  d'espèces ou de gènes. L'estimation de  $N$  est effectuée simultanément à celle d'une certaine densité, dite *distribution d'abondance*, qui caractérise la loi de l'observation de la population.

Nous proposons dans cette partie une méthode non-paramétrique pour l'estimation de la distribution d'abondance et nous en déduisons une méthode pour l'estimation du nombre d'espèces dans une population. Le modèle choisi pour l'estimation de la distribution d'abondance est celui d'un estimateur des moindres carrés sous la contrainte de forme de  $k$ -monotonie,  $k$  étant fixé ou inféré directement sur les observations, selon une méthode de tests emboîtés. Le test de  $k$ -monotonie permet également de discuter la pertinence de la méthode.

Cette partie est constituée des chapitres 9 et 10 :

- Dans le **Chapitre 9** nous décrivons le problème de l'estimation du nombre d'espèces et nous développons une méthode sous contrainte de  $k$ -monotonie. Elle est comparée aux méthodes existantes et en particulier aux estimateurs non-paramétriques proposés initialement par Chao (1984) et aux modèles de mélanges poissonniens (voir Bunge and Fitzpatrick (1993)). L'estimation sous contrainte de forme permet de répondre à ce problème sans avoir à choisir au préalable un nombre de composantes ou une loi pour la distribution mélangeante. Deux estimateurs pour le nombre  $N$  d'espèces dans la population en sont déduits et leurs propriétés asymptotiques sont étudiées (**Section 9.2**). Ce problème est non-identifiable en général, une hypothèse d'identifiabilité a donc été faite, naturelle dans le cadre de ce modèle. Il s'agit d'une hypothèse de  $k$ -monotonie d'abondance qui généralise les travaux de Durot et al. (2015). Une étude sur jeu de données simulés (**Section 9.3**) puis sur jeux de données réels (**Section 9.4**) vient illustrer la qualité de cette estimation. Les preuves sont à la **Section 9.5**.
- Dans le **Chapitre 10** le choix de cette méthode est discuté grâce à la proposition de plusieurs tests de  $k$ -monotonie pour la densité d'abondance tronquée en 0. Ces tests sont ensuite mêlés en une procédure de tests multiples afin d'inférer le degré de monotonie de la vraie distribution d'abondance. La démarche est la suivante : pour des entiers  $k$  croissants entre 1 et un seuil  $k_{\max}$  fixé par l'utilisateur on teste successivement l'hypothèse :

$$\mathbb{H}_0^k : "p^+ \text{ est } k\text{-monotone}"$$

contre l'alternative

$$\mathbb{H}_1^k : "p^+ \text{ est } (k-1)\text{-monotone mais pas } k\text{-monotone}."$$

Le degré de monotonie est alors estimé par  $\hat{k}$ , tel que  $\hat{k} + 1$  est le plus petit degré rejeté par la procédure de test. Le chapitre se décompose ainsi :

- La **Section 10.2** présente les différents tests. Les deux premiers utilisent une statistique de test basée uniquement sur l'estimateur empirique, les deux suivants sont définis à partir d'une méthode Bootstrap. Le niveau et le puissance des deux premiers tests sont contrôlés asymptotiquement (Théorèmes 66 et 67).
- Dans la **Section 10.3** une étude sur jeux de données simulés illustre la qualité de ces tests. Deux catégories de probabilités discrètes  $k$ -monotones sont choisies : d'une part des lois de Poisson dont le paramètre est choisi pour être à la frontière entre deux degrés de  $k$ -monotonie, et d'autre part des mélanges d'une ou deux splines. Les simulations révèlent qu'il est difficile de rejeter l'hypothèse  $\mathbb{H}_0^{k+1}$  lorsque la densité considérée est  $k$ -monotone. Dans le premier cas la procédure de test est comparée à un test paramétrique lié au paramètre de la loi de Poisson. Ce test paramétrique représente une sorte de *benchmark* pour mesurer la puissance, il constitue ainsi un indicateur de la difficulté intrinsèque au problème à séparer les degrés de  $k$ -monotonie. Les tests développés dans ce chapitre sont également comparés aux résultats du test proposé par Balabdaoui et al. (2017) qui est construit à partir de la loi limite de l'estimateur sous contrainte de convexité défini dans le papier de Durot et al. (2013).
- La **Section 10.4** illustre la méthode sur des jeux de données réelles issus de la littérature
- La **Section 10.6** regroupe les preuves de niveau et de puissance.
- Une courte conclusion résume ensuite les résultats obtenus.

## Annexe

L'**Annexe** contient un travail commun réalisé avec Cécile Durot, Sylvie Huet, François Koladjo et Stéphane Robin et publié au Chapitre *Convex Estimation* du livre *Capture and Recapture* (Durot et al., 2017).



## English Version

This thesis belongs to the field of nonparametric density estimation under shape constraint. The densities are discrete and the shape is  $k$ -monotonicity,  $k \geq 2$ , which is a generalization of convexity. The integer  $k$  is an indicator for the hollow's degree of a convex function. This thesis is composed of three parts, an introduction, a conclusion and an appendix.

In **Part I** the existence and unicity of the least squares estimator on the space of discrete  $k$ -monotone functions, or  $k$ -monotone probabilities, and their statistical properties are studied. In **Part II**, an adaptive risk bound for the quadratic error of this estimator is derived. In **Part III** an application in Ecology for the estimation of the number of species in a population is presented. The estimation is based on testing procedures for the  $k$ -monotonicity constraint.

The main subject matter of this work is the study of the least squares estimator under  $k$ -monotonicity constraint, with arbitrary  $k$ , of a discrete density. It is related to the following previous work :

- The PhD thesis of Fadoua Balabdaoui where the estimation of a continuous density under  $k$ -monotonicity constraint was studied.
- The PhD thesis of François Koladjo, where a least squares estimator for a discrete density under convexity constraint was studied. An application to the estimation of the number of species in a population was also considered.

Part I in particular, is closely related to those two pieces of work. Nevertheless, as it will be explained, we cannot derive results directly from these previous works, due to the regularity hypothesis in the continuous case and new difficulties when  $k$  is larger than 3, lead to the impossibility to derive results directly from these previous works.

Part II provides adaptive risk bounds, which, to our knowledge, have never been obtained for the least squares estimation of a density under  $k$ -monotonicity constraint, either continuous or discrete.

Finally, Part III generalizes the work of François Koladjo and his co-authors on the estimation of the number of species in a population for  $k$  larger than three. Then it focuses on choosing the integer  $k$  using a nested testing procedure.

The content of Part I has been published in Electronic Journal of Statistics (Giguelay, 2017). The implementation is available in the R-package `pkmon`<sup>2</sup>. The major part of Part II and III will lead to two papers that will be submitted soon. Part III generalises some results in my masters thesis and a joint work with Durot, Huet, Koladjo and Robin, which is available in the Chapter Convex estimation in the book Capture and Recapture (Durot et al., 2017), also available in appendix.

Part II and III are independent but both rely on the definition of the least squares estimator under  $k$ -monotonicity constraint defined in Part I. For the sake of clarity and completeness, some definitions are recalled in the three parts. The notations can be found in the Index. Let us now provide a detailed summary of the different chapters.

### Part I : Estimation under $k$ -monotonicity constraint

Let  $k$  be an integer larger than 2. This part deals with nonparametric estimation of a discrete density under constraint of  $k$ -monotonicity (the definition of  $k$ -monotonicity is

<sup>2</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

given in **Section 4.1**). Two least-squares estimators have been defined, and implemented.

This part gathers Chapter 4 to Chapter 6 and is organized as follows :

- In **Chapter 4**, the  $k$ -monotone functions are defined, in the discrete case and in the continuous case, and their main properties are recalled. These functions are characterized by a spline decomposition, which has been shown initially by Lefevre and Loisel (2013). In this Chapter we also summarize motivations for estimation under  $k$ -monotonicity constraint.
- In **Chapter 5**, two discrete least-squares estimators under  $k$ -monotonicity constraint are provided :
  - In **Section 5.1** the least-squares estimator under  $k$ -monotonicity constraint is defined. It is the projection of the empirical estimator onto the set of  $k$ -monotone sequences. Its existence and unicity are shown. The properties about its shape (mass, support) as well as its asymptotic properties are shown, in particular its estimation quality is compared to the one of the empirical estimator. The estimation rate is measured in terms of quadratic error, and is parametric, that is to say with  $\sqrt{n}$ -decreasing, which is very different from the rates obtained in the case of continuous densities. A characterisation of the estimator as a function of its primitives allows to deduce some results for  $k \geq 3$  from the convex case ( $k = 2$ , see Durot et al. (2013)) by induction. This is the case in particular for the asymptotic results, as for instance results stated in Theorem 22. Nevertheless, differences arise between the convex case and  $k$ -monotonicity, for  $k \geq 3$ . The first difference is due to the fact that the projection of a discrete probability on the set of  $k$ -monotone functions is not in general a probability when  $k > 2$ .
  - In **Section 5.2** a second least-squares estimator is defined. It is the projection of the empirical estimator on the space of  $k$ -monotone probabilities. We denote it  $\hat{p}^k$ . Let us remark that both estimators were identical in the convex case. Moreover, when  $k \geq 3$ , the tools necessary for some of the proofs differ from  $k = 2$ . For example, the properties about the supports of the estimators, require the control of the decreasing tails of the  $k$ -monotone distributions, while in the convex case a truncation argument was sufficient.
  - The implementation of the estimators are described in **Section 5.4**. The estimators being defined as the argmin of a convex criterion in a finite set, we chose to derive an algorithm from the Support Reduction Algorithm proposed by Groeneboom et al. (2008). This is a gradient descent algorithm which provides the exact least-squares estimator on a finite support and stops when this estimator satisfies a *stopping criterion*. The stopping criterion is given for all  $k \geq 2$ . In the particular case where  $k \in \{3, 4\}$ , the number of calculations does not depend on the coefficients of the empirical estimator, but only on the maximum of its support.
  - **Section 5.5** provides some simulation results in order to assess the quality of our estimators. We compare the least-squares estimator with the empirical estimator on simulated data sets. We measure the quality of estimation in terms of quadratic norm, total variation norm, Hellinger norm and prediction error for entropy, variance and the value of the distribution in zero.
- **Chapter 6** contains the proofs of Part I. It is written in English.
- A short conclusion summarizes the results of Part I.

## Part II : Risk bounds

This Part deals with the control of the quadratic risk of the least-squares estimator  $\hat{p}^k$  defined in Part I. The control is assessed with non-asymptotic local oracle bounds<sup>2</sup>. Part II is structured in two chapters:

- **Chapter 7** presents the main result : an oracle risk bound for  $\hat{p}^k$ . This chapter is organized as follows:
  - **Section 7.1** is an introductory section. It gives a short state of the art about the study of adaptive risk bounds in the field of shape constraint. The goal of this chapter, in particular, is to extend some results from Bellec (2016) to the estimation of  $k$ -monotone discrete densities. Most papers restrict to the framework of regression and are based on a variational formula<sup>1</sup> introduced by Chatterjee (2014) as well as concentration inequalities linked to bracketing entropy calculations<sup>1</sup>. The oracle risk bound for  $\hat{p}^k$  will be established thanks to the same tools.
  - The main result is given in **Section 7.2**. It is a local -it depends on the true underlying distribution  $p^*$ - oracle risk bound. Two forms are proposed : an inequality in expectation and a deviation inequality<sup>1</sup>. A general statement is given in the case where no information is available about  $p^*$ , then a second statement is given in the case where we assume that the support of  $p^*$  is finite and known. The bound is *adaptive* in the sense that it depends on the position of  $p^*$  relative to the boundary of the set of  $k$ -monotone probabilities with finite support and to the *dimension* (which will be explained in this context) of the boundary. In other words, the convergence rate of  $\hat{p}^k$  is accelerated when it is possible to approach  $p^*$  *closely enough* with a  $k$ -monotone probability with few  $k$ -knots (points with non-zero coordinates in the spline decomposition described in Chapter 4) and a small support. In the particular case where  $p^*$  is  $k$ -monotone with finite support, the concentration rate of  $\hat{p}^k$  is adaptive to the *complexity* of  $p^*$  in the spline decomposition.
  - **Section 7.3** contains intermediate results for the proof of the main result. **Subsection 7.3.1** gives an adaptation of the Chatterjee's variational formula for density estimation and a heuristic to begin the proof. **Subsection 7.3.2** divided the problem into sub-problems about suprema of empirical processes on sub-spaces. These sub-problems are chosen in order to allow bracketing entropy calculations. Bracketing entropy upper bounds are given in **Subsection 7.3.4**. To conclude, in **Subsection 7.3.3** the link between suprema of empirical processes and the entropy calculations are explained thanks to chaining inequalities.
  - In **Section 7.4** a discussion about the oracle bound is proposed. The oracle bounds are intrinsically linked to the upper bounds of the bracketing entropies. The optimality of these bracketing entropy bounds is then crucial in this problem. Two main arguments suggest that the result could be improved when  $k \geq 2$  : on the one hand the existence of the results proved by Gao and Wellner (2009) in the continuous case, and on the other hand a heuristic about the link between the set of  $k$ -monotone discrete probabilities and the set of  $k$ -monotone continuous probabilities. Nevertheless this heuristic is not easy to translate into a proof and we also explain the main difficulties which arise in the discrete case. To conclude the approach we choose in this chapter, inspired by the work of

<sup>1</sup>see Chapter 3 for more precisions about these notions

Flammarion et al. (2016) and Chatterjee et Lafferty (2015), is compared to the approach proposed by Bellec (2016) in the regression framework. Indeed Bellec's oracle bounds are based on the notion of *statistical dimension* of a cone, which allows to calculate non-localized suprema with combinatory arguments.

- **Section 7.5** contains the proofs of the chapter.
- **Chapter 8** contains some entropy<sup>3</sup> results for the sets of  $k$ -monotone discrete functions. They are based on the fact that bracketting entropy inequalities on the set of  $k$ -monotone functions with support on  $\mathbb{N}$  can be reduced to bracketting entropy inequalities on spaces of finite dimensions. This illustrates the *semi-parametric* behaviour of the discrete shape constraint. This chapter is organized as follows:
  - In **Section 8.1** we give the result which allows to reduce the problem to a quasi-finite dimensions problem (Lemme 57). The calculations are based on the existence and the calculation of an envelope for the set of  $k$ -monotone discrete functions, that is to say a function (of which we know an equivalent) which is uniformly larger than all the  $k$ -monotone discrete densities.
  - In **Section 8.2** an upper-bound of the bracketting entropy of the set of discrete  $k$ -monotone distributions, with support  $\mathbb{N}$ , is calculated and compared with the result obtained in the continuous case.
  - **Section 8.3** relates our entropy problem to the computation of the number of lattice points in an euclidean ball, which is a classical and difficult enumeration problem.
  - **Section 8.4** contains the proofs of the different lemmas.

### **Part III : Tests of $k$ -monotonicity and application for the estimation of the number of species in a population**

The number of species in an ecosystem constitutes a common indicator of biodiversity. The estimation of biodiversity is an important issue in ecology : for instance it could help fisheries management to ensure sustainability of resources. It could also infer relationship between biodiversity in intestinal microbiota and some pathologies (cancer, Crohn's disease, obesity...). Then it is useful to develop statistical methods to estimate the number of species  $N$  in a population. The estimation of  $N$  is calculated simultaneously with the estimation of a density, called *abundance distribution*, which characterizes the law of the observations in this population.

In Part III a nonparametric approach for the estimation of the abundance distribution and of the number of species in a population is proposed. This approach is based on the definition of a  $k$ -monotone abundance distribution, and on the least-squares estimator defined in Part I. The integer  $k$  can be fixed by the user or inferred with a nested testing procedure. A test for  $k$ -monotonicity constraint can also be used independently of this context to justify the  $k$ -monotonicity hypothesis before the application of the estimation procedure.

Part III contains Chapter 9 and Chapter 10 :

- In **Chapter 9** we describe the problem of the estimation of the number of species and we develop a method under hypothesis of  $k$ -monotonicity of the abundance distribution. The method is compared with the nonparametric procedures proposed

---

<sup>3</sup>definition of entropy is given in Chapter 3

initially by Chao (1984) and with the Poisson mixture models (see for example Bunge and Fitzpatrick (1993)). The estimation using shape constraint does not require the choice of the number of components in the model nor the choice of a law for the mixture distribution. Two estimators for the number of species  $N$  are deduced, and their statistical properties are shown (**Section 9.2**). Assuming  $k$ -monotonicity of the distribution does not suffice to identify the number of species. Therefore, generalising the work of Durot et al. (2015), we define a  $k$ -monotone abundance distribution. A study with simulated data sets (**Section 9.3**) as well as real data sets (**Section 9.4**) is given to assess the performance of the method. The proofs can be found in **Section 9.5**.

- In **Chapter 10** we propose to discuss the choice of the estimation under  $k$ -monotonicity (see Part I), by means of a statistical test of  $k$ -monotonicity. Then a nested testing procedure is proposed, in order to infer the degree of  $k$ -monotonicity of  $p$ . For  $k$  between 1 and a threshold  $k_{\max}$  fixed by the user, we successively test :

$$\mathbb{H}_0^k : "p^+ \text{ is } k\text{-monotone}"$$

against the alternative

$$\mathbb{H}_1^k : "p^+ \text{ is } (k-1)\text{-monotone but not } k\text{-monotone}."$$

The degree of  $k$ -monotonicity is estimated by  $\hat{k}$ , defined such that  $\hat{k}+1$  is the smallest degree rejected by the testing procedure. The chapter is organized as follows :

- In **Section 10.2** four tests are proposed. The first two are built with a test statistic that requires only the empirical estimator, the other two are defined with Bootstrap method. The level and the power of the first two tests are controled asymptotically (Theorems 66 and 67).
- In **Section 10.3** a study with simulated data sets is given to assess the quality of the tests. Two kinds of  $k$ -monotone discrete probabilities are selected : first Poisson's laws with a parameter chosen to be *in the frontier* between two  $k$ -monotonicity degrees, and secondly mixture of one or two splines. The simulations highlight the difficulty to reject the hypothesis  $\mathbb{H}_0^{k+1}$  when the true distribution is  $k$ -monotone. In the Poisson's framework the testing procedure is compared with a parametric test focusing on the parameter of the Poisson's law. This test represents a kind of *benchmark* to measure the power, and may be an indicator of the intrinsic difficulty to separate  $k$ -monotonicity degrees. The testing procedures are also compared to the work of Balabdaoui et al. (2017), where the test is built on the limiting distribution of the least-squares estimator under convexity constraint defined in the paper of Durot et al. (2013).
- **Section 10.4** is an illustration of the different methods on real data sets
- **Section 10.6** contains the proofs for the level and the power of the two tests.

## Annexe

**Appendix** contains a joint work with Cécile Durot, Sylvie Huet, François Koladjo and Stéphane Robin which has been published in Chapter *Convex Estimation* of the book *Capture and Recapture* (Durot et al., 2017).



# Chapter 3

## Outils Mathématiques et Notations

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Notations générales</b>	<b>38</b>
<b>3.2</b>	<b>Entropie métrique et entropie à crochet</b>	<b>40</b>
<b>3.3</b>	<b>Outils et résultats de Statistiques</b>	<b>41</b>
3.3.1	Bornes de risque	41
3.3.2	Formulation variationnelle d'un problème de minimisation	43
3.3.3	Inégalités de chaînage	44
<b>3.4</b>	<b>Rappels d'analyse</b>	<b>46</b>
3.4.1	Inégalités de Karush-Kuhn-Tucker	46
3.4.2	Théorème de Cauchy pour la localisation des racines d'un polynôme	47

---

### Notations générales

Nous rappelons ici quelques notations générales qui serviront dans tout le manuscrit. Les notations propres aux résultats de la thèse peuvent être trouvées dans la partie Index en fin de manuscrit.

#### Les fonctions discrètes et leur support

Lorsque aucune mention du contraire ne sera faite les fonctions  $f$  seront définies sur  $\mathbb{N}$  et  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^+$  désignera de façon abusive aussi bien la fonction que la suite de nombres  $(f(j), j \in \mathbb{N})$  correspondante.

Le *support* d'une fonction  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^+$ , noté  $\text{supp}(f)$ , est l'ensemble des  $j \in \mathbb{N}$  tels que  $f(j)$  est non nul. Le maximum du support de  $f$  vaut donc :

$$\tau_f = \max(\text{supp}(f)) = \min\{j \in \mathbb{N}, \forall k > j, f(k) = 0\}$$

et peut prendre la valeur infinie. Lorsque  $\tau_f < \infty$  on a notamment  $f(\tau_f) > 0$  et  $\tau_f$  est alors le dernier entier avant que  $f$  ne soit nulle jusqu'à l'infini.

#### Les normes usuelles

Soit  $f$  une fonction discrète. Soit  $r \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ , les normes  $\|\cdot\|_r$  et  $\|\cdot\|_\infty$  de  $f$  sont définies par :

$$\|f\|_r = \left( \sum_{j \geq 0} |f(j)|^r \right)^{1/r}, \quad \|f\|_\infty = \sup_{i \geq 0} |f(i)|.$$

$\mathcal{L}^r(\mathbb{N})$  désigne l'espace des suites  $f$  telles que  $\|f\|_r$  est finie et  $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{N})$  celui des suites bornées. L'espace  $\mathcal{L}^2(\mathbb{N})$  est un espace de Banach, le produit scalaire associé sera noté  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ . Enfin, pour  $p$  une fonction discrète positive, la norme  $\|\cdot\|_{r,p}$  est définie par :

$$\|f\|_{r,p} = \left( \sum_{j \geq 0} |f(j)|^r p(j) \right)^{1/r}$$

et  $\mathcal{L}^r(p)$  désigne l'ensemble des suites  $f$  telles que  $\|f\|_{r,p}$  est finie.

Soient maintenant  $I$  un intervalle de  $\mathbb{R}$  (éventuellement  $I = \mathbb{R}_+$  ou  $I = \mathbb{R}$ ) et  $g$  une fonction mesurable par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $I$ . On distinguera la norme usuelle  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^r}$  de la norme discrétisée  $\|\cdot\|_r$ , analogue de la norme sur les fonctions discrètes :

$$\begin{aligned} \|g\|_{\mathcal{L}^r} &= \left( \int_I |g(t)|^r dt \right)^{1/r} \\ \|g\|_r &= \left( \sum_{j \in I \cap \mathbb{N}} |g(j)|^r \right)^{1/r} \end{aligned}$$

De même si  $q$  est une fonction positive et mesurable par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $I$ , on distinguera les deux normes suivantes :

$$\begin{aligned} \|g\|_{\mathcal{L}^r(q)} &= \left( \int_I |g(t)|^r q(t) dt \right)^{1/r} \\ \|g\|_{r,q} &= \left( \sum_{I \cap \mathbb{N}} |g(i)|^r q(i) \right)^{1/r}. \end{aligned}$$

La norme infinie usuelle sur l'ensemble des fonctions mesurables par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $I$  est également notée  $\|\cdot\|_\infty$ .

### Les ensembles de mesures

On définit les trois ensembles suivants :

- $\mathcal{M}$  désigne le cône des mesures sur  $\mathbb{N}$ ,
- $\mathcal{M}_+$  désigne celui des mesures positives sur  $\mathbb{N}$ ,
- $\mathcal{P}$  désigne l'ensemble des probabilités discrètes.

### Dernières notations

Pour tout réel  $x$ , la partie positive de  $x$ , notée  $(x)_+$ , est définie par :

$$(x)_+ = \begin{cases} x & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et la partie entière de  $x$  est notée  $\lfloor x \rfloor$ .



## Entropie métrique et entropie à crochet

Deux outils-clé dans la recherche du contrôle du risque quadratique sont les notions d'entropie métrique et d'entropie à crochet d'un espace métrique. Elles ont été introduites initialement par Kolmogorov pour classer les sous-espaces métriques compacts entre eux. Ces notions topologiques, relatives à un ensemble de fonctions  $\mathcal{T}$ , mesurent la *densité* (au sens physique) de l'ensemble  $\mathcal{T}$  par le comptage du nombre minimal d'éléments nécessaires pour le recouvrir. Les entropies métriques ou à crochet sont donc intrinsèques à l'espace de fonctions étudié. De plus, elles peuvent être reliées à la concentration d'un processus empirique autour de sa moyenne par des inégalités de concentration de type chaînage rappelées en Section 3.3.3.

Soit  $(E, d)$  un espace métrique et soit  $\mathcal{T}$  un sous-espace compact de  $E$ . Ici  $(E, d)$  sera toujours un espace de fonctions définies sur un même espace  $\mathcal{X}$ , avec  $\mathcal{X} = \mathbb{N}$ ,  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$  ou  $\mathcal{X} = I$ , un intervalle inclus dans un de ces deux ensembles. En voici les définitions :

**Définition [Entropie métrique]** Soient  $s \in E$  et  $\varepsilon > 0$ . On note  $\mathcal{B}_d(t, \varepsilon)$  les boules fermées de rayon  $\varepsilon$  et de centre  $t$  pour la métrique  $d$ . Un  $\varepsilon$ -réseau de  $\mathcal{T}$  est un ensemble de boules de centres  $\{t_i\}_{1 \leq i \leq N}$  tel que  $t_i \in \mathcal{T}$  et que pour tout  $t \in \mathcal{T}$ , il existe un entier  $1 \leq i \leq N$  tel que  $t \in \mathcal{B}_d(t_i, \varepsilon)$ . Le nombre minimal de boules de rayon  $\varepsilon$  nécessaires pour recouvrir  $\mathcal{T}$  est noté :

$$N(\varepsilon, \mathcal{T}, d) = \min \left\{ m \mid \text{il existe } t_1, \dots, t_m \in \mathcal{T}, \mathcal{T} \subset \bigcup_{k=1}^m B(t_k, \varepsilon, d) \right\}.$$

Le logarithme de cette quantité,  $\log(N(\varepsilon, \mathcal{T}, d))$ , est appelé la  $\varepsilon$ -entropie de  $\mathcal{T}$  pour la métrique  $d$ .

**Définition [Entropie à crochet]** Soient  $s, s_1, s_2 \in E$  et  $\varepsilon > 0$ . On note  $[s_1, s_2]$  l'intervalle de  $E$  de bornes  $s_1$  et  $s_2$  : c'est l'ensemble des fonctions  $t$  telles que pour tout  $x \in \mathcal{X}$ ,  $s_1(x) \leq t(x) \leq s_2(x)$ . Un  $\varepsilon$ -crochet de  $\mathcal{T}$  est un ensemble d'intervalles  $\{(t_1, \bar{t}_1), \dots, (t_N, \bar{t}_N)\}$  tel que pour tout  $t \in \mathcal{T}$ , il existe un entier  $1 \leq i \leq N$  tel que :

- $t_i \leq t \leq \bar{t}_i$
- $d(t_i, \bar{t}_i) \leq \varepsilon$ .

Le cardinal minimal des  $\varepsilon$ -crochets de  $\mathcal{T}$  est noté :

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}, d) = \min \left\{ m \mid \exists \underline{t}_1, \dots, \underline{t}_m, \bar{t}_1, \dots, \bar{t}_m / \forall k \in \{1, \dots, m\}, d(\underline{t}_k, \bar{t}_k) \leq \varepsilon \text{ et } \mathcal{T} \subset \bigcup_{k=1}^m [\underline{t}_k, \bar{t}_k] \right\}.$$

Le logarithme  $\log(N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}, d))$  de cette quantité est appelé la  $\varepsilon$ -entropie à crochet de  $\mathcal{T}$  pour la métrique  $d$ .

### Quelques propriétés classiques

Soient deux espaces métriques  $(\mathcal{T}_1, d_1)$  et  $(\mathcal{T}_2, d_2)$ . Supposons qu'il existe entre ces deux espaces une bijection isométrique. Alors pour tout  $\varepsilon > 0$  :

$$N(\varepsilon, \mathcal{T}_1, d_1) = N(\varepsilon, \mathcal{T}_2, d_2) \text{ et } N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}_1, d_1) = N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}_2, d_2).$$

De même si l'espace  $(\mathcal{T}_1, d_1)$  s'injecte isométriquement dans  $(\mathcal{T}_2, d_2)$  :

$$N(\varepsilon, \mathcal{T}_1, d_1) \leq N(\varepsilon, \mathcal{T}_2, d_2) \text{ et } N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}_1, d_1) \leq N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}_2, d_2).$$

De plus si  $p$  désigne une fonction discrète quelconque et  $q$  la probabilité uniforme sur un intervalle  $I$  discret de longueur  $L$ , alors pour tout espace métrique  $\mathcal{T}$  de fonctions discrètes à support dans  $I$ , les inégalités suivantes sont vérifiées :

$$N(\varepsilon, \mathcal{T}, \|\cdot\|_1) \leq N_{[\cdot]}(\frac{\varepsilon}{L}, \mathcal{T}, \|\cdot\|_{2,q})$$

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon \sqrt{\|p\|_\infty}, \mathcal{T}, \|\cdot\|_{2,p}) \leq N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}, \|\cdot\|_2) \leq N_{[\cdot]}(\frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}, \mathcal{T}, \|\cdot\|_{2,q}).$$

Des résultats d'entropies propres à la  $k$ -monotonie sont montrés aux chapitres 7 et 8.

## Outils et résultats de Statistiques

Une question centrale en statistiques est la détermination de critères pour évaluer la qualité des estimateurs choisis et la pertinence des modèles. Parmi les nombreux critères asymptotiques existants, on peut notamment citer la consistance, la vitesse d'estimation ou encore la convergence vers une loi limite. Durant la Partie II des critères non-asymptotiques sont développés, c'est-à-dire pour lesquels le nombre  $n$  d'observations est fixé. Les outils utilisés sont rappelés ici.

### Bornes de risque

Dans cette section nous rappelons rapidement les résultats attendus dans le domaine des statistiques théoriques lorsqu'il est question de *bornes de risques* pour un estimateur.

Le cadre étudié est le suivant :  $\mathcal{C}$  désigne un espace convexe,  $p^*$  désigne une densité inconnue que l'on cherche à estimer, qui n'appartient pas nécessairement à  $\mathcal{C}$ . On suppose que l'on estime  $p^*$  sur la base d'un échantillon  $X_1 \dots X_n$  et l'estimateur considéré est noté  $\hat{p}$  et appartient à  $\mathcal{C}$ . Enfin  $p_C^*$  désigne le projeté de  $p^*$  sur l'ensemble  $\mathcal{C}$ . Dans la Partie II nous considérerons le cas où  $\mathcal{C} = \mathcal{P}^k$  est l'espace des probabilités  $k$ -monotones discrètes.

Le biais  $B(p^*, \mathcal{C})$  associé à l'espace  $\mathcal{C}$  est défini par :

$$B(p^*, \mathcal{C}) = \|p^* - p_C^*\|_2.$$

Il s'agit de l'erreur d'approximation liée au fait qu'on estime  $p_C^*$  plutôt que  $p^*$ . Étant donnée une norme  $\|\cdot\|$ , le risque associé à l'estimateur  $\hat{p}$  est défini par :

$$\mathcal{R}(\hat{p}, p^*) = \|\hat{p} - p^*\|^2$$

et le risque intégré désigne l'espérance de  $\mathcal{R}(\hat{p}, p^*)$ . La norme considérée est généralement la norme quadratique discrète ou continue (voir la Section 3.1), le risque associé est appelé risque quadratique. Le risque se décompose fréquemment en un terme de biais et un terme de variance :

$$\mathbb{E}[\mathcal{R}(\hat{p}, p^*)] = \underbrace{\|p_C^* - p^*\|^2}_{\text{biais}^2} + \underbrace{\mathbb{E}[\|\hat{p} - p_C^*\|^2]}_{\text{variance}}.$$

**Optimalité** Une propriété raisonnable pour un estimateur  $\hat{p}$  est sa consistance, c'est-à-dire le fait qu'il converge vers la distribution que l'on cherche à estimer. Cette propriété se définit de nombreuses façons, nous considérons ici la consistante au sens du risque quadratique qui s'écrit de manière asymptotique :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}[\mathcal{R}(\hat{p}, p^*)] = 0.$$

ou non-asymptotique :

$$\mathbb{E} [\mathcal{R}(\hat{p}, p^*)] \leq C\Psi_n \quad (3.1)$$

avec  $(\Psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  désignant une suite déterministe tendant vers 0 qui caractérise la *vitesse* de convergence de  $\hat{p}$  vers  $p^*$ , et  $C$  une constante. En particulier  $\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$  correspond à la *vitesse paramétrique classique* commune à tous les problèmes paramétriques. La consistance en norme quadratique peut également s'apprécier au moyen d'*inégalités de déviation* de la forme suivante :

$$\forall x > 0, \mathbb{P}(\mathcal{R}(\hat{p}, p^*) \leq C\Psi_n(x)) \geq 1 - e^{-x}. \quad (3.2)$$

L'*optimalité* de  $\hat{p}$  constitue un critère de qualité supplémentaire, signifiant qu'il réalise la *meilleure vitesse*. La notion de meilleure vitesse peut se comprendre de différentes façons d'où la définition ici de deux critères d'optimalité, le premier est une optimalité au sens du *risque minimax*, le second correspond à l'optimalité au sens d'une *borne oracle*.

**Risque minimax** On dit que l'estimateur  $\hat{p}$  est de vitesse optimale au sens du risque minimax si (3.1) est vrai et :

$$\inf_{\text{estimateur } \bar{p}} \left( \sup_{p^*} \mathbb{E} [\mathcal{R}^2(\bar{p}, p^*)] \right) \geq D\Psi_n \quad (3.3)$$

avec  $D$  une constante. Cela signifie que pour toute autre procédure d'estimation associant à  $p^*$  un estimateur  $\bar{p}$ , il existe une probabilité  $p^*$  telle que  $\bar{p}$  converge vers  $p^*$  à vitesse au plus  $\Psi_n$  ou en d'autres termes qu'aucune autre procédure d'estimation ne réalise de meilleure vitesse que celle de l'estimateur  $\hat{p}$  considéré.

**Inégalités Oracles et Inégalités de type Oracle** Un autre type d'optimalité existe : l'optimalité au sens de la borne oracle. Supposons qu'on ait accès à une collection d'estimateurs  $(\hat{p}^\kappa)_{\kappa \in \mathcal{K}}$ . On souhaite choisir parmi cette collection le meilleur estimateur, relativement à  $p^*$ . Le principe de l'optimalité au sens de la borne oracle est de comparer la borne de risque obtenue en (3.1) à une seconde borne, dite *borne oracle* ainsi nommée car elle représente la perte que l'on commettrait si, tel un oracle, on avait accès à la vraie densité  $p^*$  :

$$\text{BorneOracle} = \min_{\kappa \in \mathcal{K}} \mathcal{R}(\hat{p}^\kappa, p^*). \quad (3.4)$$

Cette borne oracle représente la plus petite perte que l'on peut espérer commettre. Une procédure de choix de modèle *optimale au sens de la borne oracle* est alors une procédure qui donne un estimateur  $\hat{p}$  de  $p^*$  dont la perte est comparable à celle de la borne oracle. Il s'agit donc d'un estimateur tel que l'une des deux inégalités suivantes soit vérifiée :

- **Inégalité Oracle en déviation** : il existe une suite de constantes  $(C_n) > 1$  (éventuellement  $C_n \equiv C$ ), une suite de restes  $(R_n) \geq 0$  (éventuellement nulle) tendant vers 0 et une suite de réels positifs  $p_n$ , avec  $\sum p_n < \infty$ , telles que :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \mathbb{P} \left( \mathcal{R}^2(\hat{p}, p^*) \geq C_n \min_{\kappa} \{ \mathcal{R}^2(\hat{p}^\kappa, p^*) + R_n \} \right) \leq e^{-p_n} \quad (3.5)$$

- **Inégalité Oracle moyenne** : il existe une constante  $C > 1$  et une suite de restes  $(R_n) \geq 0$  (éventuellement nulle) tendant vers 0 telles que :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \mathbb{E} [\mathcal{R}^2(\hat{p}, p^*)] \leq C \min_{\kappa} \{ \mathbb{E} [\mathcal{R}^2(\hat{p}^\kappa, p^*)] + R_n \} \quad (3.6)$$

$C_n$  et  $C$  sont appelées les *leading constant*. Si la suite  $(C_n)$  tend vers 1, il s'agit d'une inégalité oracle *sharp*, ce qui constitue une propriété d'optimalité très forte. Plus ces constantes sont proches de 1 et plus l'estimateur sera de bonne qualité. Ces deux inégalités signifient que la borne de risque de  $\hat{p}$  est de l'ordre de celle de l'oracle.

Afin de gagner en clarté, quitte à perdre en généralité, nous nous restreignons désormais au cadre suivant : supposons que l'on ne possède pas une collection d'estimateurs  $(\hat{p}^\kappa)_{\kappa \in \mathcal{K}}$ , mais un unique estimateur  $\hat{p}$  défini comme l'estimateur des moindres carrés sur un ensemble  $\mathcal{C}$ . La perte choisie est la perte quadratique. Les *inégalité de type oracle* sont des inégalités de contrôle du risque qui imitent les inégalités oracles dans la forme. Nous travaillerons avec les deux formes suivantes :

- **Inégalité de type oracle en déviation** : il existe une suite de constantes  $(C_n) > 1$  (éventuellement  $C_n \equiv C$ ), une fonction  $f$  décroissant vers 0 et une suite de réels positifs  $p_n$  telle que  $\sum p_n < \infty$  telles que :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \mathbb{P} \left( \|\hat{p} - p^*\|_2^2 \geq C_n \min_k \{ \|p^{*k} - p^*\|_2^2 + f(n) \} \right) \leq e^{-p_n} \quad (3.7)$$

- **Inégalité de type oracle moyenne** : il existe une constante  $C > 1$  et une fonction  $f$  décroissant vers 0 avec  $n$  telle que :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \mathbb{E}[\|\hat{p} - p^*\|_2^2] \leq \min_k \{ \|p^{*k} - p^*\|_2^2 + f(n) \} \quad (3.8)$$

Comme pour les inégalités oracles il en existe une version *sharp* et une version asymptotique. A la différence d'une inégalité oracle, l'inégalité de type oracle n'offre aucune comparaison avec le risque oracle. Il ne s'agit donc pas exactement d'un critère d'optimalité au sens oracle mais plutôt de la garantie d'une vitesse. Le résultat principal de la seconde partie de cette thèse est une borne de type oracle pour l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie discrète.

**Adaptativité** Les bornes oracles décrites en (3.1) peuvent être *globales*, c'est-à-dire vérifiées pour toute densité  $p^*$ , ou encore *locales* lorsque la vitesse  $\Psi_n$  dépend de  $p^*$ . Dans ce cas l'estimateur associé est dit *adaptatif*. Comme pour l'optimalité il existe de nombreuses définitions de l'*adaptativité* d'un estimateur. Elles ont toutes en commun l'idée que la vitesse  $\Psi_n$  associée à cet estimateur dépend de la vraie densité  $p^*$ .

Un exemple courant est le phénomène d'adaptativité à la régularité d'une densité continue  $p^*$  : si  $p^*$  est une densité  $\alpha$ -fois continûment différentiable sur  $\mathbb{R}$  alors l'estimateur adaptatif usuel converge à la vitesse  $n^{-2\alpha/(2\alpha+1)}$ . On pourra consulter à ce sujet la thèse de Chagny (2013). Ici, nous parlerons de bornes de risque adaptatives pour signifier qu'elles dépendent de la position de  $p^*$  par rapport à un bord de l'espace des probabilités  $k$ -monotones (dont une définition sera donnée à la Section 4.1), ainsi que de la *dimension* du bord considéré, un phénomène comparable à l'adaptativité de l'estimateur LASSO.

## Formulation variationnelle d'un problème de minimisation

Le calcul des bornes de risque pour l'estimateur développé dans la Partie I repose sur une formulation variationnelle due à Chatterjee (2014). On appelle *formulation variationnelle* la réécriture d'un problème sous la forme de la recherche du lieu du minimum d'une fonctionnelle. Dans le cas étudié par Chatterjee le problème est de déterminer, dans un modèle de régression, le contrôle du risque quadratique associé à un estimateur des moindres carrés.

**Modèle de régression gaussien :** Soit pour tout entier  $n \geq 1$  un vecteur  $\mu^* = (\mu_1, \dots, \mu_n) \in \mathbb{R}^n$  inconnu. Soit  $Z = (Z_1, \dots, Z_n)$  un vecteur gaussien  $Z \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$  de variance inconnue et  $Y = (Y_1, \dots, Y_n)$  le vecteur des observations avec :

$$Y_i = \mu_i^* + Z_i.$$

On cherche à estimer le vecteur  $\mu^*$  et on définit, pour un ensemble convexe fermé  $K \subset \mathbb{R}^n$  l'estimateur des moindres carrés :

$$\hat{\mu} = \operatorname{argmin}\{\|\mu - Y\|_2, \mu \in K\}.$$

Alors le contrôle du risque quadratique de cet estimateur peut se réécrire sous la forme de la formulation variationnelle suivante :

**Théorème 1** (Chatterjee, 2014). *Soit  $K \subset \mathbb{R}^n$  un ensemble convexe et fermé, on adopte le cadre statistique précédent. On pose la notation suivante pour tout  $t > 0$  :*

$$F_{\mu^*}(t) = \sup_{\nu \in K, \|\nu - \mu^*\|_2 \leq t} \langle Z, \nu - \mu^* \rangle - \frac{t^2}{2}.$$

Alors il existe une unique variable aléatoire  $t^* > 0$  (dépendante de  $\mu^*$ ) telle que :

$$t^* = \operatorname{argmax}_t (F_{\mu^*}(t)).$$

De plus l'égalité suivante est vérifiée :

$$\|\hat{\mu} - \mu^*\|_2 = t^*.$$

Une version de cette formulation adaptée au problème de l'estimation de densité est énoncée au Chapitre 7 (Lemme 45). Le terme *formulation variationnelle* sera utilisé dans tout le manuscrit pour faire référence à ce résultat.

## Inégalités de chaînage

La performance des estimateurs des moindres carrés définis au Chapitre 5 est analysée en terme de bornes de risques non-asymptotiques exprimées sous la forme d'une formulation variationnelle. Il s'agit essentiellement de relier le supremum de processus empiriques suivant :

$$M_n = \sup_{f \in \mathcal{F}} \langle \tilde{p} - p^*, f \rangle - \frac{t^2}{2},$$

aux entropies de l'espace de fonctions  $\mathcal{F}$ . Le développement des inégalités de concentration de type chaînage a été motivé par la recherche de justifications théoriques dans le choix de pénalités pour des problèmes de choix de modèles. On pourra consulter à ce propos les travaux de Birgé et Massart (1997), de Barron, Birgé et Massart (1999) ou encore le livre de Massart (2007). L'inégalité de concentration utilisée dans la preuve de notre résultat principal a été montrée par Massart (2007) :

**Théorème 2** (Massart, Théorème 6.8). *Soit  $t > 0$ , soit  $\mathcal{F}_t$  un ensemble de fonctions tel que :*

1.  $\forall h \geq 2, \forall f \in \mathcal{F}_t, \mathbb{E}[|f(X_1)|^h] \leq \frac{ht^h}{2}$ .
2. Pour tout  $\delta > 0$  il est possible de construire un crochet de  $\mathcal{F}$ , noté  $B_\delta$  :

$$B_\delta = \{(\underline{f}_1 - \bar{f}_1), \dots, (\underline{f}_{N_\delta} - \bar{f}_{N_\delta})\},$$

de longueur  $N_\delta$  tel que pour tout  $i \in 1, N_\delta$ :

$$\forall h \geq 2, \mathbb{E}[|\underline{f}_i(X_1) - \bar{f}_i(X_1)|^h] \leq \frac{h!\delta^2 t^h}{2}. \quad (3.9)$$

On note  $H(\delta) = \log(N_\delta)$ . Alors pour tout réel positif  $x$  :

$$\mathbb{P}\left(M \leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^t \sqrt{H(u) \wedge ndu} + \frac{4tH(t)}{n} + \frac{7t\sqrt{2x}}{\sqrt{n}} + \frac{2x}{n}\right) \geq 1 - e^{-x}$$

où  $M$  est définie par :

$$M(t) = \sup_{f \in \mathcal{F}} \langle \tilde{p} - p^*, f \rangle.$$

Ce théorème permet d'obtenir des bornes de risques de type oracle pour l'estimateur des moindres carrés de  $p^*$  développé en Partie I. Le modèle de régression sera également mentionné au Chapitre 7. Dans ce cas, une propriété de sous-gaussianité permet d'utiliser une inégalité de chaînage plus fine. On rappelle la définition suivante :

**Définition [Sous-gaussianité]** Soit  $X$  une variable aléatoire centrée. On dit que  $X$  est sous-gaussienne de facteur de variance  $\sigma^2$  si :

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}, \Psi_X(\lambda) \leq \frac{\lambda^2 \sigma^2}{2} \quad (3.10)$$

où  $\Psi_X$  désigne la fonction log-laplace de  $X$  :

$$\Psi_X(\lambda) = \log \mathbb{E}[e^{\lambda X}].$$

Une variable aléatoire  $X$  centrée et sous-gaussienne de facteur de variance  $\sigma^2$  vérifie les inégalités de concentration suivante pour tout  $x > 0$  :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X \geq x) &\leq \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \\ \mathbb{P}(X \leq -x) &\leq \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \\ \mathbb{P}(|X| \geq x) &\leq 2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right). \end{aligned}$$

Une seconde inégalité de chaînage est donnée, dans le cas des variables sous-gaussiennes. La preuve de cette dernière peut être trouvée dans Ledoux and Talagrand (1991).

**Théorème 3.** Soit  $\Theta \subset \mathbb{R}^d$  un espace compact et soit  $X$  une variable aléatoire sous-gaussienne de facteur de variance  $\sigma^2$ . Alors pour tout  $\theta_0 \in \Theta$  l'inégalité suivante est vérifiée pour tout  $x > 0$  :

$$\mathbb{P} \left( \sup_{\theta \in \Theta} \langle \theta - \theta_0, X \rangle \leq C \int_0^{\text{diam}(\Theta)} \sqrt{\log N(u, \Theta, \|\cdot\|_2)} du + x \right) \geq 1 - C \exp \left( -\frac{cx^2}{\sigma^2 \text{diam}(\Theta)^2} \right)$$

où  $c$  et  $C$  sont des constantes positives et  $\text{diam}(\Theta)$  désigne le diamètre de l'ensemble  $\Theta$ .

Pour finir nous rappelons une dernière inégalité de concentration qui nécessite la définition suivante :

**Définition [Condition de différence bornée]** Soit  $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$  une application. On dit que  $f$  vérifie la condition de différence bornée si il existe des constantes positives  $c_1, \dots, c_n$  telles que :

$$\forall x, y \quad |f(x) - f(y)| \leq \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{I}_{x_i \neq y_i}. \quad (3.11)$$

**Théorème 4** (Inégalité de Mac Diarmid). Soit  $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$  une application satisfaisant la condition de différence bornée (3.11). Soient  $X_1, \dots, X_n$   $n$  variables aléatoires indépendantes et soit  $Z = f(X_1, \dots, X_n)$ . Alors la variable aléatoire  $Z - \mathbb{E}[Z]$  est sous-gaussienne de facteur de variance  $v$  défini par :

$$v = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n c_i^2.$$

Une preuve de ce théorème peut être trouvée dans Massart (2007).

## Rappels d'analyse

### Inégalités de Karush-Kuhn-Tucker

Soit le problème de minimisation suivant :

$$x^* = \underset{\substack{\forall i \in 1 \dots m, f_i(x) \leq 0 \\ h(x) = 0}}{\text{argmin}} (f_0(x)) \quad (3.12)$$

où  $f_i, i \in 0, \dots, m$  et  $h$  sont des fonctions de  $\mathbb{R}^n$  vers  $\mathbb{R}$  différentiables. On dit que  $x^*$  vérifie les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) si il existe  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$  et  $\nu^* \in \mathbb{R}$  tels que :

$$\begin{cases} \forall i \in 1 \dots m, f_i(x^*) \leq 0 \\ h(x^*) = 0 \\ \forall i \in 1 \dots m, \lambda_i^* \geq 0 \\ \forall i \in 1 \dots m, \lambda_i^* f_i(x^*) = 0 \\ \nabla f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla f_i(x^*) + \nu^* \nabla h(x^*) = 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

On définit la fonction lagrangienne  $\mathcal{L}$  associée au problème (3.12) :

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \nu h(x).$$

La condition de KKT (3.13) s'écrit donc également :

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0.$$

Le théorème suivant établit le lien entre les conditions de KKT et les solutions du problème de minimisation :

**Théorème 5** (dit de Karush-Kuhn-Tucker). *Si les fonctions  $f_i$ , pour  $i \in 0 \dots m$  sont affines alors  $x^*$  vérifie les conditions de KKT si et seulement si  $x^*$  est solution de (3.12). En d'autres termes il y a équivalence entre :*

1.  $x^*$  est solution de (3.12)
2. il existe  $\lambda^*$  et  $\nu^*$  tels que  $(x^*, \lambda^*, \nu^*) = \underset{(x, \lambda, \nu)}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(x, \lambda, \nu))$ .

Une preuve de ce résultat figure dans Boyd and Vandenberghe (2004) page 216 et suivantes. Ce résultat très classique est utilisé dans la preuve de la consistance de l'algorithme de la Section 5.4.

### Théorème de Cauchy pour la localisation des racines d'un polynôme

Le théorème de Cauchy pour la localisation des racines d'un polynôme peut être vu comme une conséquence du théorème de Rouché mais ce résultat antérieur peut également être montré indépendamment.

**Théorème 6** (Cauchy). *Soit  $P$  un polynôme de  $\mathbb{C}[X]$  s'écrivant :*

$$P(z) = a_d z^d + a_{d-1} z^{d-1} + \dots + a_1 z + a_0.$$

*Soit  $L$  le réel défini par :*

$$L \geq \max \left( 1 + \frac{a_{d-1}}{a_d}, \dots, 1 + \frac{a_0}{a_d} \right).$$

*Alors les racines de  $P$  sont toutes dans le disque de centre 0 et de rayon  $L$ .*

Cette inégalité est utilisée à la Section 5.4 pour l'obtention d'un critère d'arrêt pour l'algorithme.





## Part I

# Estimation d'une densité discrète sous contrainte de $k$ -monotonie

### Avant-propos

Cette partie a pour objet l'étude d'un estimateur des moindres carrés pour une densité discrète  $p^*$  sous contrainte de  $k$ -monotonie. Elle est organisée en trois chapitres puis suivie d'une conclusion succincte. Le premier chapitre définit la  $k$ -monotonie dans le cas continu et le cas discret, donne quelques propriétés des fonctions  $k$ -monotones ainsi qu'une décomposition des fonctions  $k$ -monotones discrètes dans une base de splines (Théorème 13) en proposant une preuve différente de celle de Lefevre and Loisel (2013). Le second chapitre regroupe les propriétés liées à l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie. Tous les résultats de ce chapitre peuvent être retrouvés dans l'article Giguelay (2017) et toutes les fonctions R citées sont implémentées dans le package `pkmon`<sup>1</sup> disponible sur le CRAN. Enfin le troisième chapitre regroupe les preuves de cette partie. Il est rédigé en anglais.

---

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

# Chapter 4

## La contrainte de $k$ -monotonie

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Définition de la <math>k</math>-monotonie</b>	<b>51</b>
4.1.1	Rappel sur la convexité	51
4.1.2	La $k$ -monotonie	52
4.1.3	Lien entre la $k$ -monotonie discrète et la $k$ -monotonie continue	54
<b>4.2</b>	<b>Motivation</b>	<b>54</b>
<b>4.3</b>	<b>Écriture en base de splines</b>	<b>56</b>

---

Dans toute cette partie deux types de fonction seront considérés : les fonctions discrètes (à support dans  $\mathbb{N}$ ) d'une part et les fonctions mesurables par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}$  d'autre part. On appellera le premier cas *le cas discret* et le second le *cas continu* par opposition au premier cas, bien que toutes les fonctions considérées ne soient pas continues.

### Définition de la $k$ -monotonie

#### Rappel sur la convexité

On rappelle qu'une fonction réelle  $f$  est convexe si et seulement si elle vérifie l'inégalité suivante :

$$\forall x, y \in \mathbb{R}, \forall t \in [0, 1], f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y),$$

ou l'inégalité dite de croissance des pentes suivante :

$$\forall x \leq y \leq z, \frac{f(y) - f(x)}{y - x} \leq \frac{f(z) - f(x)}{z - x} \leq \frac{f(z) - f(y)}{z - y}.$$

Dans le cas des fonctions deux fois dérivables, la convexité est équivalente à la positivité de la dérivée seconde.

La convexité des suites se définit de la même manière par une inégalité de croissance des pentes. Soit  $p$  une densité discrète et soit  $\Delta^1$  l'opérateur de pente suivant :

$$\Delta^1 p(i) = p(i+1) - p(i)$$

alors on dit qu'une suite  $p$  est convexe si et seulement si l'inégalité suivante est vraie :

$$\forall i \leq j, \Delta^1 p(i) \leq \Delta^1 p(j).$$

De façon équivalente, si  $\Delta^2$  est l'opérateur Laplacien défini par :

$$\forall j \in \mathbb{N}, \Delta^2 p(j) = \Delta^1 p(j+1) - \Delta^1 p(j) = p(j+1) - 2p(j) + p(j-1). \quad (4.1)$$

alors  $p$  est convexe si et seulement si  $\Delta^2 p$  est positif sur tout  $\mathbb{N}$ . En d'autres termes le Laplacien est l'opérateur de différence de pente autour d'un point et constitue une notion analogue à celle de dérivée seconde dans le cas continu. De façon équivalente, dans le cas continu ou le cas discret, une fonction est convexe si et seulement si elle est située au dessus de toutes ses cordes :

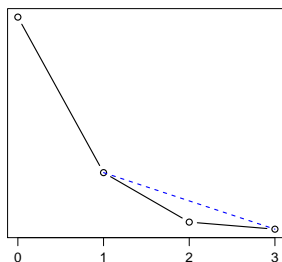


Figure 4.1: Une fonction discrète convexe (en noir) et une de ses cordes (en bleu).

Cette contrainte de forme traduit la forme *en creux intérieur* de la suite (ou fonction). Divers niveaux de creux existent, de la suite la moins creuse (fonction affine) à la plus creuse (fonction à décroissance exponentielle). L'adjectif convexe ne suffit donc pas à donner une indication sur le degré de creux de la suite (ou fonction). La notion de  $k$ -monotonie vient alors généraliser celle de convexité en caractérisant un degré minimal de creux.



Figure 4.2: Deux types de convexité : une fonction triangulaire à gauche, une fonction exponentielle à droite.

### La $k$ -monotonie

La  $k$ -monotonie,  $k$  désignant un entier supérieur à 2, a été définie par Knopp (1925) pour formaliser l'idée de creux. Plus l'entier  $k$  est élevé plus la suite est creuse. La convexité correspond alors à la 2-monotonie, qui regroupe l'ensemble de toutes les suites creuses. Une notion analogue a été définie par Feller (1939) pour les fonctions de la variable réelle. Contrairement à la notion de convexité, la  $k$ -monotonie pour  $k \geq 3$  nécessite alors la continuité et la différentiabilité des fonctions. Dans le cas discret cette définition nécessite une notion analogue à la dérivée  $k$ -ième définie ci-dessous :

**Définition [Laplacien d'ordre  $k$ ]** Soit  $p$  une fonction discrète. Pour tout  $k \in \mathbb{N}^*$  on note  $\Delta^k p$  le  $k$ -ème opérateur Laplacien de la fonction  $p$ . Il est défini par l'égalité suivante :

$$\forall i \in \mathbb{N}, \Delta^k p(i) = \sum_{h=0}^k \binom{k}{h} (-1)^{k-h} p(h+i). \quad (4.2)$$

En particulier  $\Delta^1$  est l'opérateur  $\Delta^1 p(i) = p(i+1) - p(i)$  et l'opérateur  $\Delta^k$  est égal à la composition de  $\Delta^1$  avec lui-même  $k$  fois. On note également que  $\Delta^k p(j) = \Delta^{k-1} p(j+1) - \Delta^{k-1} p(j)$  pour tout  $j \in \mathbb{N}$ . Ainsi pour  $k = 2$  cette notion coïncide avec celle de l'opérateur Laplacien usuel et pour  $k = 1$  avec l'opérateur pente.

La  $k$ -monotonie d'une fonction ou d'une suite est définie ainsi :

**Définition [La  $k$ -monotonie réelle]** Soit  $g$  une fonction mesurable par rapport à la mesure de Lebesgue, définie sur  $\mathbb{R}$  ou sur un intervalle. On dit que :

- $g$  est 1-monotone si elle est positive et décroissante.
- $g$  est 2-monotone si elle est positive, décroissante et convexe.
- $g$  est  $k$ -monotone si elle est de classe  $C^{k-2}$  et que pour tout  $j \in \{0, \dots, k-2\}$ ,  $(-1)^j g^{(j)}$  est positive, décroissante et convexe.

**Définition [La  $k$ -monotonie discrète]** Soit  $p$  une fonction discrète. On dit que  $p$  est  $k$ -monotone sur  $\mathbb{N}$  si  $(-1)^k \Delta^k p(i)$  est positive pour tout  $i \in \mathbb{N}$ .

Une fonction 2-monotone est donc en particulier une fonction convexe. Contrairement au cas continu il n'y a pas besoin dans la définition de la  $k$ -monotonie discrète d'imposer la  $(k-1)$ -monotonie. La propriété suivante établit en effet directement l'emboîtement des espaces de fonctions  $k$ -monotones discrètes :

**Propriété 7.** *Pour tout  $k \geq 2$ , une fonction de masse finie  $k$ -monotone discrète est également  $(k-1)$ -monotone et donc  $j$ -monotone pour tout  $j \leq k$ . De plus une fonction  $k$ -monotone est strictement  $j$ -monotone sur son support pour tout  $j < k$ .*

Cette propriété est montrée à la Section 6.1.1.

On définit les ensembles de fonctions discrètes suivants :

- $\mathcal{S}^k$  est l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones, positives et intégrables sur  $\mathbb{N}$ .
- $\mathcal{P}^k$  est le sous-ensemble des fonctions de  $\mathcal{S}^k$  qui sont des probabilités.
- $\mathcal{S}_L^k$  : l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones dont le maximum du support est inférieur à un entier  $L$ .
- $\mathcal{P}_L^k$  est l'ensemble des probabilités  $k$ -monotones dont le maximum du support est inférieur à un entier  $L$ .

Les fonctions de  $\mathcal{S}^k$  sont caractérisées par les entiers où l'opérateur  $\Delta^k$  est non-nul :

**Définition [les  $k$ -nœuds]** Soit  $p \in \mathcal{S}^k$ , soit  $i \in \mathbb{N}$  tel que  $\Delta^k p(i) > 0$ . Alors  $i$  est appelé un  $k$ -nœud de  $p$ .

En particulier les 2-nœuds sont appelés simplement les nœuds de  $p$ , ce sont les entiers où la distribution  $p$  change de pente. Lorsque  $p$  a un support fini de maximum  $s$ , l'entier  $s$  est un  $k$ -nœud de  $p$ .

### Lien entre la $k$ -monotonie discrète et la $k$ -monotonie continue

Le lien entre la  $k$ -monotonie continue et la  $k$ -monotonie discrète est formalisé par la propriété suivante, prouvée en Section 6.1.2 :

**Propriété 8.** Soit  $g$  une fonction réelle intégrable et positive. On note  $\bar{g}$  la fonction discrète associée à  $g$  : c'est la suite telle que pour tout  $j \in \mathbb{N}$ ,  $\bar{g}(j) = g(j)$ . On suppose que  $g$  est  $k$ -monotone sur  $\mathbb{R}_+$ . Alors  $\bar{g}$  est  $k$ -monotone sur  $\mathbb{N}$ .

En outre notons qu'il existe une bijection entre l'ensemble  $\mathcal{S}^2$  des fonctions convexes discrètes et le sous-ensemble des fonctions convexes de  $\mathbb{R}^+$  et affine par morceaux de nœuds entiers :

$$\Phi : (f : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}) \mapsto (f(0), f(1), f(2), \dots)$$

dont l'application réciproque  $\Phi^{-1}$  associe à une suite  $(f_0, f_1, \dots)$  la fonction  $f$  telle que  $f(i) = f_i$  pour tout entier positif  $i$  et telle que  $f$  est affine entre deux entiers consécutifs. Cette propriété des ensembles convexes n'est pas généralisable à la  $k$ -monotonie.

Si la propriété 8 permet de passer d'une fonction  $k$ -monotone sur un intervalle à une fonction  $k$ -monotone discrète, il n'est pas trivial en revanche, dès que  $k \geq 3$ , de faire passer une densité  $k$ -monotone continue par les points d'une densité  $k$ -monotone discrète. La propriété de différentiabilité des fonctions  $k$ -monotones continues, en particulier, est un facteur limitant.

## Motivation

Plusieurs raisons motivent l'étude d'estimateurs de densité sous contrainte de  $k$ -monotonie et l'étude des fonctions  $k$ -monotones en général. Nous nous concentrons ici seulement sur les raisons liées aux statistiques mais il est également possible de consulter Kopotun et Shadrin (2003) ou Kopotun (1998, 2001) pour une motivation analytique de l'étude de ces fonctions.

### Approcher les modèles de mélange exponentiels

Les fonctions  $k$ -monotones peuvent être vues comme des approximations de fonctions *complètement monotones*, c'est-à-dire  $k$ -monotones pour tout  $k$ . Ces fonctions sont intéressantes de plusieurs points de vue, en particulier elles permettent de construire des modèles de mélange exponentiels. Le théorème de Bernstein (voir Feller, 1939) assure en effet que les fonctions continues complètement  $k$ -monotones sont exactement les fonctions  $g$  infiniment différentiable s'écrivant comme un mélange exponentiel :

$$g(x) = \int_0^\infty t \exp(-tx) dF(t) \quad (4.3)$$

avec  $F$  une mesure de probabilité par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}_+$ . Ce type de mélange est classiquement utilisé pour modéliser la durée d'une population dont le vieillissement est hétérogène, lorsqu'il est difficile de se placer dans un cadre paramétrique, c'est-à-dire de faire une hypothèse sur le nombre de classe dans cette population. Dans le cas discret les mélanges exponentiels peuvent trouver une application en assurance (voir Lefèvre et Loisel, 2013) et vérifient une écriture analogue à l'équation (4.3).

La définition d'estimateurs de maximum de vraisemblance dans ce modèle est immédiate grâce aux résultats généraux sur les modèles de mélange (voir Lindsay, 1995). Il est en revanche difficile d'étudier les lois limites de ces estimateurs en raison de leur définition implicite. La complète monotonie peut être vue comme une *limite* de la  $k$ -monotonie lorsque  $k$  tend vers l'infini, l'étude d'estimateurs sous contrainte de  $k$ -monotonie peut donc servir à approcher des estimateurs pour des modèles de mélange exponentiels. C'est ce point en particulier qui a motivé le travail de thèse de Balabdaoui (2004).

### Des jeux de données de comptage très creuses

Une motivation pour étudier la  $k$ -monotonie discrète est l'existence, parmi les jeux de données réels, de fonctions discrètes convexes d'allure très creuse, dont les estimateurs usuels sont souvent  $k$ -monotones. En particulier de nombreux exemples de distributions d'abondance liées à une population (voir Partie III) vérifient ce point.

La figure ci-dessous présente un exemple de distributions d'abondance issues de Wang (1995, Butterfly) et de Norris and Pollock (1998, Bird). Ces données sont disponibles via les bibliothèques SPECIES<sup>1</sup> et MASS<sup>2</sup> respectivement. Leurs formes très creuses évoquent la  $k$ -monotonie, pour un  $k$  strictement supérieur à 2. Dans la Partie III nous revenons sur ces deux exemples et nous donnons (Chapitre 10) un test de  $k$ -monotonie pour justifier le choix de cette contrainte de forme.

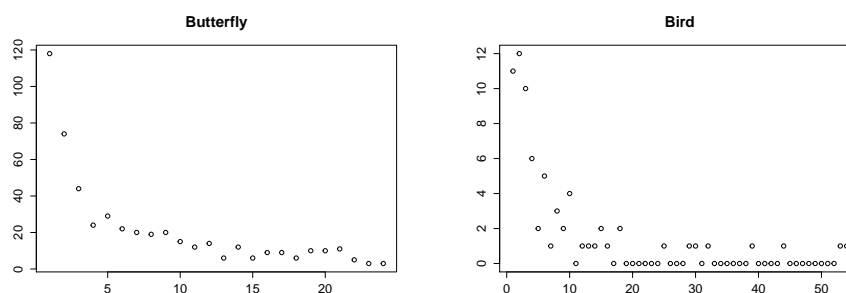


Figure 4.3: Exemples de distributions d'abondance.

### Exemples de fonctions $k$ -monotones

Une dernière motivation commune aux cas continu et discret concerne la richesse de l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones. En effet de nombreuses lois paramétriques classiques vérifient une propriété de  $k$ -monotonie. Ainsi cette contrainte de forme est peu restrictive et peut naturellement s'utiliser dans tous les cadres usuels d'application de ces modèles. A titre d'exemple les lois Gammas, de Weibull ou de Beta pour un certain choix de paramètre, forment des densités continues  $k$ -monotones. De même leurs versions discrétisées ou la loi géométrique sont des fonctions  $k$ -monotones discrètes. Enfin un dernier

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/SPECIES/SPECIES.pdf>

<sup>2</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/MASS/MASS.pdf>



exemple sera donné dans la Section 5.4 dans le cas des lois de Poisson (voir Propriété 32).

Par ailleurs une fonction  $k$ -monotone est typiquement une spline d'ordre  $k - 1$  :

**Propriété 9.** *Pour tout  $j \in \mathbb{N}$  et pour tout  $k \in \mathbb{N}^*$  la fonction  $(j - \cdot)_+^{k-1}$  est une fonction  $k$ -monotone où  $(x)_+$  désigne la partie positive de  $x$ .*

*Proof.* La fonction  $f = (j - \cdot)_+^{k-1}$  est  $k$ -monotone sur  $\mathbb{R}_+$ . □

En particulier pour tout entier  $\tau$ , la distribution triangulaire  $T_\tau$  de support  $\{0, \dots, \tau\}$  définie de la façon suivante :

$$T_\tau(j) = \begin{cases} \frac{2(\tau+1-j)}{(\tau+1)(\tau+2)} & \text{si } j \in \{0, \dots, \tau\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.4)$$

est une distribution convexe de support  $\{0, \dots, \tau\}$ . Elle doit son nom à sa forme de triangle. La figure suivante illustre la Propriété 9. Plus l'entier  $k$  est élevé et plus la fonction est creuse.

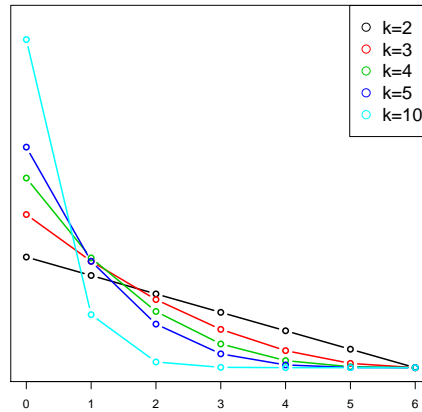


Figure 4.4: Exemple de fonctions  $k$ -monotones de support  $\{0, \dots, 5\}$  pour des degrés de  $k$ -monotonie appartenant à  $\{2, 3, 4, 5, 10\}$ .

## Écriture en base de splines

Williamson (1955) montre une propriété fondamentale des fonctions  $k$ -monotones définies sur  $\mathbb{R}^+$ . Ces dernières sont caractérisées par leur écriture en base de splines :

**Théorème 10** (Williamson, 1955). *Une condition nécessaire et suffisante pour qu'une densité  $g$  définie sur  $[0, \infty[$  soit  $k$ -monotone est l'existence d'une mesure positive et croissante  $\mu$  sur  $\mathbb{R}^*$  telle que :*

$$\forall x \geq 0, g(x) = \int_0^\infty (t - x)_+^{k-1} d\mu(t).$$

Dans cette section une décomposition analogue à celle de Williamson dans le cas des variables discrètes est montrée. Une telle décomposition peut être utilisée aussi bien d'un

point de vue théorique, dans un objectif de modélisation (dans le cadre de l'estimation du nombre d'espèces dans une population il peut être utile de modéliser la loi de la distribution d'abondance de la population comme un mélange de lois connues), que d'un point de vue pratique, pour simuler les densités  $k$ -monotones. Pour  $k = 2$  une telle décomposition a été montrée simultanément par Durot et al. (2013) et Lefèvre et Loisel (2013). Dans le cas où  $k \geq 3$  elle a été montrée par Lefèvre et Loisel (2013). L'heuristique proposée ici diffère de la leur.

**Définition :** [La base de splines  $(Q_j^k)$ ] On définit une famille de splines  $(Q_j^k)_{j \in \mathbb{N}^*}$  de la manière suivante :

$$Q_j^k(i) = C_{j-i+k-1}^{k-1} = \frac{(j-i+k-1) \dots (j-i+1)}{(k-1)!} \mathbb{1}_{j \geq i} \quad (4.5)$$

On note  $m_l^k$  la masse de  $Q_l^k$  :

$$m_l^k = \sum_{i=0}^l Q_l^k(i).$$

**Heuristique** Soit  $k \geq 3$  quelconque. On cherche une famille de splines  $(Q_j^k)_{j \in \mathbb{N}^*}$  telle que pour tout  $f$  discrète,  $f$  est  $k$ -monotone si et seulement si il existe  $\pi$  telle que :

$$f(i) = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k(i) = \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i).$$

Le théorème suivant est à l'origine de la définition de la base de splines.

**Théorème 11** (Hausdorff, 1921). *Une fonction continue  $p : [0, 1] \mapsto \mathbb{R}_+$  est complètement monotone si et seulement si il existe une mesure borélienne  $\mu$  sur  $[0, 1]$  telle que :*

$$\forall i \in \mathbb{N}, p(i) = \int_0^1 x^i d\mu(x), \quad (4.6)$$

ou de façon équivalente si:

$$\forall i \in \mathbb{N}, \forall k \in \mathbb{N}^*, (-1)^k \Delta^k p(i) = \int_0^1 x^i (1-x)^k d\mu(x). \quad (4.7)$$

En effet l'analyse suivante est faite : cherchons des fonctions  $Q_j^k(i)$  telles que l'on ait la décomposition suivante :

$$p(i) = \sum_{j \geq 0} (-1)^k \Delta^k p(j) Q_j^k(i)$$

pour toute fonction  $p$   $k$ -monotone.

Fixons dans un premier temps une fonction  $p$  de la forme  $p(i) = \int_0^1 x^i d\mu(x)$  avec  $\mu$  mesure borélienne quelconque sur  $[0, 1]$ . Ces  $p$  sont en particulier  $k$ -monotones. On va

chercher à identifier la base  $(Q_j^k)$ . On a les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} p(i) &= \int_0^1 x^i d\mu(x) \\ &= \sum_{j \geq 0} (-1)^k \Delta^k p(j) Q_j^k(i) \\ &= \sum_{j \geq i} Q_j^k(i) \int_0^1 x^j (1-x)^k d\mu(x) \\ &= \int_0^1 \sum_{j \geq i} Q_j^k(i) x^j (1-x)^k d\mu(x). \end{aligned}$$

Ceci étant vrai pour toute mesure  $\mu$  borélienne sur  $[0, 1]$  donc pour tout  $x \in [0, 1]$ , on peut en particulier l'appliquer à  $\mu = \delta_x$ . On obtient alors :

$$\sum_{j \geq i} Q_j^k(i) x^j (1-x)^k = x^i$$

c'est-à-dire :

$$\sum_{j \geq 0} Q_{j+i}^k(i) x^j = \frac{1}{(1-x)^k}.$$

Ainsi  $Q_{j+i}^k(i)$  est le  $j$ -ème coefficient de la décomposition en série entière de  $1/(1-x)^k$ . Comme

$$\frac{1}{(1-x)^k} = \left( \sum_{j \geq 0} x^j \right)^k = \sum_{j \geq 0} b_k(j) x^j,$$

où  $b_k(j)$  est le nombre de partitions en  $k$  éléments de  $j$ , on trouve finalement  $Q_j^k(i) = b_k(j-i)$ .

Par ailleurs, comme  $b_k(n) = C_{n+k-1}^{k-1}$ , on obtient :

$$Q_j^k(i) = C_{j-i+k-1}^{k-1} = \frac{(j-i+k-1) \dots (j-i+1)}{(k-1)!} \mathbb{1}_{j \geq i}$$

avec la convention  $C_n^k = 0$  si  $n < k$ .

Ce raisonnement donne l'intuition qu'il faut choisir les  $Q_j^k$  comme en (4.5) pour obtenir une écriture de la forme  $p = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k$ . Enfin, le lemme suivant, qui est une reformulation de la formule du triangle de Pascal termine la preuve. Par ailleurs ce lemme est également un outil clé permettant de généraliser certains résultats établis pour  $k = 2$  (voir Durot, 2013) à  $k \geq 3$  par récurrence.

**Lemme 12.** *Pour tout  $k \geq 3$ , pour tout  $j \in \mathbb{N}$ , pour tout  $i \in \mathbb{N}$  on a l'équation :*

$$\forall i \in \mathbb{N}, Q_j^k(i) - Q_j^k(i+1) = Q_j^{k-1}(i) \quad (4.8)$$

En conclusion il est possible de caractériser les densités discrètes  $k$ -monotones par une écriture en base de splines analogue à la caractérisation donnée par le théorème de Williamson. L'énoncé exact est énoncé ci-dessous :

**Théorème 13** (Décomposition en base de spline). *Soit  $f$  une densité de masse finie sur  $\mathbb{N}$ . On note  $\mathcal{M}_+$  le cône des mesures positives sur  $\mathbb{N}$ ,  $\mathcal{S}^k$  l'ensemble des fonctions  $k$ -monotone sur  $\mathbb{N}$  et  $\mathcal{P}^k$  le sous-ensemble des fonctions de  $\mathcal{S}^k$  qui sont des probabilités. Les trois propriétés suivantes sont satisfaites :*

- $f \in \mathcal{S}^k$  si et seulement si il existe  $\pi \in \mathcal{M}_+$  telle que pour tout  $i \in \mathbb{N}$  :

$$f(i) = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k(i) = \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i). \quad (4.9)$$

où les  $Q_j^k$  sont définies par (4.5). En particulier les  $Q_j^k$  sont  $k$ -monotones.

- Si  $f \in \mathcal{S}^k$ ,  $\pi$  est unique et définie de la sorte :

$$\forall j \geq 0, \pi(j) = (-1)^k \Delta^k f(j). \quad (4.10)$$

- Si  $f \in \mathcal{S}^k$ , on a  $f \in \mathcal{P}_k \Leftrightarrow \tilde{\pi}$  est une probabilité où  $\tilde{\pi}$  est définie par  $\tilde{\pi}_j = \pi(j) \sum_{i=0}^j Q_j^k(i)$  pour tout  $j \in \mathbb{N}$ .

Ce résultat est montré à la Section 6.1.3. Dans le cas où  $k = 2$ , le mélange est visuel :

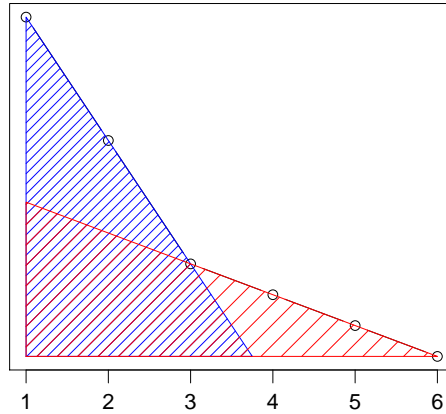


Figure 4.5: Une fonction convexe mélange de deux fonctions triangulaires.

Enfin, remarquons que les splines  $Q_j^k$  peuvent se calculer de manière explicite par récurrence :

**Exemple 1.** Par exemple pour de faibles valeurs de  $k$ , on obtient :

- Pour  $k = 2$ ,  $Q_j^2(i) = (j + 1 - i)_+$  est la triangulaire  $T_j$  non-renormalisée.
- Pour  $k = 3$ ,  $Q_j^3(i) = \frac{1}{2} ((j + 1 - i)_+^2 + (j + 1 - i)_+)$ .
- Pour  $k = 4$ ,  $Q_j^4(i) = \frac{1}{6} ((j + 1 - i)_+^3 - (j + 1 - i)_+)$ .
- Pour  $k = 5$ ,  $Q_j^5(i) = \frac{1}{24} ((j + 1 - i)_+^4 + 2(j + 1 - i)_+^3 - (j + 1 - i)_+^2 - 2(j + 1 - i)_+)$ .

Le R-package `pkmon`<sup>3</sup> permet d'accéder directement à ces splines. Notons que le prolongement de ces splines à  $\mathbb{R}$  (en gardant la même écriture analytique pour une variable continue  $x$ ) n'est pas une fonction  $k$ -monotone continue. En effet la fonction réelle obtenue

<sup>3</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

n'est pas différentiable au dernier point du support.

La décomposition des fonctions  $k$ -monotones en base de splines est un résultat-clé dans l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie du Chapitre 5. Elle permet à la fois de caractériser l'estimateur, de montrer des propriétés sur sa loi limite et de l'implémenter.

# Chapter 5

## Estimateurs des moindres carrés sous contrainte de $k$ -monotonie

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>L'estimateur sous contrainte de <math>k</math>-monotonie sur l'espace des fonctions . . . . .</b>	<b>62</b>
<b>5.2</b>	<b>L'estimateur sous contrainte de <math>k</math>-monotonie sur l'espace des probabilités . . . . .</b>	<b>64</b>
<b>5.3</b>	<b>Propriétés communes aux deux estimateurs . . . . .</b>	<b>65</b>
5.3.1	Supports . . . . .	65
5.3.2	Propriétés statistiques de $\hat{p}$ lorsque $p^*$ est $k$ -monotone . . . . .	66
5.3.3	Propriétés asymptotiques de $\hat{p}$ . . . . .	67
<b>5.4</b>	<b>Implémentation . . . . .</b>	<b>67</b>
5.4.1	Minimisation sur un support fixé par réduction de support pour l'estimation sur $f^k$ . . . . .	68
5.4.2	Minimisation sur un support fixé par réduction de support pour l'estimation sur $\mathcal{P}^k$ . . . . .	70
	Adaptation de l'Algorithme de Réduction de Support . . . . .	70
5.4.3	Le critère d'arrêt . . . . .	71
<b>5.5</b>	<b>Simulations . . . . .</b>	<b>73</b>
	Description . . . . .	73
5.5.1	Simulation Design . . . . .	74
5.5.2	Global fit . . . . .	74
	Estimators comparison based on the $l_2$ -loss . . . . .	74
	Estimators comparison based on the Hellinger loss . . . . .	78
5.5.3	Some characteristics of interest . . . . .	81
	Entropy . . . . .	81
	Probability mass in 0. . . . .	82
	Variance . . . . .	83
5.5.4	About the mass of the non-constrained estimator $\hat{p}^{*k}$ . . . . .	84
5.5.5	Conclusion of simulations . . . . .	87

---

**Problème statistique** Soit  $p^*$  une distribution de probabilité discrète. Soient  $X_1, \dots, X_n$ ,  $n$  réalisations indépendantes de loi  $p^*$ . On note  $\tilde{p}_n$  l'estimateur empirique de  $p^*$  :

$$\tilde{p}_n(j) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}_{\{X_i=j\}}.$$

L'objet de ce chapitre est l'estimation de la densité discrète  $p^*$  sous contrainte de  $k$ -monotonie. Les espaces de fonctions  $k$ -monotones étant emboîtés (voir Propriété 7), ce travail est motivé par l'idée que le fait d'utiliser le *vrai* degré de monotonie  $k$  (c'est-à-dire celui tel que  $p^*$  est  $k$ -monotone et non  $(k+1)$ -monotone) plutôt qu'un estimateur sous contrainte de convexité, entraîne la recherche de l'estimateur sur un espace plus restreint, et donc un gain en vitesse d'estimation. De fait les simulations réalisées dans la Section 5.5 confortent cette idée : la perte quadratique de l'estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie diminue lorsque  $k$  s'approche du vrai degré de monotonie.

Les splines  $Q_j^k$  étant définies par itération certains résultats se déduisent simplement du cas  $k=2$  par récurrence. Néanmoins des différences entre les cas  $k=2$  et  $k \geq 3$  surviennent. En particulier l'estimateur des moindres carrés sur l'espace des fonctions  $k$ -monotones (Section 5.1) n'est pas une probabilité lorsque  $k \geq 3$  tandis qu'il l'était pour  $k=2$ . Ce fait justifie la définition d'un second estimateur (Section 5.2) contraint à avoir une masse égale à 1.

Ce chapitre est organisé ainsi : Les deux estimateurs sont définis et brièvement étudiés aux Sections 5.1 et 5.2 respectivement. Leurs propriétés sont données à la Section 5.3. La Section 5.4 décrit une méthode d'implémentation dérivée de l'Algorithme de Réduction de Support. Enfin une étude sur jeux de données simulées est proposée à la Section 5.5. Toutes les preuves peuvent être trouvées au chapitre 6.

## L'estimateur sous contrainte de $k$ -monotonie sur l'espace des fonctions

Puisque l'ensemble  $\mathcal{S}^k$  des distributions  $k$ -monotone sur  $\mathbb{N}$  est convexe et fermé dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{L}^2(\mathbb{N})$ , le théorème de projection de Banach assure l'existence pour chaque  $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{N})$  d'un unique projeté orthogonal sur  $\mathcal{S}^k$  pour la norme quadratique. En d'autres termes il est possible de définir de manière unique un estimateur  $\hat{p}^{*k}$  des moindres carrés sur l'espace des fonctions  $k$ -monotones discrètes. Plus formellement  $\hat{p}^{*k}$  est défini de la manière suivante :

$$\hat{p}^{*k} = \operatorname{argmin}\{\|f - \tilde{p}_n\|_2, f \in \mathcal{S}^k\} \quad (5.1)$$

Il existe et est unique. C'est la fonction  $k$ -monotone qui approche le mieux l'empirique au sens de la norme quadratique. On l'appelle estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie sur l'espace des fonctions. Lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté on notera  $\tilde{p}$  et  $\hat{p}^{*k}$  plutôt que  $\tilde{p}_n$  et  $\hat{p}_n^{*k}$ .

En particulier cet estimateur est une fonction positive. En effet,  $\hat{p}^{*k}$  est convexe sur  $\mathbb{N}$ , donc strictement décroissant. Supposons que  $\hat{p}^{*k}$  soit négatif en un point  $i$ , il serait donc négatif sur  $i, +\infty$  ce qui contredirait son intégrabilité.

Le point clé de nombreux résultats sur l'estimateur  $\hat{p}^{*k}$  est la caractérisation qui va suivre de l'estimateur par sa primitive  $k$ -ième. Nous verrons à la Section 5.4 qu'elle est également l'élément central de l'implémentation. Pour toute densité  $f$  on définit les

primitives  $j$ -ème de  $f$  ainsi :

$$\forall l \in \mathbb{N}, \begin{cases} F_f^1(l) = F_f(l) = \sum_{i=0}^l f(i), \\ \forall j \geq 2, F_f^j(l) = \sum_{i=0}^l F_f^{j-1}(l). \end{cases}$$

La caractérisation suivante est vérifiée :

**Théorème 14** (Caractérisation de  $\widehat{p}^{*k}$ ). *Soit  $p$  une fonction discrète  $k$ -monotone. Il y a équivalence entre :*

1.  $p = \widehat{p}^{*k}$ .
2. (a) Pour tout  $l \in \mathbb{N}$ , l'inégalité suivante est vérifiée :  $F_p^k(l) \geq F_{\widehat{p}_n}^k(l)$   
 (b) Si  $l$  est un  $k$ -nœud de  $\widehat{p}^k$ , alors il y a égalité dans l'inégalité 2.(a).

La preuve de ce résultat, donnée à la Section 6.2.1, utilise les propriétés de récurrence intrinsèques à la famille de splines  $(Q_j^k)$ . Dans le cas où  $k = 2$ , soient  $\widehat{s}_n$  et  $\widetilde{s}_n$  les maxima des supports respectifs de  $\widehat{p}_n^{*2}$  et  $\widetilde{s}_n$ . Comme  $\widehat{s}_n$  est un  $k$ -nœud de  $\widehat{p}^{*2}$  et que  $\widehat{s}_n \geq \widetilde{s}_n$ , on obtient :

$$F_{\widehat{p}^{*k}}^1(\widehat{s}_n) = F_{\widehat{p}_n}^1(\widehat{s}_n) = 1.$$

Une conséquence de cette propriété est alors le fait que l'estimateur  $\widehat{p}^{*2}$  est une probabilité (voir Durot et al., 2013). Cette propriété ne s'étend pas au cas où  $k \geq 3$  ainsi que l'illustre le contre-exemple suivant :

**Lemme 15.** *Soit  $\delta_1$  la masse de Dirac en 1. Le projeté de  $\delta_1$  sur les fonctions 3-monotones est :*

$$p = \frac{3}{238} Q_5^3 + \frac{1}{238} Q_6^3,$$

où  $(Q_j^3)$  désigne la base de splines usuelle :

$$Q_j^3(i) = \frac{1}{2} \left( (j+1-i)_+^2 + (j+1-i)_+ \right).$$

La masse de  $p$  est d'environ 1.06.

Ce lemme est montré à la Section 6.2.4. Ce résultat est analogue à celui montré dans Balabdaoui (2003) dans le cas de densités réelles :

**Théorème 16** (Balabdaoui, 2003). *Soit  $k$  un entier supérieur à 2. On note  $m_1$  la masse de la projection d'une masse de Dirac sur l'espace des fonctions continues  $k$ -monotones. Alors l'égalité suivante est montrée :*

$$m_1 = \frac{2k-2}{k} \left( 1 - \frac{1}{2k-1} \right)^{k-2}$$

En particulier lorsque  $k$  tend vers l'infini la limite suivante est vérifiée :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} m_1 = 2e^{-1/2} \simeq 1.21.$$



Dans le cas discret les résultats suivants sur la masse de l'estimateur  $\widehat{p}^{*k}$  sont montrés (voir Section 6.2.5) :

**Propriété 17.** *Supposons que  $p^*$  soit une densité  $k$ -monotone.*

1. *Presque sûrement la masse  $m(\widehat{p}^{*k})$  de  $\widehat{p}^{*k}$  converge vers 1.*
2. *La masse de  $\widehat{p}^{*k}$  est supérieure à 1.*

La preuve de cette propriété s'appuie sur la finitude du support de  $\widehat{p}^{*k}$  qui est énoncée au Théorème 20.

## L'estimateur sous contrainte de $k$ -monotonie sur l'espace des probabilités

L'estimateur  $\widehat{p}^{*k}$  sous la contrainte de  $k$ -monotonie sur l'espace des fonctions n'étant pas (en général) une probabilité pour  $k \geq 3$ , un second estimateur est défini pour tenir compte de cette seconde contrainte. Ce second estimateur est noté  $\widehat{p}^k$ . Il s'agit du projeté de l'estimateur empirique sur l'espace des probabilités  $k$ -monotones :

$$\widehat{p}^k = \operatorname{argmin}\{\|f - \widetilde{p}_n\|_2, f \in \mathcal{S}^k \cap \mathcal{P} = \mathcal{P}^k\}. \quad (5.2)$$

où  $\mathcal{S}^k$ ,  $\mathcal{P}^k$  et  $\mathcal{P}$  désignent respectivement les ensembles des fonctions  $k$ -monotones, des probabilités  $k$ -monotones, et des probabilités sur  $\mathbb{N}$ . L'ensemble  $\mathcal{P}^k$  étant également convexe et fermé, le Théorème de Banach pour la projection sur un convexe fermé assure l'existence et l'unicité de cet estimateur.

Une caractérisation analogue à celle du Théorème 14 est vérifiée pour ce nouvel estimateur contraint. Elle nécessite la définition d'une fonction  $\beta$  de  $f$  :

$$\beta(f) = \sum_{i=0}^{\infty} f(i)(f(i) - \widetilde{p}_n(i)). \quad (5.3)$$

**Théorème 18** (Caractérisation de  $\widehat{p}^k$ ). *Soit  $p$  est une densité  $k$ -monotone. Il y a équivalence entre :*

1.  $p = \widehat{p}^k$ .
2. (a) *Pour tout  $l \in \mathbb{N}$ , l'inégalité suivante est vérifiée :*

$$F_p^k(l) - F_{\widetilde{p}_n}^k(l) \geq \beta(p)m_l^k, \quad (5.4)$$

où  $m_l^k$  désigne la masse de  $Q_l^k$  :  $m_l^k = \sum_{i=0}^l Q_l^k(i)$ .

- (b) *Si  $l$  est un  $k$ -nœud de  $\widehat{p}^k$ , alors il y a égalité dans l'inégalité (5.4).*

La preuve de cette caractérisation se trouve à la Section 6.2.1. La propriété suivante établit le lien entre les deux estimateurs :

**Propriété 19.** *Soient  $\widehat{p}^k$  et  $\widehat{p}^{*k}$  définis par les équations (5.1) et (5.2), et soit  $\beta$  défini par l'équation (5.3). Le coefficient  $\beta(\widehat{p}^k)$  est nul si et seulement si  $\widehat{p}^k = \widehat{p}^{*k}$ .*

*Proof.* Il s'agit d'une application directe des Théorèmes 14 et 18. □

Notons qu'en particulier dans le cas où  $k = 2$ ,  $\widehat{p}^{*2}$  est exactement  $\widehat{p}^2$ .

## Propriétés communes aux deux estimateurs

Les deux estimateurs  $\hat{p}^k$  et  $\hat{p}^{*k}$  vérifient des propriétés communes. Dans ce cas l'écriture  $\hat{p}$  désignera l'un ou l'autre de ces deux estimateurs.

### Supports

Nous commençons par énoncer le résultat fondamental suivant dont la preuve peut être trouvée à la Section 6.2.2. En particulier ce résultat est essentiel pour assurer la possibilité de calculer les estimateurs en pratique.

**Théorème 20.**  *$\hat{p}$  est une densité à support fini.*

Dans le cas convexe la preuve de ce résultat est simple : en raisonnant par l'absurde si le support de l'estimateur est infini, on construit une autre fonction convexe qui approche mieux l'empirique que  $\hat{p}^{*k}$  en prolongeant  $\hat{p}^{*k}$  par une fonction affine au delà de  $\tilde{s}_n - 1 = \max(\text{supp}(\tilde{p}_n)) - 1$ . La figure 5.1 illustre cette heuristique.

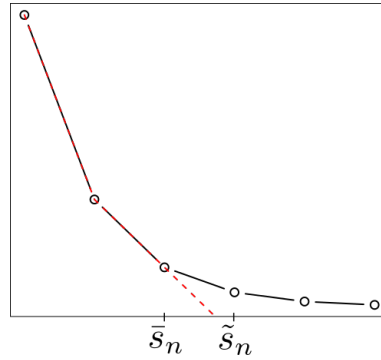


Figure 5.1: Heuristique de la preuve du Théorème 20, pour  $k = 2$ . En noir,  $\hat{p}_n$ , en rouge une fonction convexe qui approche mieux l'empirique que  $\hat{p}_n$ , de maximum de support  $\bar{s}_n$ .

Cette preuve ne peut s'étendre au cas où  $k \geq 3$ , car il est alors difficile de prolonger  $\hat{p}^k$  à l'aide d'une fonction  $k$ -monotone de sorte que la nouvelle fonction ainsi définie soit encore  $k$ -monotone en général. Il devient nécessaire de considérer le comportement entre deux  $k$ -nœuds consécutifs. La preuve de ce résultat pour  $\hat{p}^k$  s'appuie sur le fait que l'estimateur sur l'espace des fonctions  $\hat{p}^{*k}$  vérifie lui-même la propriété.

La propriété suivante établit un résultat sur la répartition des  $k$ -nœuds de  $\hat{p}$  en fonction des maxima des supports de  $\tilde{p}$  et de  $\tilde{p}$  :

**Propriété 21.** *Soient  $\tilde{s}$  et  $\hat{s}$  les maxima des supports de  $\tilde{p}$  et  $\hat{p}^k$  respectivement. Supposons que  $\tilde{s} \leq \hat{s} - 1$ . Alors :*

- *Si  $k$  est impair :  $\hat{p}$  ne possède pas de  $k$ -nœuds sur  $\{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 1\}$ .*
- *Si  $k$  est pair :  $\hat{p}$  ne possède pas de  $k$ -nœuds sur  $\{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 2\}$ .*

La preuve de cette propriété est donnée à la Section 6.2.6. On peut remarquer que le résultat concernant  $\hat{s}$  est plus faible que celui obtenu dans le cas convexe. En effet pour  $k = 2$ , il a été montré dans Durot et al. (2013) que  $\hat{s} \geq \tilde{s}$  et ainsi que  $\hat{s} = s$  pour  $n$  assez

grand si  $p^*$  a un support fini. La question de savoir si une telle propriété s'étend au cas  $k \geq 3$  est toujours ouverte. Cependant les simulations de la Section 5.5 laissent penser que ce résultat reste vrai pour  $k \geq 3$ .

### Propriétés statistiques de $\hat{p}$ lorsque $p^*$ est $k$ -monotone

Pour commencer nous allons énoncer deux propriétés théoriques de l'estimateur  $\hat{p}$  afin de comparer sa qualité d'estimation à celle de l'estimateur empirique usuel  $\tilde{p}$ . La première propriété montre que l'estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie est meilleur que  $\tilde{p}$  (au sens de la norme quadratique) pour estimer une fonction  $f$   $k$ -monotone. La preuve est analogue pour l'estimateur sous contrainte de convexité dans Durot et al. (2013) en remplaçant les lois triangulaires par des lois  $Q_j^k$ , elle est donc omise.

**Propriété 22.** *Supposons que  $p^*$  est une densité  $k$ -monotone. L'inégalité suivante est vérifiée pour tout  $f \in \mathcal{P}^k$  :*

$$\|f - \hat{p}\|_2 \leq \|f - \tilde{p}\|_2$$

avec une inégalité stricte si  $\tilde{p}$  n'est pas  $k$ -monotone. De plus s'il existe un entier  $i$  tel que  $\Delta^k p^*(i) = 0$  alors pour tout  $f \in \mathcal{P}^k$  on a :

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(\|f - \hat{p}\|_2 < \|f - \tilde{p}\|_2) \geq 1/2.$$

En particulier si  $p^*$  est  $k$ -monotone et non-strictement  $k$ -monotone, l'estimateur  $\hat{p}$  est strictement meilleur que  $\tilde{p}$  au sens de la norme 2 avec probabilité supérieure à 1/2. La qualité d'estimation non-asymptotique sera abordée plus en profondeur lors de la Partie II. En particulier une borne de type oracle adaptative y est calculée. La seconde propriété compare les moments de  $\hat{p}$  et  $\tilde{p}_n$ . La preuve est à la Section 6.2.7.

**Propriété 23** (Moments de  $\hat{p}$  et  $\tilde{p}$ ). *Supposons que  $p^*$  est une densité  $k$ -monotone. On note  $\hat{s}$  et  $\tilde{s}$  les maxima des supports respectifs de  $\hat{p}$  et  $\tilde{p}$ . Alors pour tout  $u \geq \max(1, k-3)$  et pour tout  $0 \leq a \leq \hat{s}$  on a l'inégalité suivante :*

$$\sum_{i \geq 0} |i - a|^u (\hat{p}(i) - \tilde{p}(i)) \geq \beta(\hat{p}) m(a, u),$$

avec  $m(a, u) = \sum_{i=0}^a (a - i)^u$ . De plus  $\hat{p}(0) - \tilde{p}(0) \geq \beta(\hat{p})$ .

Si  $\hat{p}$  satisfait  $\beta(\hat{p}) = 0$ , le résultat est le même que celui obtenu dans le cas convexe. En ce cas les deux estimateurs sont confondus.

D'autres résultats statistiques auraient également pu être développés pour étendre ceux établis dans le cas convexe. En particulier Balabdaoui and Durot (2015) ont étudié la différence entre les deux sommes cumulées  $F_{\hat{p}}^1$  et  $F_f^1$  de l'estimateur sous contrainte de convexité d'une part et d'une distribution convexe quelconque d'autre part. Elles ont montré l'inégalité de Marshall suivante :

$$\|F_{\hat{p}}^1 - F_f^1\|_{\infty} \leq \|F_{\tilde{p}}^1 - F_f^1\|_{\infty}.$$

Un tel résultat pourrait raisonnablement être étendu au cas  $k \geq 3$ .

## Propriétés asymptotiques de $\hat{p}$

Dans cette section nous considérons les propriétés asymptotiques de  $\hat{p}$  lorsque la taille  $n$  de l'échantillon tend vers l'infini. Nous établissons pour commencer la consistance de  $\hat{p}$ .

**Théorème 24.** *Pour tout  $r \in [2, +\infty]$  le résultat suivant est vérifié :*

$$\sqrt{n} \|p_{\mathcal{P}^k} - \hat{p}\|_r = O_P(1)$$

où  $p_{\mathcal{P}^k} = \operatorname{argmin}\{\|f - p\|_2, f \in \mathcal{S}^k\}$  est le projeté orthogonal de  $p^*$  sur  $\mathcal{P}^k$ .

En particulier si  $p^*$  est  $k$ -monotone, la convergence de  $\hat{p}$  vers  $p^*$  est de l'ordre de  $\sqrt{n}$  pour la norme quadratique. L'estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie discrète est *semi-paramétrique*.

**Le cas où  $p^*$  est de support fini** Dans le cas particulier où  $p^*$  est de support fini, il est possible de caractériser le comportement asymptotique des  $k$ -nœuds de  $\hat{p}$  et de donner une borne pour le maximum du support de  $\hat{p}$ , noté  $\hat{s}$ . Si de plus  $p^*$  est  $k$ -monotone on peut caractériser le comportement asymptotique des  $k$ -nœuds et du maximum du support de  $\hat{p}$ . La propriété suivante évalue la qualité d'estimation des  $k$ -nœuds d'une distribution  $k$ -monotone. Sa preuve figure en Section 6.2.9.

**Propriété 25.** *Supposons que  $p^*$  soit une densité  $k$ -monotone de support fini.*

1. *Soit  $r \in \mathbb{N}$  un  $k$ -nœud de  $p^*$ . Alors avec probabilité 1, il existe un rang  $n_0$  tel que pour tout  $n \geq n_0$ ,  $r$  est un  $k$ -nœud de  $\hat{p}$ .*
2. *Soient respectivement  $s$  et  $\hat{s}$  les maxima des supports de  $p$  et  $\hat{p}$ . Alors avec probabilité 1, il existe un rang  $n_0 \in \mathbb{N}$  tel que pour tout  $n \geq n_0$  :*
  - $\hat{s} \leq s$  si  $k$  est pair
  - $\hat{s} \leq s + 1$  si  $k$  est impair

La preuve est basée sur le fait que pour tout  $j \in \mathbb{N}$ ,

$$\mathbb{P} \left( \lim_{n \rightarrow \infty} (-1)^k \Delta^k \hat{p}(j) = (-1)^k \Delta^k p^*(j) \right) = 1.$$

Ainsi si  $j$  est un  $k$ -nœud de  $p^*$ , alors  $(-1)^k \Delta^k \hat{p}(j)$  est strictement positif à partir d'un certain rang  $n$ . Réciproquement si  $j$  n'est pas un  $k$ -nœud de  $p^*$ , cela signifie que  $\Delta^k p^*(j) = 0$  et alors  $(-1)^k \Delta^k \hat{p}(j)$  est strictement positif pour  $n$  assez grand. C'est pourquoi l'ensemble des  $k$ -nœuds de  $\hat{p}$  n'est pas un estimateur consistant de l'ensemble des  $k$ -nœuds de  $p^*$ .

## Implémentation

L'algorithme implémenté pour calculer les estimateur  $\hat{p}^{*L}$  et  $\hat{p}^k$  sous contrainte de  $k$ -monotonie comporte deux étapes. Dans un premier temps il s'agit de calculer, pour un entier  $L \in \mathbb{N}^*$  fixé, les estimateurs  $\hat{p}_n^L$  et  $\hat{p}_n^{*L}$  sous la double contrainte de  $k$ -monotonie et de support inclus dans  $\{0, \dots, L\}$  :

$$\hat{p}_n^{*L} = \operatorname{argmin}\{\|\tilde{p}_n - q\|_2, q \in \mathcal{S}_L^k\}, \quad (5.5)$$

$$\hat{p}_n^L = \operatorname{argmin}\{\|\tilde{p}_n - q\|_2, q \in \mathcal{P}_L^k\}, \quad (5.6)$$

où  $\mathcal{S}_L^k$  désigne l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones dont le support est inclus dans  $\{0, \dots, L\}$  et  $\mathcal{P}_L^k$  désigne l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones dont le support est inclus dans  $\{0, \dots, L\}$ . Cette partie de l'algorithme est l'analogie de celle décrite dans Durot et al. (2013), dans le cas où  $k = 2$ , mais a nécessité pour le calcul de  $\widehat{p}_n^L$ , une adaptation pour obtenir une probabilité.

La seconde étape consiste à déterminer une caractérisation des estimateurs, calculable en pratique, qui permette de déterminer si  $\widehat{p}^L = \widehat{p}$  (respectivement  $\widehat{p}^{*L} = \widehat{p}^*$ ). Cette caractérisation, appelée *critère d'arrêt* de l'algorithme, est basée sur les Théorèmes 14 et 18.

On commencera par étudier l'implémentation de  $\widehat{p}_n^{*L}$ . L'algorithme choisi est une méthode de réduction de support introduite par Groeneboom et al. (2008). Il s'agit d'une méthode de type descente de gradient. L'avantage de cette méthode est de retourner un estimateur exact en un nombre fini de calcul relativement faible en pratique. Nous aborderons ensuite l'adaptation de cet algorithme pour le calcul de  $\widehat{p}_n^L$  et enfin nous donnerons un critère d'arrêt pour chacun des deux algorithmes. Les algorithmes présentés sont disponibles au R-package `pkmon`<sup>1</sup>.

### Minimisation sur un support fixé par réduction de support pour l'estimation sur $f^k$

Dans cette section  $L$  désigne un entier naturel non-nul fixé. On rappelle que les fonctions  $f$   $k$ -monotones sur  $\mathbb{N}$  s'écrivent sous la forme :

$$\forall i \in \mathbb{N}, f(i) = \sum_{j \geq i} \mu(j) Q_j^k(i) \quad (5.7)$$

avec  $\mu$  une mesure positive sur  $\mathbb{N}$ . Il est donc équivalent de minimiser la distance à  $\widetilde{p}_n$  sur l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones ou de minimiser la fonction  $\Psi$  sur l'ensemble des mesures positives  $\mu$  où  $\Psi$  est définie ainsi :

$$\begin{aligned} \Psi(\mu) &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{+\infty} \left( \sum_{j \geq i} \mu(j) Q_j^k(i) \right)^2 - \sum_{i=0}^{+\infty} \widetilde{p}(i) \sum_{j \geq i} \mu(j) Q_j^k(i) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \left( \sum_{j \geq i} \mu(j) Q_j^k(i) - \widetilde{p}(i) \right)^2 - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

En effet  $\|f - \widetilde{p}\|_2^2 = 2\Psi(\mu) + \sum_{i=0}^{+\infty} \widetilde{p}^2$  si  $f$  s'écrit comme en (5.7).

**Remarque 1:** Comme  $\|\cdot\|_2^2$  est convexe,  $\Psi$  est également une fonction convexe.

On rappelle que  $\mathcal{M}$  est l'ensemble des mesures sur  $\mathbb{N}$  et  $\mathcal{M}_+$  celui des mesures positives sur  $\mathbb{N}$ . On appelle  $\mathcal{M}_+^L$  l'ensemble des mesures positives  $\mu$  à support inclus dans  $\{0, \dots, L\}$ . L'objectif de cette section est donc de minimiser  $\Psi$  sur  $\mathcal{M}_+^L$ . On définit également  $\mathcal{M}^L$  l'ensemble des mesures de signe quelconque à support inclus dans  $\{0, \dots, L\}$ . Enfin  $\widehat{\pi}^*$  la mesure positive sur  $\mathbb{N}$  telle que l'estimateur  $\widehat{p}^{*k}$  s'écrit sous la forme :

$$\forall i \in \mathbb{N}, \widehat{p}^{*k}(i) = \sum_{j \geq i} \widehat{\pi}^*(j) Q_j^k(i), \quad (5.8)$$

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

et  $\widehat{\pi}^{*L}$  désigne le minimisateur de  $\Psi$  sur  $\mathcal{M}_+^L$ . On a donc :

$$\forall i \in \mathbb{N}, \widehat{p}^{*L}(i) = \sum_{j \geq i} \widehat{\pi}^{*L}(j) Q_j^k(i). \quad (5.9)$$

L'algorithme que nous proposons calcule  $\widehat{\pi}^{*L}$  en un nombre fini d'étapes. Il est basé sur la méthode de Réduction de Support proposé par Groeneboom et al. (2008). Cet algorithme repose sur la décroissance de la dérivée directionnelle à chaque itération. Cette approche est commune à tous les algorithmes de type "Vertex Direction Method" et plus généralement à tous les algorithmes de descente de gradient. La notion de dérivée directionnelle est définie ainsi : soit  $\nu$  une mesure positive de  $\mathbb{R}^L$ , la dérivée directionnelle de  $\Psi$  dans la direction  $\nu$  vaut :

$$\forall \mu \in \mathcal{M}, D_\nu^* \Psi(\mu) = \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi(\mu + \varepsilon \nu) - \Psi(\mu)).$$

L'Algorithme de Réduction de Support est basé sur le fait que  $\widehat{\pi}_L$  est solution de (5.9) si et seulement si les dérivées directionnelles de  $\widehat{\pi}_L$  dans la direction  $\nu = \delta_j$  (avec  $\delta_j$  la loi de Dirac en  $j$ ) sont toutes positives. De plus ces dérivées sont nulles exactement pour les  $j$  dans le support de  $\widehat{\pi}_L$ . A partir de cette propriété l'Algorithme de Réduction de Support est construit en deux étapes. Dans la première étape le support de la probabilité courante  $\mu$  est augmenté d'un point  $j$  tel que la dérivée directionnelle  $D_{\delta_j} \Psi(\mu)$  est strictement négative (si cela existe). Dans la seconde étape le support courant est réduit jusqu'à obtenir une mesure positive. Il s'énonce ainsi :

- **Initialisation :**  
 $S \leftarrow \{L\}$   
 $\pi^L \leftarrow \delta_L$
- **Etape 1 :**  
 Pour tout  $j \in \{0, \dots, L\}$  calculer la quantité  $D_{\delta_j}^* \Psi(\pi)$ .  
**Cas 1 :** Si pour tout  $j \in \{0, \dots, L\}$ ,  $D_{\delta_j}^* \Psi(\pi) \geq 0$   
 Renvoyer  $\pi$ .  
**Cas 2 :** Sinon choisir  $j \in \{0, \dots, L\}$  tel que  $D_{\delta_j}^* \Psi(\pi) < 0$ .  
 $S' \leftarrow S + \{j\}$ .  
 Aller en Etape 2.
- **Etape 2 :**  
 $\pi_{S'}^* \leftarrow \operatorname{argmin}\{\Psi(\pi), \operatorname{supp}(\pi) \subset S'\}$ .  
**Cas 1 :** Si pour tout  $l \in S'$ ,  $\pi_{S'}^*(l) \geq 0$   
 $\pi^L \leftarrow \pi_{S'}^*$   
 $S \leftarrow S'$   
 Retourner en Etape 1.  
**Cas 2 :** Sinon :  
 $l \leftarrow \operatorname{argmin}_{j' \in S'} \left\{ \varepsilon_{j'} = \frac{\pi_{j'}^L}{\pi_{j'}^L - \pi_{S'}^*(j')}, \text{ pour } j', \pi_{S'}^*(j') < \pi_{j'}^L \right\}$   
 $S' \leftarrow S' - \{l\}$   
 Retourner en Etape 2.

**Théorème 26.** *Cet algorithme renvoie  $\widehat{\pi}_n^L$  en un nombre fini d'étapes.*

Ce théorème se montre de la même manière que pour le cas  $k = 2$ , voir Durot et al. (2008), la preuve est donc ommise. L'algorithme est très proche de celui développé par Balabdaoui et Wellner (2010) dans le cas continu. Dans ce cas une question délicate concerne

le choix d'une grille finie  $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_L\}$  de valeurs de support sur laquelle appliquer l'algorithme de Réduction de Support. Cette complication explique des différences dans les temps de calcul entre les deux cas ainsi que la délivrance par l'algorithme final d'un estimateur approché dans le cas continu.

### Minimisation sur un support fixé par réduction de support pour l'estimation sur $\mathcal{P}^k$

Nous proposons d'adapter l'Algorithme de Réduction de Support pour y intégrer la condition de masse 1 afin de calculer  $\hat{p}^k$ . Cette condition peut être vue comme une condition de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) (voir Section 3.4.1).

#### Adaptation de l'Algorithme de Réduction de Support

Le maximum du support  $L \in \mathbb{N}^*$  étant fixé, il s'agit de calculer  $\hat{\pi}_L^k$  l'estimateur sous-contrainte de  $k$ -monotonie sur l'ensemble des probabilités dont le support est inclus dans  $\{0, \dots, L\}$ . Nous avons modifié l'Algorithme de Réduction de Support de Groeneboom et al. (2008) qui ne rend pas une probabilité. Ce dernier calcule pour chaque  $S \subset \{0, \dots, L\}$  le meilleur estimateur  $\pi_S$  et utilise d'une caractérisation de  $\hat{\pi}_{*L}^k$  par ses dérivées directionnelles pour déterminer si  $\pi_S = \hat{\pi}_L^{*k}$ . Plus précisément nous avons changé la seconde étape de l'algorithme afin de minimiser seulement sur l'ensemble des fonctions de masse 1.

Introduisons quelques notations utilisées pour cet algorithme. La notation  $D^*$  qui désignait la dérivée directionnelle de  $\Psi$  à droite dans la direction  $\nu$  a été modifiée en une notion analogue de dérivée directionnelle sur l'ensemble des probabilités. Cette nouvelle dérivée directionnelle notée  $D$  est définie par :

$$\forall \mu \in \mathcal{M}, D_\nu \Psi(\mu) = \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi((1 - \varepsilon)\mu + \varepsilon\nu) - \Psi(\mu)) \quad (5.10)$$

Soit  $S \subset \{0, \dots, L\}$  une partie finie. On écrit  $S = \{j_1, \dots, j_s\}$ . On note :

- $Q_S \in \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s$  la matrice définie par :

$$(Q_S)_{i+1,l} = Q_{j_l}^k(i) \quad (5.11)$$

- $H_S$  la matrice de projection sur la base  $(Q_j^k)_{j \in S}$  :

$$H_S = Q_S(Q_S^T Q_S)^{-1} Q_S^T$$

- $\lambda_S$  le multiplicateur de Lagrange défini par :

$$\lambda_S = \frac{\langle H \tilde{p}_S, \mathbb{I} \rangle - 1}{\langle H \mathbb{I}, \mathbb{I} \rangle}$$

où  $\mathbb{I} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^L$  est le vecteur unitaire de longueur  $L = \text{card}(S)$  et  $\tilde{p}_S$  la restriction de  $\tilde{p}$  à l'ensemble  $S$ .

Le paramètre  $\lambda_S$  est issu des conditions de KKT liées au problème de minimisation suivant :

$$\pi_S = \underset{\substack{\sum_{j \in S} \pi(j) = 1 \\ \pi \in \mathcal{M}_S}}{\operatorname{argmin}} (\Psi(\pi)).$$

Sa valeur est calculée dans la Section 6.3. L'algorithme de calcul de  $\hat{\pi}_L^k$  s'énonce ainsi :

- **Initialisation :**  
 $S \leftarrow \{L\}$   
 $\pi \leftarrow \delta_L$
- **Etape 1 :**  
 Pour tout  $j \in \{0, \dots, L\}$  calculer la quantité  $D_{\delta_j} \Psi(\pi)$ .  
**Cas 1 :** Si pour tout  $j \in \{0, \dots, L\}$ ,  $D_{\delta_j} \Psi(\pi) \geq 0$   
 Renvoyer  $\pi$ .  
**Cas 2 :** Sinon choisir  $j \in \{0, \dots, L\}$  tel que  $D_{\delta_j} \Psi(\pi) < 0$ .  
 $S' \leftarrow S + \{j\}$ .  
 Aller en Etape 2.
- **Etape 2 :**  
 Calculer  $\lambda_{S'} = \frac{\langle H_{S'} \tilde{p}_{S'}, \mathbb{I} \rangle - 1}{\langle H_{S'} \mathbb{I}, \mathbb{I} \rangle}$   
 $\lambda \leftarrow \lambda_{S'}$   
 $\pi_{S'} \leftarrow \operatorname{argmin}\{\Psi(\pi) + \lambda(\sum_{j \in S'} \pi(j) - 1), \operatorname{supp}(\pi) \subset S'\}$ .  
**Cas 1 :** Si pour tout  $l \in S'$ ,  $\pi_{S'}(l) \geq 0$   
 $\pi \leftarrow \pi_{S'}$   
 $S \leftarrow S'$   
 Retourner en Etape 1.  
**Cas 2 :** Sinon :  
 $l \leftarrow \operatorname{argmin}_{j' \in S'} \{\varepsilon_{j'} = \frac{\pi_{j'}}{\pi_{j'} - \pi_{S'}(j')}, \text{ pour } j', \pi_{S'}(j') < \pi_{j'}\}$   
 $S' \leftarrow S' - \{l\}$   
 Retourner en Etape 2.

**Théorème 27.** Cet algorithme renvoie  $\hat{p}_n^{\wedge 1, L}$  en un nombre fini d'étapes.

La preuve de ce théorème est donnée à la Section 6.3. Dans la pratique les simulations de la Section 5.5 n'ont pas révélé de différence notable de temps de calcul entre les deux algorithmes.

### Le critère d'arrêt

L'algorithme de la sous-section 5.4.2 permet de calculer le meilleur estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie pour un support donné. Il propose ainsi pour chaque entier  $L$ , avec  $L$  tendant vers l'infini, un candidat  $\hat{p}_L^{*k}$ . L'algorithme final nécessite alors une caractérisation pour déterminer si le candidat  $\hat{p}_L^{*k}$  (respectivement  $\hat{p}_L^k$ ) est égal à l'estimateur des moindres carrés sur tout  $\mathbb{N}$ . Cette caractérisation doit être vérifiable en pratique et donc ne pas requérir un nombre infini de calculs. On la nomme *critère d'arrêt* de l'algorithme.

Dans le cas où  $k = 2$ , Durot et al. (2013) donnent un critère d'arrêt simple : l'algorithme doit s'arrêter lorsque la masse de  $\hat{p}_L^2$  vaut 1. Ce critère n'est pas généralisable dans le cas où  $k \geq 3$ , comme l'atteste le contre-exemple 15.

Le raisonnement étant identique pour  $\hat{p}^k$  et  $\hat{p}^{*k}$  nous proposons de le développer ici pour  $\hat{p}$ . Le critère d'arrêt que nous allons proposer est basé sur le Théorème 18 qui établit que  $\hat{p}_L^{*k} = \hat{p}^{*k}$  si et seulement si :

$$\forall l \in \mathbb{N}, F_{\hat{p}^L}^k(l) - F_{\hat{p}_n^k}^k(l) \geq \beta(\hat{p}^L) m_l^k. \quad (5.12)$$



avec égalité aux  $k$ -nœuds de  $\widehat{p}^L$ . (On rappelle que  $m_l^k$  désigne la masse de la spline  $Q_l^k$ ).

Cette dernière équation nécessite un nombre infini de vérifications et ne peut directement être considérée comme un critère d'arrêt. On souhaite déterminer un entier  $M$  tel que pour  $l \geq M$ , il n'y ait pas besoin d'effectuer la vérification. Par la propriété-clé suivante on montre que  $F_f^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k(l)$  est un polynôme de degré  $k - 1$  en  $l$  :

**Théorème 28.** *Soit  $p$  une densité discrète quelconque de maximum de support  $\tau$ . Soit  $s$  un entier tel que  $s \geq \max(\tau, \widetilde{s}_n)$ . Pour tout  $l \geq s + 1$  on a l'égalité suivante :*

$$F_f^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k(l) = \sum_{j=1}^k Q_{l-1}^{k-j+1}(s) (F_f^j(s) - F_{\widehat{p}_n}^j(s)).$$

De même la masse  $m_l^k$  des splines est un polynôme d'ordre  $k$  en la variable  $l$  :

**Lemme 29.** *Soit  $k \geq 2$ . Il existe un polynôme  $P(X) \in \mathbb{R}[X]$  de degré  $k$  tel que pour tout  $l \in \mathbb{N}$ ,  $P(l) = m_l^k$ .  $P$  est défini par :*

$$P(X) = \frac{(X+k)(X+k-1)\dots(X+1)}{k!}$$

Ces deux résultats sont montrés à la Section 6.3. Ainsi on obtient une écriture de la forme suivante :

$$F_{\widehat{p}^k}^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k - \beta(\widehat{p}^k)m_l^k = a_{k-1}l^{k-1} + a_{k-2}l^{k-2} \dots + a_0$$

où  $a_{k-1} \dots a_0$  sont des coefficients calculables qui dépendent des coefficients de  $\widetilde{p}$  et  $\widehat{p}$ .

On veut se limiter à un nombre fini de vérifications, il faut donc trouver un rang  $L$  tel que :

$$l \geq L \Rightarrow F_{\widehat{p}^k}^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k - \beta(\widehat{p}^k)m_l^k \geq 0.$$

En appliquant le critère de Cauchy rappelé dans l'introduction (voir Section 3.4.2) pour la localisation des racines d'un polynôme on obtient le critère d'arrêt suivant :

**Propriété 30** (Critère d'arrêt). *Soit  $p$  une densité  $k$ -monotone de maximum de support  $s$ . Soient  $a_{k-1}, \dots, a_0$  des coefficients tels que :*

$$F_p^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k - \beta(p)m_l^k = a_{k-1}l^{k-1} + a_{k-2}l^{k-2} \dots + a_0.$$

Soit  $L$  défini par :

$$L \geq \max \left( 1 + \frac{a_{d-1}}{a_d}, \dots, 1 + \frac{a_0}{a_d}, s \right).$$

Alors il y a équivalence entre :

1.  $p = \widehat{p}^k$ .
2. (a)  $\forall l \leq L, F_p^k(l) - F_{\widehat{p}_n}^k(l) \geq \beta(p)m_l^k$ .  
(b) Si  $l$  est un  $k$ -nœud de  $p$  il y a égalité dans l'inégalité précédente.

$$(c) \beta(p) \geq 0.$$

De plus si  $p$  vérifie ces conditions équivalentes alors  $p = \widehat{p}^{*k}$  si et seulement si  $\beta(p) = 0$ .

Il s'agit d'un critère d'arrêt puisqu'il assure qu'on peut vérifier la caractérisation de  $\widehat{p}^{*k}$  en un nombre fini de calculs. En revanche le coefficient  $a_d$  peut éventuellement être très faible, auquel cas  $x$  sera très élevé, parfois excessivement élevé devant la capacité de calcul de la machine. Dans les cas où  $k = 3$  ou  $4$  il est possible de déterminer un critère d'arrêt qui ne dépende pas des coefficients de  $\widehat{p}$  (respectivement  $\widehat{p}^*$ ) mais seulement des maxima de support  $\widetilde{s}$  et  $\widehat{s}$  (respectivement  $\widehat{s}^*$ ). C'est l'objet du théorème suivant montré à la Section 6.3.3 :

**Propriété 31** (Critère d'arrêt,  $k = 3, 4$ ). *Soit  $p$  une densité  $k$ -monotone pour  $k \in \{3, 4\}$ . Soit  $s$  le maximum de l'union du support de  $p$  et du support de  $\widetilde{p}_n$ . On a équivalence entre :*

1.  $p = \widehat{p}^{*k}$ .
2. (a)  $\forall l \leq s + 1, F_p^k(l) \geq F_{\widetilde{p}_n}^k(l)$ .  
 (b) Si  $l$  est un  $k$ -noeud de  $p$  il y a égalité dans l'inégalité précédente.  
 (c)  $\forall j \in \{1, \dots, k\}, F_p^j(s + 1) \geq F_{\widetilde{p}_n}^j(s + 1)$

De même il y a équivalence entre :

1.  $p = \widehat{p}^k$ .
2. (a)  $\forall l \leq s + 1, \frac{F_p^k(l) - F_{\widetilde{p}_n}^k(l)}{m_l^k} \geq \beta(p)$ .  
 (b) Si  $l$  est un  $k$ -noeud de  $p$  il y a égalité dans l'inégalité précédente.  
 (c)  $\forall j \in \{1, \dots, k\}, F_p^j(s + 1) - F_{\widetilde{p}_n}^j(s + 1) \geq \beta(p)m_{s+1}^j$ .  
 (d)  $\beta(p) \leq 0$ .

Lorsque  $k \geq 5$  nous ne sommes pas capables de proposer un critère similaire. En effet la preuve est basée sur les propriétés des splines  $Q_j^k$  et en particulier le nombre de leurs  $k'$ -noeuds, pour  $k' \geq k$ . Lorsque  $k \geq 5$  ce nombre peut potentiellement être supérieur à 2.

## Simulations

Cette section propose une étude par simulation pour évaluer la qualité d'estimation de l'estimateur  $\widehat{p}$ . Elle reprend l'article publié dans Electronic Journal of Statistics (Giguelay, 2017) et sera ultérieurement traduite en français.

### Description

We designed a simulation study to assess the quality of the least-squares estimator  $\widehat{p}$  on the set of  $k$ -monotone probabilities, as compared to the empirical estimator  $\widetilde{p}$ , and to the least-squares estimator  $\widehat{p}^*$  on the set of  $k$ -monotone sequences for  $k \in \{2, 3, 4\}$ . We considered both the case where the true distribution is  $k$ -monotone and the case where it is not.

## Simulation Design

We considered mainly two shapes for the distribution  $p$ : the spline distribution  $Q_j^\ell$  with  $j = 10$  and  $\ell \in \{2, 3, 4, 10\}$ , and the Poisson distribution  $\mathcal{P}(\lambda)$  for  $\lambda \in \{0.3, 0.35, 0.45, 2 - \sqrt{2}, 0.7, 1\}$ . Those two families of distribution differ by the finiteness of their support, and by the number of knots in their decomposition on the spline basis. Precisely, the distribution  $Q_j^\ell$  has one  $\ell$ -knot in  $j$  while a  $\ell$ -monotone Poisson distribution has an infinite number of  $\ell$ -knots. The following proposition, shown in Section 6.5, gives the property of  $k$ -monotonicity for Poisson distributions.

**Propriété 32.** *Let  $\mathcal{P}(\lambda)$  be the Poisson distribution with parameter  $\lambda$ . For each  $\ell \geq 1$ , let  $\lambda_\ell$  be defined as the smallest root of the following polynomial function:*

$$P_\ell(\lambda) = \sum_{h=0}^{\ell} (-1)^h \frac{(\ell!)^2}{h!((\ell-h)!)^2} \lambda^h.$$

*Then  $\mathcal{P}(\lambda)$  is  $\ell$ -monotone if and only if  $\lambda \leq \lambda_\ell$*

Some simple calculation gives the following values:  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = 2 - \sqrt{2} \simeq 0.585$ ,  $\lambda_3 \simeq 0.415$ ,  $\lambda_4 \simeq 0.322$ ,  $\lambda_5 \simeq 0.264$ . Therefore the considered Poisson distributions  $\mathcal{P}(\lambda)$  are  $\{4, 3, 2, 2, 1\}$ -monotone when  $\lambda$  belongs to  $\{0.3, 0.35, 0.45, 2 - \sqrt{2}, 0.7\}$ . When  $\lambda = 1$ , the Poisson distribution is not strictly decreasing.

Moreover, for  $k = 3$ , we consider an other shape for the distribution  $p$  when  $p$  is not  $k$ -monotone. More precisely we study the behaviour of the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}^k$  when  $(-1)^k \Delta^k p(i) < 0$  for only one  $i \in \mathbb{N}$ , as  $R_\alpha = -\alpha Q_2^3 + (1 + \alpha) Q_{10}^3$  with  $\alpha \in \{0.2, 0.1, 0.05, 0.01\}$ .

For each distribution  $p$ , we considered several values for the sample size  $n$ :  $n \in \{20, 50, 100, 250, 500, 1000\}$ . In some cases we also considered very large values of  $n$  in order to illustrate the asymptotic framework. We denote by  $\tilde{p}_n$  the empirical estimator and by  $\hat{p}_n^k$ , respectively  $\hat{p}_n^{*k}$ , the least-squares estimator of  $p$  on the set of  $k$ -monotone probabilities, respectively sequences. For each simulation configuration, 1000 random samples were generated.

## Global fit

To assess the quality of the estimators for estimating the distribution  $p$  we consider the  $l_2$ -loss and the Hellinger loss. We have also considered the total variation loss, but the results are not shown because they are very similar to those obtained for the  $l_2$ -loss.

### Estimators comparison based on the $l_2$ -loss

The  $l_2$ -loss between  $p$  and any estimator of  $p$ , say  $\hat{q}$ , is defined as the expectation of the  $l_2$ -error,  $l_2(p, \hat{q}) = E(\|p - \hat{q}\|_2^2)$ .

**Spline distributions** We first compared the quality of the fit of the estimators  $\hat{p}_n^k$  and  $\tilde{p}_n$  by computing for each simulated sample  $\|p - \hat{p}_n^k\|_2^2$  and  $\|p - \tilde{p}_n\|_2^2$ . The  $l_2$ -losses were estimated by the mean of 1000 independant replications of the  $l_2$ -errors. In all simulation configurations, the  $l_2$ -losses are decreasing towards 0 when  $n$  increases. In what follows we will consider the ratios  $l_2(p, \hat{p}_n^k)/l_2(p, \tilde{p}_n)$  to compare the estimators.

The results for the spline distributions  $Q_j^\ell$  are presented on Figure 5.2. When  $n$  is small,  $\widehat{p}_n^k$  has smaller  $l_2$ -loss than  $\widetilde{p}_n$  whatever the value of  $k$ . When  $n$  tends to infinity, we have to consider two cases according to the discrepancy between  $k$  which defines the degree of monotonicity of the estimator, and  $\ell$  which is the degree of monotonicity of  $p$ . As it was expected considering Theorem 22, when  $k \leq \ell$ , the ratio is smaller than 1.

Moreover we note that the smaller the deviation  $\ell - k$  is, the smaller the ratio. In particular when  $k = \ell$ , the ratio tends to a constant strictly smaller than 1, while when  $k < \ell$ , the ratio tends to 1. For example, when  $\ell = 4$ ,  $k = 3$ , the ratio of the  $l_2$ -losses equals 0.45 for  $n = 10000$  and 0.80 for  $n = 100000$ . This illustrates the benefit to choosing the *correct*  $k$ , i.e.  $k = \ell$ , instead of  $k < \ell$ , and matches our intuition. Indeed, the sets  $\mathcal{S}^k$  being nested, we are leading to think that one could gain in  $l_2$ -loss when we project the empirical estimator on the set  $\mathcal{S}^\ell$  instead on the set  $\mathcal{S}^k$  with  $k < \ell$ .

When  $k > \ell$ , the ratio tends to infinity. For example, when  $\ell = 2$ ,  $k = 3$ , the ratio of the  $l_2$ -losses equals 9.93 for  $n = 10000$  and 259 for  $n = 100000$ . This result was expected because the empirical estimator  $\widetilde{p}_n$  is consistent while our estimator is not. Indeed, following Theorem 24,  $\widehat{p}_n^k$  converges in probability to  $p_{\mathcal{S}^k}$ , the projection of  $p$  on  $\mathcal{S}^k$ . Since  $p$  is  $\ell$ -monotone and  $k > \ell$ , the  $l_2$ -loss  $l_2(p, \widehat{p}_n^k)$  is greater than a strictly positive constant whereas  $l_2(p, \widetilde{p}_n)$  converges to 0. Therefore the ratio of the  $l_2$ -losses converges to infinity.

**Poisson distribution** The results for the Poisson distribution are similar to those obtained for the spline distributions except that the asymptotic is achieved for smaller values of the sample size  $n$ . Only the case  $\lambda = 0.35$ , where the corresponding Poisson distribution is 3-monotone, is presented in Figure 5.3. It appears that when  $k = 2$  the ratio of  $l_2$ -losses tends to one, when  $k = 3$  it tends to a value close to 0.9, and when  $k = 4$  it tends to infinity.

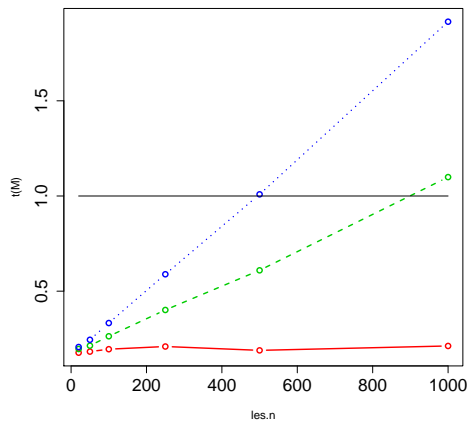
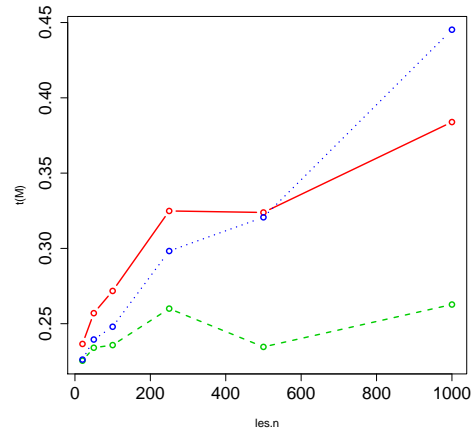
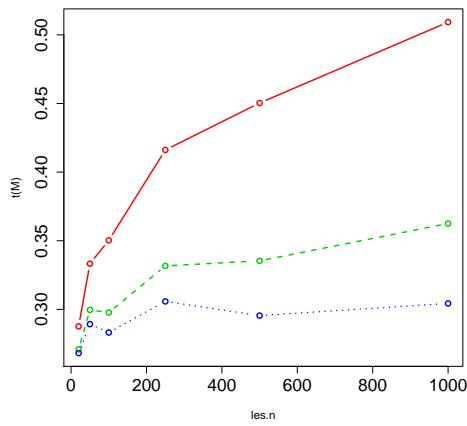
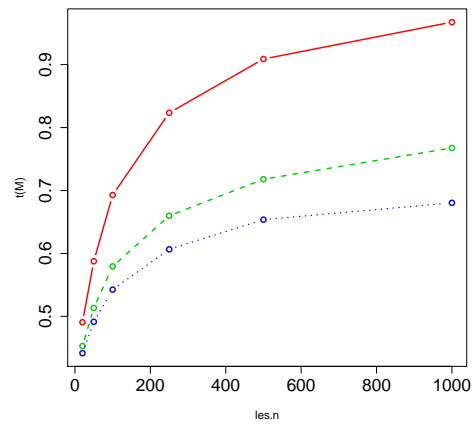
(a)  $p = Q_{10}^2$ .(b)  $p = Q_{10}^3$ .(c)  $p = Q_{10}^4$ .(d)  $p = Q_{10}^{10}$ .

Figure 5.2: Spline distributions: ratio between the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^k$  and the  $l_2$ -loss of  $\tilde{p}_n$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -",  $k = 4$  in "...". Each subfigure corresponds to the results obtained with  $p = Q_j^\ell$ , for  $\ell \in \{2, 3, 4, 10\}$ .

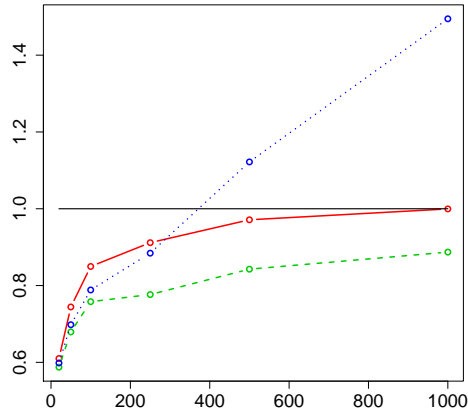


Figure 5.3: Poisson distribution with parameter  $\lambda = 0.35$ : ratio between the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^k$  and the  $l_2$ -loss of  $\tilde{p}_n$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -", and  $k = 4$  in "....".

**Comparison between  $\hat{p}$  and  $\hat{p}^*$**  Now we compare the  $l_2$ -losses for the estimators  $\hat{p}_n^k$ ,  $\hat{p}_n^{*k}$  and  $\tilde{p}_n$  for  $k = 3$  and  $k = 4$  (recall that for  $k = 2$ ,  $\hat{p}_n^{*k} = \hat{p}_n^k$ ). The ratios  $l_2(p, \hat{p}_n^{*k})/l_2(p, \tilde{p}_n)$  behave similarly to the ratios  $l_2(p, \hat{p}_n^k)/l_2(p, \tilde{p}_n)$  (not shown).

Next we compare the values of the  $l_2$  losses for  $\hat{p}_n^{*k}$  and  $\hat{p}_n^k$ . When we consider the spline distributions  $Q_j^\ell$  with  $l = 2$  and  $l = 3$ , the difference between the  $l_2$  losses are not significant (they are smaller than 2-times their empirical standard-error calculated on the basis of 1000 simulations). When  $l$  increases, the distribution  $p$  is more hollow and it appears that  $l_2(p, \hat{p}_n^{*k})$  is greater than  $l_2(p, \hat{p}_n^k)$ , see Table 5.1.

	$n = 20$	$n = 100$	$n = 1000$
$p = Q_{10}^4$	-	-	-
	-	-	0.06
$p = Q_{10}^{10}$	0.89	0.13	0.02
	0.92	0.24	0.01

Table 5.1: Spline distributions : difference ( $\times 1000$ ) between the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^{*k}$  and the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^k$ , for different values of  $n$ , for  $k = 3$  in green and  $k = 4$  in blue. The symbol "-" is for non-significant result.

**Distributions  $R_\alpha$**  In this paragraph we take  $k = 3$ . When looking into model misspecification we face the problem of the deviation from  $k$ -monotonicity. A natural issue is to consider the case where the true distribution  $p$  is  $k$ -monotone except for only one  $i \in \mathbb{N}$  where  $(-1)^k \Delta^k p(i) < 0$ . We assess the  $l_2$ -loss of the estimator  $\hat{p}$  in case of such a misspecification, when  $k = 3$  and  $p = R_\alpha = \alpha \bar{Q}_2^3 + (1 + \alpha) \bar{Q}_{10}^3$  is 3-monotone except for  $i = 2$ . Figure 5.4 illustrate the results for the different values of  $\alpha$ .

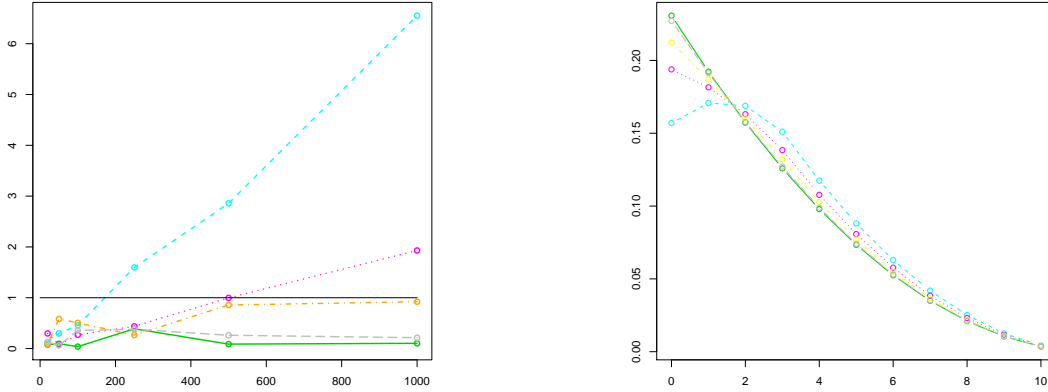


Figure 5.4: Mixture of splines with shape  $R_\alpha = \alpha \bar{Q}_2^3 + (1 + \alpha) \bar{Q}_{10}^3$ : In the right: distributions of the  $R_\alpha$  and in the left: ratio between the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^k$  and the  $l_2$ -loss of  $\tilde{p}_n$  versus the sample size  $n$ :  $\alpha = 0$  in "—",  $\alpha = 0.01$  in "- -",  $\alpha = 0.05$  in "- . -",  $\alpha = 0.1$  in "...", and  $\alpha = 0.2$  in "- - -".

When  $n$  is small,  $\hat{p}_n^k$  has smaller loss than  $\tilde{p}_n$ , although the distributions  $R_\alpha$  are not  $k$ -monotone when  $\alpha > 0$ . When  $\alpha \geq 0.05$  and  $n$  tends to infinity the ratio between the  $l_2$ -loss of  $\hat{p}_n^k$  and the  $l_2$ -loss of  $\tilde{p}_n$  increases (except for  $\alpha = 0$ , when the model is not misspecified) whereas when  $\alpha$  is small enough ( $\alpha \leq 0.01$ ) the ratio stay small. The bigger  $\alpha$  is, the more the distribution deviates from de 3-monotonicity and the more the  $l_2$ -loss is.

### Estimators comparison based on the Hellinger loss

Let us now consider the Hellinger loss defined, for any estimator  $\hat{q}$ , as  $H(p, \hat{q}) = E \left( \|\sqrt{p} - \sqrt{\hat{q}}\|_2^2 \right)$ .

**Spline distributions** The results for the spline distributions  $Q_j^\ell$  are similar to those obtained for the  $l_2$ -loss, except that the ratios  $H(p, \hat{p}_n^k)/H(p, \tilde{p}_n)$  are not necessary smaller than 1 when  $k \leq \ell$ , see Figure 5.6 for the Triangular distribution  $Q_2^2$ .

**Poisson distribution** In the case of the Poisson distributions the differences between the  $l_2$ -loss and the Hellinger loss are more obvious. As it is illustrated by Figure 5.5, if  $\ell$  the degree of monotonicity of  $p$  is strictly greater than  $k$ , then the ratio is smaller than 1 (see case (a) with  $k = 2, 3$  and case (b) with  $k = 2$ ). If  $k = \ell$ , then  $H(p, \hat{p}_n^k)$  is smaller than  $H(p, \tilde{p}_n)$  if the distribution  $p$  is " $\ell$ -monotone enough", that is to say if the parameter  $\lambda$  of the Poisson distribution is such that  $\lambda_\ell - \lambda$  is large enough, where  $\lambda_\ell$  has been defined in Property 32, see for example cases (c) and (d) with  $k = 2$ , where  $\lambda_2 = 2 - \sqrt{2}$ .

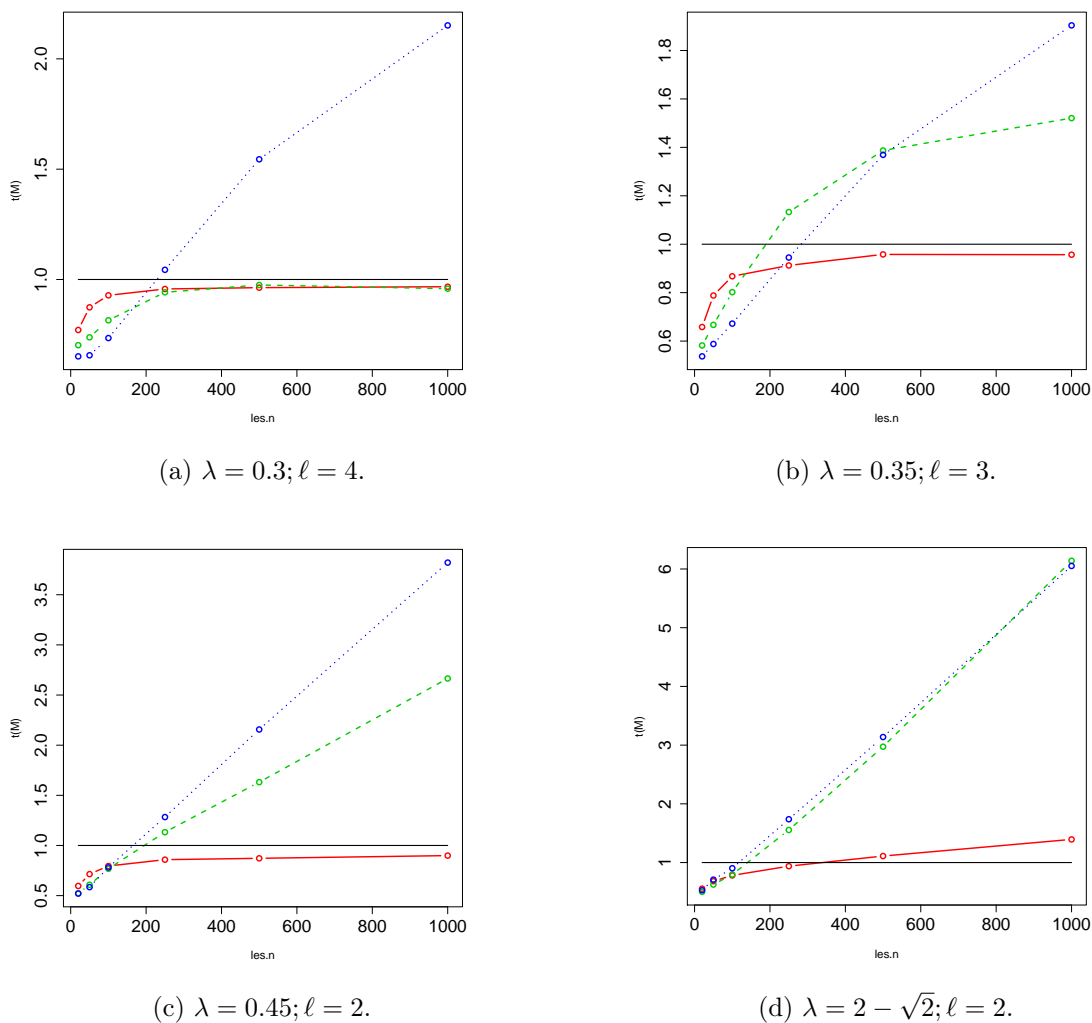


Figure 5.5: Poisson distributions: ratio between the Hellinger loss of  $\hat{p}_n^k$  and the Hellinger loss of  $\tilde{p}_n$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -", and  $k = 4$  in "...". Each subfigure corresponds to the results obtained with  $p = \mathcal{P}(\lambda)$  for  $\lambda \in \{0.3, 0.35, 0.45, 2 - \sqrt{2}\}$ . The degree of monotonicity of these distributions is given by  $\ell$ .



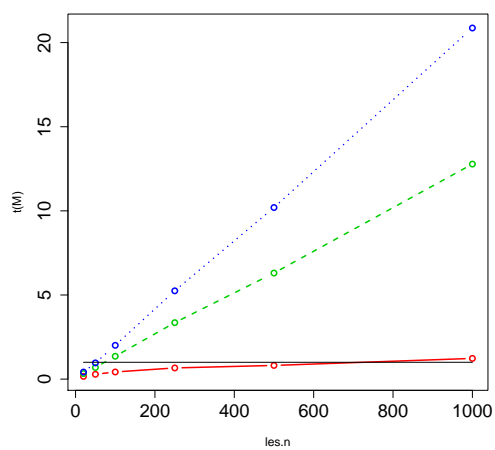


Figure 5.6: Triangular distribution  $Q_j^2$  : ratio between the Hellinger loss of  $\hat{p}_n^k$  and the Hellinger loss of  $\tilde{p}_n$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -", and  $k = 4$  in "...".

### Some characteristics of interest

We consider the estimation of some characteristics that may be of interest as the entropy, the variance and the probability at 0. For each of these characteristics denoted  $L(p)$ , we measure the performance in terms of the root mean squared error of prediction calculated as follows:

$$\text{RMSEP} = \sqrt{\text{BIAS}^2 + \text{SE}^2},$$

where BIAS and SE are the estimated bias and standard-error of the estimator based on the simulations. Let  $\widehat{L}$  be an estimator of  $L(p)$ , then  $\text{BIAS} = \widehat{L} - L$ , where  $\widehat{L} = \sum_s \widehat{L}_s / 1000$  with  $\widehat{L}_s$  being the estimate of  $L(p)$  at simulation  $s$ , and  $\text{SE}^2 = \sum_s (\widehat{L}_s - \widehat{L})^2 / 1000$ .

### Entropy

The entropy is defined as

$$\text{Ent}(f) = \sum_{i=0}^{\infty} f(i) \log(f(i)).$$

We compare the estimators  $\text{Ent}(\widehat{p}_n^k)$  and  $\text{Ent}(\widetilde{p}_n)$  by the ratio of their RMSEP. The results differ according to the family of distributions. For the spline distributions  $Q_j^\ell$ , see Figure 5.8, it appears that if  $k < \ell$ , then  $\text{Ent}(\widehat{p}_n^k)$  has smaller RMSEP than  $\text{Ent}(\widetilde{p}_n)$ . However, when  $k = \ell$ , the ratio of the RMSEP's increases and reaches an asymptote greater than 1. For example, in Figure 5.8, case (b) with  $k = 3$ , the ratio tends to 0.96, in case (c) with  $k = 4$ , the ratio tends to 1.93. In fact, if we consider the space of  $\ell$ -monotone distributions with maximum support  $j$ , the distribution  $Q_j^\ell$  may appear as a "limiting case" in this space, in that it admits only one  $\ell$ -knot in  $j$ . It seems that for these  $Q_j^\ell$  distributions, the projection on the space of  $\ell - 1$ -monotone discrete probabilities give better results than on the space of  $\ell$ -monotone discrete probabilities.

For the Poisson distributions, see Figure 5.7, when  $n$  is small, the estimator based on the empirical distribution,  $\text{Ent}(\widetilde{p}_n)$ , has a smaller RMSEP than  $\text{Ent}(\widehat{p}_n^k)$ . When  $n$  is large the RMSEP ratio tend to one if  $k \leq \ell$ , and tend to infinity if  $k > \ell$ .

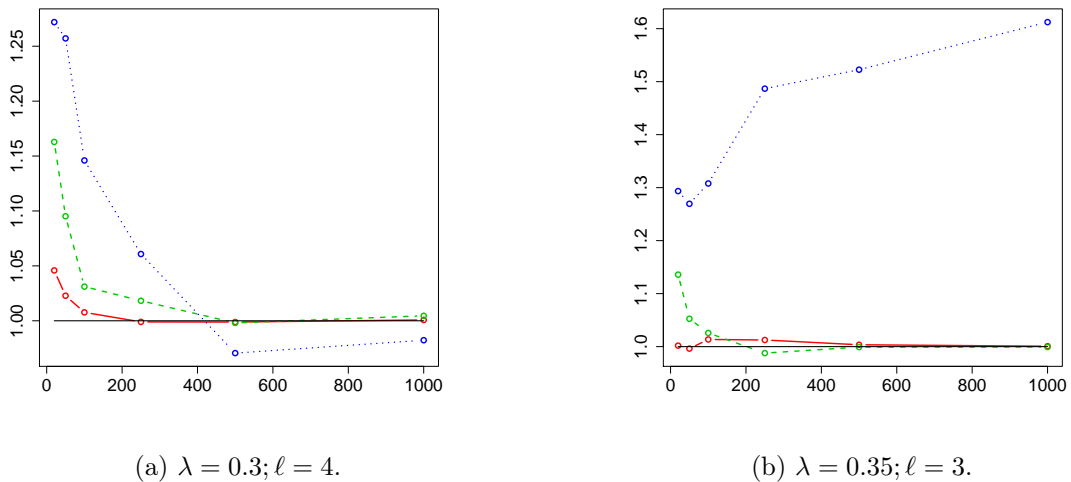


Figure 5.7: Poisson distributions: ratio between the RMSEP of  $\text{Ent}(\widehat{p}_n^k)$  and the RMSEP of  $\text{Ent}(\widetilde{p}_n)$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -",  $k = 4$  in "...". Each subfigure corresponds to the results obtained with  $p = \mathcal{P}(\lambda)$  with  $\lambda \in \{0.3, 0.35\}$ .

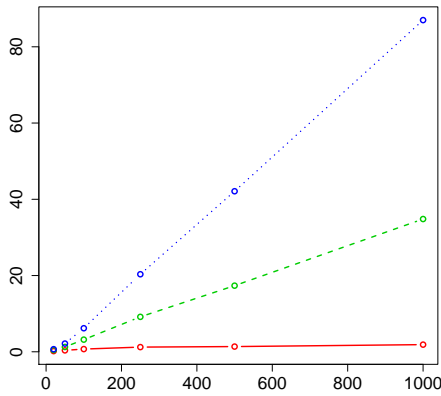
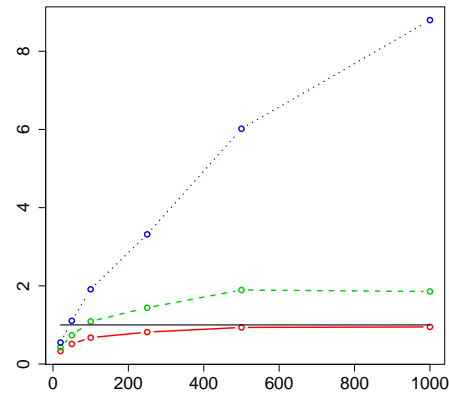
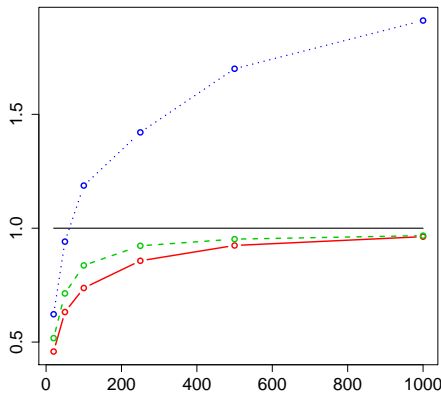
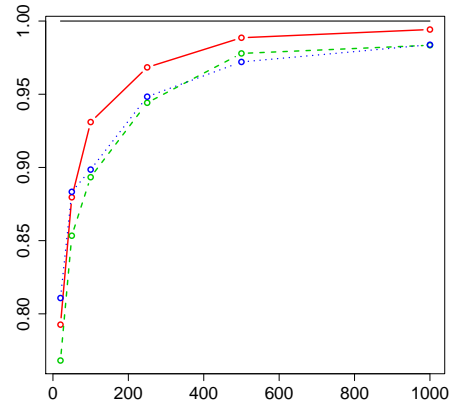
(a)  $p = Q_{10}^2$ .(b)  $p = Q_{10}^3$ .(c)  $p = Q_{10}^4$ .(d)  $p = Q_{10}^{10}$ .

Figure 5.8: Spline distributions: ratio between the RMSEP of  $\text{Ent}(\hat{p}_n^k)$  and the RMSEP of  $\text{Ent}(\tilde{p}_n)$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- -",  $k = 4$  in "...". Each subfigure corresponds to the results obtained with  $p = Q_j^\ell$ , for  $\ell \in \{2, 3, 4, 10\}$ .

### Probability mass in 0.

We compare the performances of  $\hat{p}_n^k(0)$  and  $\tilde{p}_n(0)$  by comparing the corresponding renormalized SE and BIAS.

The results for the spline distributions are presented in Table 5.2. When  $k \leq l$ ,  $\hat{p}_n^k(0)$  has smaller SE than  $\tilde{p}_n(0)$ . Its bias is greater in absolute value and always negative, but the RMSEP stays smaller. For each  $k$ , the variations of  $\sqrt{n}SE/p(0)$  versus  $n$  are very small and tend to stabilize around a value that increases with  $l - k$ . When  $k > l$ ,  $\hat{p}_n^k(0)$  keeps a smaller RMSEP than  $\tilde{p}_n(0)$  for small  $n$ . But, when  $n$  increases the absolute bias as well as the standard error increase.

**Spline distributions** The results for the spline distributions  $Q_j^\ell$  are similar to those obtained for the  $l_2$ -loss, except that the ratios  $H(p, \hat{p}_n^k)/H(p, \tilde{p}_n)$  are not necessary smaller than 1 when  $k \leq l$ , see Figure 5.6 for the Triangular distribution  $Q_j^2$ .

	$n = 20$			$n = 100$			$n = 1000$		
	SE	BIAS	RMSEP	SE	BIAS	RMSEP	SE	BIAS	RMSEP
$p = Q_{10}^2$	2.25	7e-4	2.25	2.234	0.002	2.234	2.284	0.017	2.284
	1.800	0.181	1.809	1.819	0.170	1.82	1.745	0.162	1.752
	1.757	0.157	1.764	1.783	0.188	1.792	2.231	0.334	2.255
	1.742	0.155	1.748	1.780	0.196	1.790	2.622	0.408	2.653
$p = Q_{10}^4$	1.634	0.008	1.634	1.601	0.013	1.601	1.626	0.006	1.626
	1.362	0.143	1.369	1.389	0.120	1.394	1.488	0.052	1.489
	1.354	0.137	1.361	1.372	0.132	1.378	1.439	0.088	1.442
	1.340	0.135	1.347	1.353	0.136	1.359	1.362	0.109	1.366
$p = Q_{10}^{10}$	1.010	2e-4	1.010	0.98	6e-4	0.98	0.984	0.006	0.984
	0.884	0.058	0.886	0.934	0.022	0.934	0.982	0.006	0.982
	0.886	0.057	0.888	0.919	0.039	0.920	0.957	0.009	0.957
	0.887	0.053	0.889	0.921	0.042	0.922	0.940	0.018	0.940

Table 5.2: Spline distributions:  $\sqrt{n}\text{SE}/p(0)$ ,  $\sqrt{n}|\text{BIAS}|/p(0)$  and  $\sqrt{n}\text{RMSEP}/p(0)$  for  $\tilde{p}_n(0)$  in black,  $\hat{p}_n^k(0)$  for  $k = 2$  in red,  $k = 3$  in green and  $k = 4$  in blue.

**Poisson distribution** In the case of the Poisson distributions the differences between the  $l_2$ -loss and the Hellinger loss are more obvious. As it is illustrated by Figure 5.5, if  $\ell$  the degree of monotonicity of  $p$  is strictly greater than  $k$ , then the ratio is smaller than 1 (see case (a) with  $k = 2, 3$  and case (b) with  $k = 2$ ). If  $k = \ell$ , then  $H(p, \hat{p}_n^k)$  is smaller than  $H(p, \tilde{p}_n)$  if the distribution  $p$  is “ $\ell$ -monotone enough”, that is to say if the parameter  $\lambda$  of the Poisson distribution is such that  $\lambda_\ell - \lambda$  is large enough, where  $\lambda_\ell$  has been defined in Property 32, see for example cases (c) and (d) with  $k = 2$ , where  $\lambda_2 = 2 - \sqrt{2}$ .

The results for the Poisson distributions are similar and omitted.

## Variance

We compare the estimators of the variance of  $p$ , denoted  $\text{var}(\hat{p}_n^k)$  and  $\text{var}(\tilde{p}_n)$  comparing the ratio of their RMSEP. The results are similar for the spline distributions and the Poisson’s distributions and we present only the RMSEP for the spline distributions  $Q_j^l$  in Figure 5.9.

When  $k = l$ , the ratio of the RMSEP tends to a constant smaller than 1 when  $n$  tends to infinity. Conversely if we are not in a good model ( $k > l$ ) the ratio of the RMSEPs tends to infinity when  $n$  tends to infinity. When  $k < l$  and  $n$  large the ratio of the RMSEPs increases with  $l - k$  and goes beyond 1. For example for  $k = 3$  and  $l = 4$  the ratio of the RMSEPs is equal to 0.68 when  $n = 10000$ , while if  $l = 10$  the ratio is greater than 1 as soon as  $k \leq 3$  and  $n \geq 1000$ . When  $k > l$  the ratio of the RMSEPs tends to infinity when  $n$  tends to infinity. When  $n$  is small  $\text{var}(\hat{p}_n^k)$  has smaller RMSEP than  $\text{var}(\tilde{p}_n)$  whatever the value of  $k$  and  $l$ .

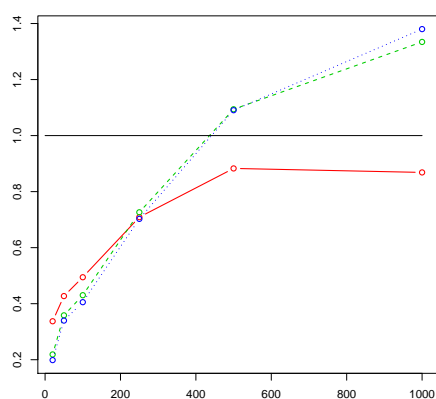
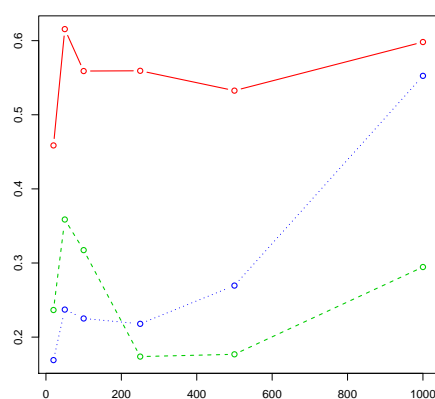
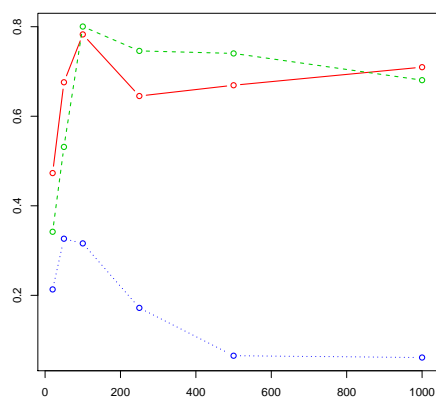
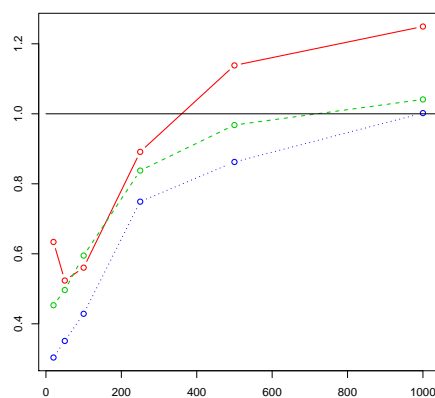
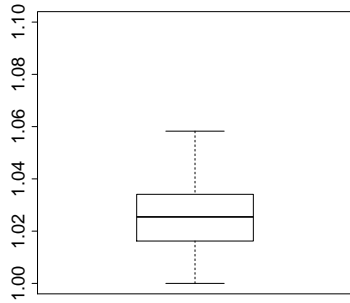
(a)  $p = Q_{10}^2$ .(b)  $p = Q_{10}^3$ .(c)  $p = Q_{10}^4$ .(d)  $p = Q_{10}^{10}$ .

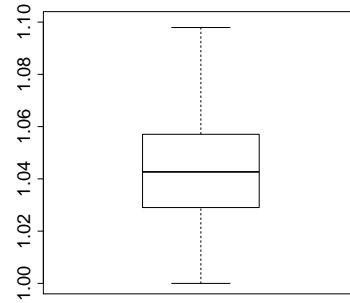
Figure 5.9: Spline distributions: ratio between the RMSEP of  $\text{var}(\hat{p}_n^k)$  and the RMSEP of  $\text{var}(\tilde{p}_n)$  versus the sample size  $n$ : for  $k = 2$  in "—",  $k = 3$  in "- - -",  $k = 4$  in "...". Each subfigure corresponds to the results obtained with  $p = Q_{10}^\ell$ , for  $\ell \in \{2, 3, 4, 10\}$ .

### About the mass of the non-constrained estimator $\hat{p}^{*k}$

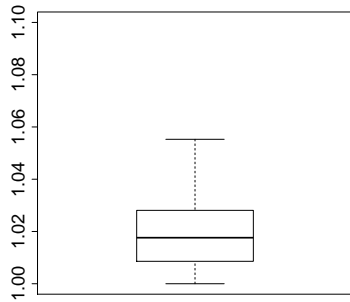
We were also interested in the estimation of the mass of the non-constrained estimator  $\hat{p}^{*k}$ . Figures 5.10 and 5.11 illustrate the results for the spline distributions with  $n = 20$  and  $n = 100$ . As expected the mass is always larger than 1 and whatever  $k$ , the distribution of the mass comes closer to one when  $n$  increases (compare figures 5.10 and 5.11). The larger  $l$  is, the smaller the median and the dispersion around the median are. On the other hand when  $k$  increases the distributions are more scattered and their medians move away from 1 (compare the lines of each figure).



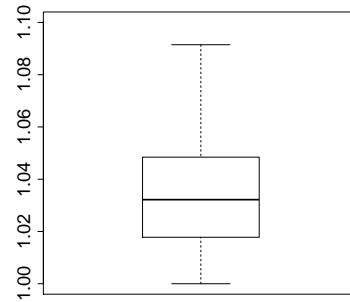
(a)  $p = Q_{10}^2$ .



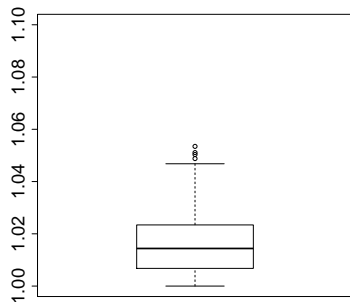
(b)  $p = Q_{10}^4$ .



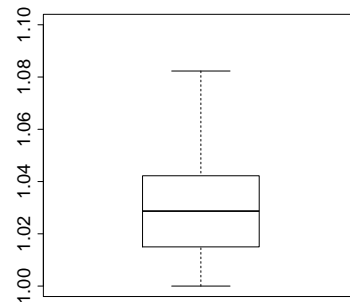
(c)  $p = Q_{10}^{10}$ .



(d)  $p = Q_{10}^4$ .



(e)  $p = Q_{10}^{10}$ .



(f)  $p = Q_{10}^{10}$ .

Figure 5.10: Splines distributions;  $n = 20$ : Boxplot of the mass of  $\hat{p}^{*k}$  for  $k = 3$  at the top and  $k = 4$  at bottom. Each column corresponds to the results obtained with  $p = Q_j^l$  for  $l = 2, 4, 10$ .

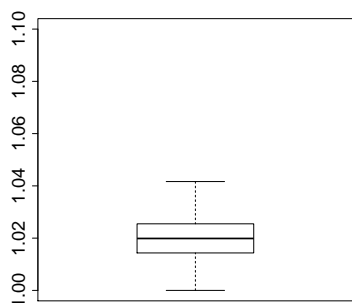
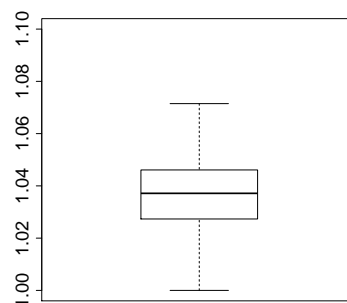
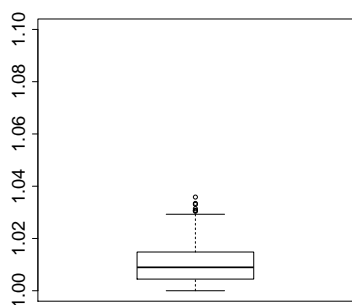
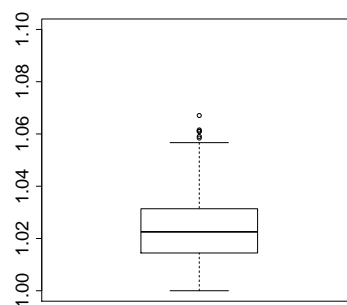
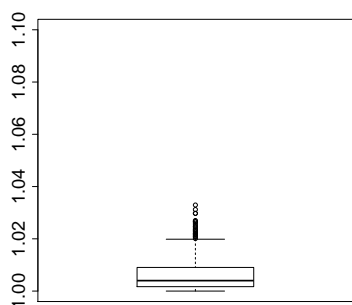
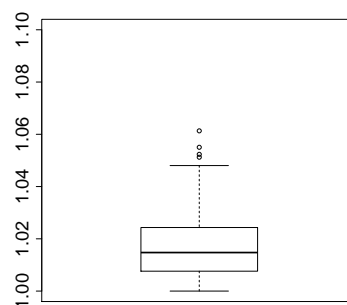
(a)  $p = Q_{10}^2$ .(b)  $p = Q_{10}^2$ .(c)  $p = Q_{10}^4$ .(d)  $p = Q_{10}^4$ .(e)  $p = Q_{10}^{10}$ .(f)  $p = Q_{10}^{10}$ .

Figure 5.11: Repartition of the mass of  $\hat{p}^{*k}$  for  $n = 100$ . Each column represents the estimation of a different probability  $p$  explained in subtitle. The first line is for the mass of  $\hat{p}^{*3}$  and the second line for the mass of  $\hat{p}^{*4}$ .

## Conclusion of simulations

Let us consider the case where  $p$  is  $l$ -monotone and  $\hat{p}_n^k$  is the least-squares estimator of  $p$  on  $\mathcal{S}_k$  for  $k \leq l$ . In this case the model is well-specified.

Concerning the  $l_2$ -loss, the total variation loss and the estimation of  $p^*(0)$ ,  $\hat{p}_n^k$  performs better than the empirical estimator  $\tilde{p}_n$ . Moreover the superiority of the performance of  $\hat{p}_n^k$  is larger when  $n$  is small. Concerning the Hellinger loss, or the estimation of the variance and the entropy, we get the following results. For small  $n$ , as before, the least-squares estimator is always better than the empirical estimator  $\tilde{p}_n$ . When  $n$  is large,  $\hat{p}_n^k$  and  $\tilde{p}_n$  behave similarly. If  $p$  is a *frontier* distribution in  $\mathcal{S}_l$ , as for example the Poisson distribution with  $\lambda = \lambda_l$  or a spline distribution  $Q_j^l$ , then  $\hat{p}_n^{l-1}$  performs better than  $\hat{p}_n^l$ . If not, then  $\hat{p}_n^l$  performs better than  $\hat{p}_n^k$  for all  $k \leq l$ . Finally, for all considered criteria, the estimator  $\hat{p}_n^k$  performs better than  $\tilde{p}_n^k$  when  $n$  is small and both estimators perform similarly when  $n$  is large.

Let us now consider the case of  $p$  is  $l$ -monotone and  $k > l$ . When  $n$  is small the estimator under constraint of  $k$ -monotonicity performs better than the empirical estimator for all criterion except the estimation of the entropy. When  $n$  is large the estimator under shape constraint is biased and the the empirical estimator performs better. In the particular case where  $p = R_\alpha$  we can measure how misspecified the model is. In this case we showed that the more the model is misspecified the worst is the  $l_2$ -loss.



# Chapter 6

## Preuves de la Partie I

### Sommaire

---

<b>6.1 Preuves du chapitre 4 : Propriétés relatives aux fonctions <math>k</math>-monotones . . . . .</b>	<b>89</b>
6.1.1 Preuve de la Propriété 7 : Emboitement des espaces $\mathcal{S}^k$ . . . . .	89
6.1.2 Preuve de la Propriété 8 : Lien entre la $k$ -monotonie continue et la $k$ -monotonie discrète . . . . .	89
6.1.3 Preuve du Théorème 13 : Décomposition des fonctions $k$ -monotones en base de spline . . . . .	89
<b>6.2 Preuves du chapitre 5 : Propriétés sur les estimateurs sous contrainte de <math>k</math>-monotonie . . . . .</b>	<b>90</b>
6.2.1 Preuve du Théorème 18 : caractérisation de $\hat{p}$ . . . . .	90
6.2.2 Preuve du Théorème 20 : les supports de $\hat{p}^{*k}$ et $\hat{p}^k$ sont finis . . . . .	92
6.2.3 Preuve de la propriété 29 : la masse de $\hat{p}^{*k}$ est supérieure à 1 . . . . .	95
6.2.4 Preuve du contre-exemple 15 : la projection de $\delta_1$ sur $\mathcal{S}^3$ est de masse strictement supérieure à 1 . . . . .	96
6.2.5 Preuve de la propriété 17 : la masse de $\hat{p}^{*k}$ converge vers 1 . . . . .	97
6.2.6 Preuve de la Propriété 21 : Support . . . . .	97
6.2.7 Preuve de la Propriété 23 : moments de $\hat{p}$ . . . . .	98
6.2.8 Preuve de la Propriété 24 : vitesse paramétrique en norme $\mathcal{L}^r$ . . . . .	98
6.2.9 Preuve de la Propriété 25 . . . . .	98
Estimation consistante des noeuds de $p^*$ . . . . .	98
Estimation consistante du maximum du support de $p^*$ . . . . .	99
<b>6.3 Preuves de la Section 5.4 : Algorithme . . . . .</b>	<b>99</b>
6.3.1 Preuve du théorème 5.4 : Estimation de $\pi$ sur un support fini . . . . .	99
6.3.2 Preuve du Théorème ??étheoclé Le théorème clé sur les primitives $k$ -ièmes . . . . .	103
6.3.3 Preuve de la Propriété 30 : critère d'arrêt pour $k = 3, 4$ . . . . .	104
<b>6.4 Preuves des lemmes techniques . . . . .</b>	<b>105</b>
<b>6.5 Preuve de la Propriété 32 : <math>k</math>-monotonie des lois de Poisson . . . . .</b>	<b>109</b>

---

Ce chapitre regroupe toutes les preuves de la partie I rédigées en anglais. Les deux estimateurs  $\hat{p}^k$  et  $\hat{p}^{*k}$  vérifient des propriétés communes. Dans ce cas l'écriture  $\hat{p}$  désignera l'un ou l'autre de ces deux estimateurs.

Pour toute suite  $f$  on rappelle que  $\mathcal{Q}(f) = \frac{1}{2} \|f - \tilde{p}\|^2$ .

## Preuves du chapitre 4 : Propriétés relatives aux fonctions $k$ -monotones

### Preuve de la Propriété 7 : Emboitement des espaces $\mathcal{S}^k$

We show this result by iteration. First a convex (or 2-monotone) discrete function on  $L^1(\mathbb{N})$  is nonincreasing (see Koladjo (2013)).

Let  $k$  be an integer with  $k \geq 3$ . Let  $p \in L^1(\mathbb{N})$  be a  $k$ -monotone function. We denote  $q$  the following discrete function:

$$\forall i \in \mathbb{N}, q(i) = (-1)^{k-2} \Delta^{k-2} p(i).$$

The function  $q$  is in  $L^1(\mathbb{N})$  and  $\Delta^2 q(i) = (-1)^k \Delta^k p(i) \geq 0$  for all  $i \in \mathbb{N}$ . Therefore  $q$  is convex and nonincreasing. It follows that for all  $i \in \mathbb{N}$ ,

$$(-\Delta^1)((-1)^{k-2} \Delta^{k-2} p(i)) = q(i) - q(i+1) \geq 0$$

i.e.  $(-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(i) \geq 0$  and  $p$  is  $(k-1)$ -monotone.

We assume now that for  $j \in \mathbb{N} \leq s$  (with  $s$  the maximum of the support of  $f$ ) we have  $\Delta^{k-1} f(j) = 0$ . Moreover,

$$(-1)^k \Delta^k f(j) = -((-1)^{k-1} \Delta^k f(j+1) - (-1)^{k-1} \Delta^k p(j))$$

is positive, then  $\Delta^{k-1} f(j+1) = 0$  and by iteration  $\Delta^{k-1} f(i) = 0$  for all  $i \leq j$  then  $\Delta^k f(s) = 0$ . It is impossible and the result is proved by contradiction.

### Preuve de la Propriété 8 : Lien entre la $k$ -monotonie continue et la $k$ -monotonie discrète

We show this result by iteration. First for  $k = 2$  the result is derived from the definition of the convexity with the slopes. Then if the result is true until  $k-1$  and if  $g$  is a continuous function and  $g$  is nonnegative and  $k$ -monotone on  $\mathbb{R}_+$ , then we define  $f$  as  $f(x) = g(x) - g(x+1)$ .

The function  $f$  is  $\mathcal{C}^{k-2}$  and for all  $j \leq k-3$  and  $x \geq 0$ , the quantity

$$(-1)^j f^j(x) = (-1)^j (g^j(x) - g^j(x+1))$$

is nonnegative because  $(-1)^{j+1} g^{j+1} \geq 0$ . Then  $(-1)^j g^j$  is nonincreasing,  $f$  is  $(k-1)$ -monotone, and  $\bar{f}$  also. Then for all  $j \in \mathbb{N}$ :

$$(-1)^{k-1} \Delta^{k-1} f(j) = (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} (g(j) - g(j+1)) = (-1)^k \Delta^k g(j) \geq 0.$$

and  $\bar{g}$  is  $k$ -monotone.

### Preuve du Théorème 13 : Décomposition des fonctions $k$ -monotones en base de spline

The following proof is different that the proof of Lefevre and Loisel (2013). The first point is shown by iteration. First the case  $k = 2$  is shown in Durot et al. (2013). Assume now

that the property is true until  $k - 1$  and let  $p$  be a  $k$ -monotone function with finite mass. The function  $p$  is also  $(k - 1)$ -monotone, then we have:

$$\begin{aligned}
\forall i \in \mathbb{N}, p(i) &= \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j) Q_j^{k-1}(i), \\
&= \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j) (Q_j^k(i) - Q_j^k(i+1)), \\
&= \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j) Q_j^k(i) - \sum_{j \geq i+1} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j) Q_j^k(i+1), \\
&= \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j) Q_j^k(i) - \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} p(j+1) Q_{j+1}^k(i+1).
\end{aligned}$$

because  $Q_{j+1}^k(i+1) = Q_j^k(i)$ . Then:

$$\begin{aligned}
\forall i \in \mathbb{N}, p(i) &= \sum_{j \geq i} (-1)^{k-1} (\Delta^{k-1} p(j) - \Delta^{k-1} p(j+1)) Q_j^k(i), \\
&= \sum_{j \geq i} (-1)^k \Delta^k p(j) Q_j^k(i).
\end{aligned}$$

The first point is shown. To prove the unicity we assume that  $p = \sum_{j \geq 1} \pi(j) Q_j^k$ . We denote  $q(i) = p(i) - p(i+1)$ . Then we have:

$$\begin{aligned}
\forall i \in \mathbb{N}, q(i) &= \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i) - \sum_{j \geq i+1} \pi(j) Q_j^k(i+1), \\
&= \sum_{j \geq i+1} \pi(j) (Q_j^k - Q_j^k(i+1)) + \pi_i Q_i^k(i), \\
&= \sum_{j \geq i+1} \pi(j) Q_j^{k-1}(i) + \pi_i Q_i^{k-1}(i),
\end{aligned}$$

because  $Q_i^{k-1}(i) = Q_i^k(i)$ . We know that  $q$  is  $(k - 1)$ -monotone then by iteration  $q$  has unique decomposition is the spline basis  $(Q_j^{k-1})$ .

To conclude we have the following equalities :

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{\infty} p_i &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i) \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=1}^j \pi(j) Q_j^k(i) \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{\pi}_j.
\end{aligned}$$

## Preuves du chapitre 5 : Propriétés sur les estimateurs sous contrainte de $k$ -monotonie

### Preuve du Théorème 18 : caractérisation de $\hat{p}$

Let us first prove that  $\hat{p}$  satisfies 1. or equivalently, that for all integer  $l$  the following inequality is satisfied:

$$F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\hat{p}}^k(l) \geq \beta(f) m_l^k. \quad (6.1)$$

By definition  $\beta(\widehat{p}) = \langle \widehat{p}, \widehat{p} - \widetilde{p} \rangle$ , then (6.1) is equivalent to:

$$\frac{1}{m_l^k} (F_{\widehat{p}}^k(l) - F_{\widetilde{p}}^k(l)) - \sum_{i=0}^{\infty} \widehat{p}(i) (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \geq 0. \quad (6.2)$$

Let us rewrite this equation by considering limits of the directionnal derivatives. For all  $\varepsilon \in ]0, 1]$ ,  $l \geq 0$  we define a function  $q_{\varepsilon l}$  as follows:

$$q_{\varepsilon l}(i) = (1 - \varepsilon)\widehat{p}(i) + \varepsilon \frac{\bar{Q}_l^k(i)}{m_l^k} = \begin{cases} (1 - \varepsilon)\widehat{p}(i) + \frac{\varepsilon}{m_l^k} \bar{Q}_l^k(i) & \text{if } i \in \{0, \dots, l\} \\ (1 - \varepsilon)\widehat{p}(i) & \text{if } i \geq l + 1. \end{cases} \quad (6.3)$$

The function  $q_{\varepsilon l}$  is a  $k$ -monotone probability then, using the first point of Lemma 37 (see Section 6.4) with  $q_{\varepsilon} = q_{\varepsilon l}$  we obtain :

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \frac{\bar{Q}_l^k(i)}{m_l^k} - \sum_{i=0}^{\infty} \widehat{p}(i) (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \geq 0.$$

Now, using Lemma 38 (see Section 6.4) we have for all  $k \geq 2$  and for all positive discrete measure  $f$ :

$$\forall l \in \mathbb{N}^*, \sum_{i=0}^{\infty} f(i) \bar{Q}_l^k(i) = \sum_{i=0}^l f(i) \bar{Q}_l^k(i) = F_f^k(l).$$

We choose  $f = \widehat{p}$  and we obtain exactly (6.2).

Let us now show that  $\widehat{p}$  satisfies 2. Let  $l$  be a  $k$ -knot of  $\widehat{p}$ , we need to show that Inequality (6.2) is an equality. As before we consider  $q_{\varepsilon l}$  defined at Equation (6.3) and show that  $q_{\varepsilon l}$  is a  $k$ -monotone probability for  $\varepsilon$  nonpositive small enough. Thanks to the following equality:

$$(-1)^k \Delta^k \bar{Q}_l^k(i) = \begin{cases} 0 & \text{if } i \neq l \\ 1 & \text{if } i = l \end{cases}$$

we get :

$$(-1)^k \Delta^k q_{\varepsilon l}(i) = \begin{cases} (1 - \varepsilon)(-1)^k \Delta^k \widehat{p}(l) + \varepsilon/m_l & \text{if } i = l \\ (1 - \varepsilon)(-1)^k \Delta^k \widehat{p}(i) & \text{if } i \neq l. \end{cases}$$

Because  $\widehat{p}$  is  $k$ -monotone,  $(-1)^k \Delta^k q_{\varepsilon l}(i) \geq 0$  for  $\varepsilon$  nonpositive small enough and  $i \neq l$ . As  $l$  is a  $k$ -knot of  $\widehat{p}$ ,  $(-1)^k \Delta^k \widehat{p}(l) > 0$  then  $(-1)^k \Delta^k q_{\varepsilon l}(i) \geq 0$ . Then  $q_{\varepsilon l}$  is a  $k$ -monotone probability for  $\varepsilon$  nonpositive small enough and therefore using Lemma 37 (see Section 6.4) with  $q_{\varepsilon} = q_{\varepsilon l}$  we obtain :

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \frac{\bar{Q}_l^k(i)}{m_l^k} - \sum_{i=0}^{\infty} \widehat{p}(i) (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \leq 0,$$

which together with Equation (6.2) give that the left hand side of the equation is exactly 0.

Conversely assuming that  $f$  is a  $k$ -monotone probability that satisfies :

$$\frac{F_f^k(l) - F_{\widetilde{p}}^k(l)}{m_l^k} \geq \beta(f), \quad (6.4)$$

with equality if  $l$  is a  $k$ -knot of  $f$ , we have to show that  $f = \widehat{p}$ . By definition of  $\widehat{p}$  we need to show that for all  $k$ -monotone probability  $g : \mathcal{Q}(g) \geq \mathcal{Q}(f)$ .

Let  $g$  be a  $k$ -monotone probability. Using Lemma 39 (see Section 6.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(g) - \mathcal{Q}(f) &= \frac{1}{2} \|g - f\|_2^2 + \langle f - \widetilde{p}, g - f \rangle \\ &\geq \langle f - \widetilde{p}, g - f \rangle \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} (g(i) - f(i))(f(i) - \widetilde{p}(i)) \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k (g - f)_i (F_f^k(i) - F_{\widetilde{p}}^k(i)). \end{aligned}$$

The function  $g$  is  $k$ -monotone then for all  $i$ ,  $(-1)^k \Delta^k g(i) \geq 0$  and using Equation (6.4) and Lemma 39 (see Section 6.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(g) - \mathcal{Q}(f) &\geq \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k g(i) (F_f^k(i) - F_{\widetilde{p}}^k(i)) - \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(i) (F_f^k(i) - F_{\widetilde{p}}^k(i)) \\ &\geq \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k g(i) \beta(f) m_i^k - \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(i) (F_f^k(i) - F_{\widetilde{p}}^k(i)) \\ &\geq \beta(f) \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k g(i) m_i^k - \beta(f). \end{aligned}$$

Moreover  $g$  being a  $k$ -monotone probability, according to Property 13, we have the decomposition on the spline basis:

$$\sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k g(i) m_i^k = 1.$$

Finally for all  $k$ -monotone probability  $g$  we find :

$$\mathcal{Q}(g) - \mathcal{Q}(f) \geq \beta(f) - \beta(f) = 0.$$

By unicity of the projection  $f = \widehat{p}$ .

### Preuve du Théorème 20 : les supports de $\widehat{p}^{*k}$ et $\widehat{p}^k$ sont finis

Let us first consider the case where  $\beta(\widehat{p}) = 0$ . According to Property 19 this is equivalent to  $\widehat{p} = \widehat{p}^*$ .

The result is proved by contradiction. Let us assume that  $\widehat{p}$  has an infinite support then we can build a discrete function  $\bar{p}$  satisfying the following properties:

- i)  $\bar{p} \leq \widehat{p}$ .
- ii) for all  $i \leq \widetilde{s}$ ,  $\bar{p}(i) = \widehat{p}(i)$ .
- iii) there exists  $i$  such as  $\bar{p}(i) < \widehat{p}(i)$ .
- iv)  $\bar{p}$  is  $k$ -monotone and non-negative,

with  $\widetilde{s}$  the maximum of the support of  $\widetilde{p}$ . For this  $\bar{p}$  we have the inequality  $\|\bar{p} - \widetilde{p}\|_2 < \|\widehat{p} - \widetilde{p}\|_2$  which contradicts the definition of  $\widehat{p} = \widehat{p}^*$ . The probability  $\bar{p}$  is constructed as

follows. We define for all  $j \in \{1, \dots, k-1\}$  and for all  $i \in \mathbb{N}$ , the  $j^{\text{th}}$  derivative function  $q_j$  of  $\widehat{p}$ :

$$\begin{aligned} q_1(i) &= -\widehat{p}(i+1) + \widehat{p}(i) = -\Delta^1 \widehat{p}(i), \\ q_2(i) &= -q_1(i+1) + q_1(i) = \Delta^2 \widehat{p}(i), \\ &\vdots \\ q_{k-1}(i) &= -q_{k-2}(i+1) + q_{k-2}(i) = (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} \widehat{p}(i) \end{aligned} \quad (6.5)$$

We have  $q_{j+1}(i) = \Delta^1 q_j(i)$  then for all  $i \in \mathbb{N}$ :

$$(-1)^k \Delta^k \widehat{p}(i) = (-1)^{k-1} \Delta^{k-1} (q_1(i)) = \dots = \Delta^1 q_{k-1}(i).$$

Then  $\widehat{p}$  is  $k$ -monotone (and non-negative) if and only if  $q_{k-1}$  is non-increasing (and non-negative). Because  $\widehat{p}$  has an infinite support, all the functions  $q_j$  have infinite support too. Moreover for all  $i \in \mathbb{N}$  we have the following inequalities:

$$\begin{aligned} \widehat{p}(i) &= -\sum_{h=0}^{i-1} q_1(h) + \widehat{p}(0), \\ \forall j \in \{1, \dots, k-2\}, q_j(i) &= -\sum_{h=0}^{i-1} q_{j+1}(h) + q_j(0). \end{aligned}$$

The next step consists to modify  $q_{k-1}$  to  $\bar{q}_{k-1}$  in order to if  $\bar{q}_j$  is defined as:

$$\bar{q}_j(i) = -\sum_{h=0}^{i-1} \bar{q}_{j+1}(h) + q_j(0), \forall j \in \{1, \dots, k-2\},$$

and if  $\bar{p}$  is defined as:

$$\bar{p}(i) = -\sum_{h=0}^{i-1} \bar{q}_1(h) + \widehat{p}(0), \forall j \in \{1, \dots, k-2\}, \quad (6.6)$$

then  $\bar{p}$  satisfies i)ii)iii)iv).

The function  $q_{k-1}$  has an infinite support and is non-increasing, therefore it has an infinity of 1-knots (points where  $q_{k-1}$  is strictly non-increasing). Assume first that  $k$  is odd ( $k \geq 3$ ). Let  $i_0$  be a 1-knot of  $q_{k-1}$  such that  $i_0 > \tilde{s}$ . We define  $\bar{q}_{k-1}$  as follows:

$$\begin{cases} \bar{q}_{k-1}(i) = q_{k-1}(i) \text{ if } i \neq i_0, i_0 + 1 \\ \bar{q}_{k-1}(i_0) = q_{k-1}(i_0) - \varepsilon \\ \bar{q}_{k-1}(i_0 + 1) = q_{k-1}(i_0 + 1) + \varepsilon. \end{cases} \quad (6.7)$$

where  $\varepsilon$  is some positive real number chosen such that  $\bar{q}_{k-1}$  is still non-increasing. For example take  $\varepsilon = (\bar{q}_{k-1}(i_0) - \bar{q}_{k-1}(i_0 + 1))/2$ . The function  $\bar{q}_{k-1}$  is represented at Figure 6.1.

Then the distribution  $\bar{p}$  defined at Equation (6.6) satisfies  $iv)$ . To show the properties  $i)$  to  $iii)$ , we will use the following equality whose proof is straightforward and omitted:

$$\forall i \in \mathbb{N}, \widehat{p}(i) - \bar{p}(i) = (-1)^{k-1} \sum_{h_1=0}^{i-1} \sum_{h_2=0}^{h_1-1} \dots \sum_{h_{k-1}=0}^{h_{k-2}-1} (q_{k-1}(h_{k-1}) - \bar{q}_{k-1}(h_{k-1})), \quad (6.8)$$

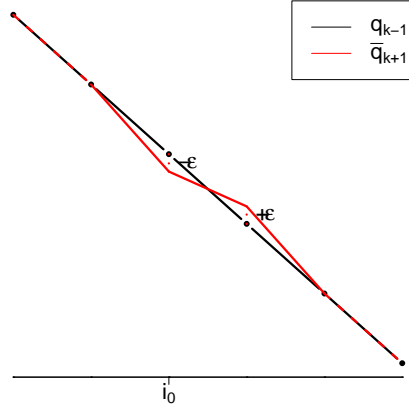


Figure 6.1: Functions  $q_{k-1}(i)$  and  $\bar{q}_{k-1}(i)$  versus  $i$  ( $k$  odd).

where the indice  $h_{k-1}$  is in the set  $\{0, \dots, i - k + 1\}$  which is empty if  $i \leq k - 1$ .

Let  $i \leq \tilde{s}$ . According to Equation (6.8), we get  $\hat{p}(i) - \bar{p}(i) \geq 0$  because  $\bar{q}_{k-1}(h_{k-1}) = q_{k-1}(h_{k-1})$  for all  $h_{k-1} \in \{0, \dots, \tilde{s} - k + 1\}$ . Then the point  $ii$  is true.

Let  $i = i_0 + k - 1$ . Noting that  $q_{k-1}(h_{k-1}) = \bar{q}_{k-1}(h_{k-1})$  except in  $h_{k-1} = i_0$  we get

$$\hat{p}(i) - \bar{p}(i) = (-1)^{k-1}(q_{k-1}(i_0) - \bar{q}_{k-1}(i_0)) = +\varepsilon$$

because  $k$  is odd, and point  $iii$  is shown.

It remains to show that  $\bar{p} \leq \hat{p}$ . By construction of  $\bar{q}_{k-1}$ , the primitive of  $q_{k-1}$  is greater than the primitive of  $\bar{q}_{k-1}$ , and because  $\hat{p}(i) - \bar{p}(i)$  is nonnegative and the following equality:

$$\hat{p}(i) - \bar{p}(i) = \sum_{h_1=0}^{i-1} \dots \sum_{h_{k-2}=0}^{h_{k-3}-1} \left( \sum_{h_{k-1}=0}^{h_{k-2}-1} q_{k-1}(h_{k-1}) - \sum_{h_{k-1}=0}^{h_{k-2}-1} \bar{q}_{k-1}(h_{k-1}) \right).$$

is true, we get point  $i$ ).

If  $k$  is even the proof is based on another construction of  $\bar{q}_{k-1}$ . Let us first recall that  $i$  is a 1-knot of  $q_{k-1}$  if  $\Delta^1 q_{k-1}(i) = q_{k-1}(i+1) - q_{k-1}(i)$  is strictly negative (because  $k$  is even). We have two cases:

**Case 1 :** There exists  $(i_0, i_1)$  such that  $\tilde{s} \leq i_0 < i_1$ ,  $i_1 - i_0 \geq 2$ ,  $\Delta^1 q_{k-1}(i_0)$  and  $\Delta^1 q_{k-1}(i_1)$  are strictly negative and  $\Delta^1 q_{k-1}(i) = 0$ . The probability  $\bar{q}_{k-1}$  is defined as follows:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{q}_{k-1}(i) = q_{k-1}(i) \text{ if } i < i_0 + 1, i > i_1 \\ \bar{q}_{k-1}(i_0 + 1) = q_{k-1}(i_0) + \varepsilon \\ \bar{q}_{k-1}(i_1) = q_{k-1}(i_1) - \varepsilon \\ \bar{q} \text{ is an affine function on } [i_0 + 1, i_1]. \end{array} \right.$$

**Case 2 :** For all  $i \geq \tilde{s} + 1$ ,  $\Delta^1 q_{k-1}(i) < 0$ . Let  $i_0 = \tilde{s} + 1$ , then the probability  $\bar{q}_{k-1}$  is

defined as follows:

$$\begin{cases} \bar{q}_{k-1}(i) = q_{k-1}(i) \text{ if } i < i_0 + 1, i > i_0 + 2 \\ \bar{q}_{k-1}(i_0 + 1) = q_{k-1}(i_0) + \varepsilon \\ \bar{q}_{k-1}(i_0 + 2) = q_{k-1}(i_0 + 2) - \varepsilon. \end{cases}$$

The functions  $\bar{q}_{k-1}$  are presented in Figure 6.2. The rest of the proof is similar to the one when  $k$  is odd.

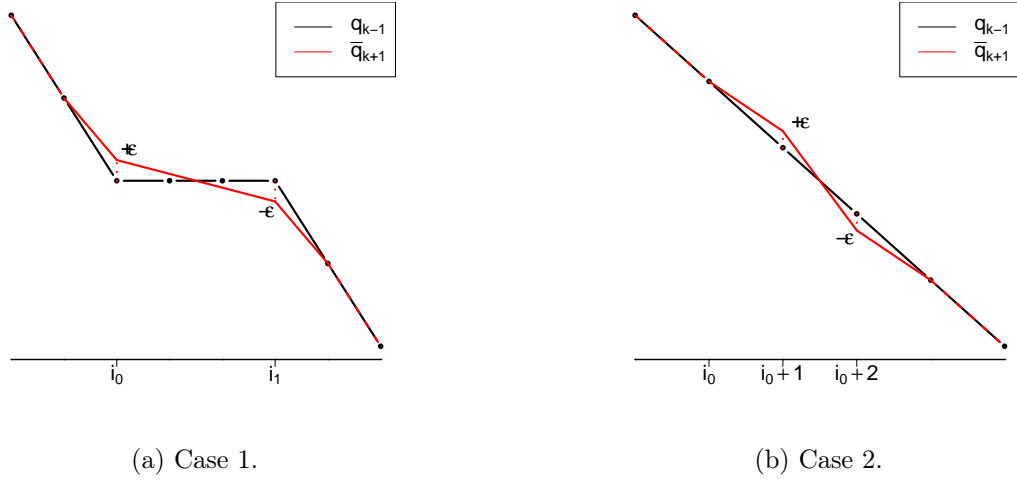


Figure 6.2: Functions  $q_{k-1}(i)$  and  $\bar{q}_{k-1}(i)$  versus  $i$  ( $k$  even).

Therefore, Theorem 20 is proved in the case  $\beta(\hat{p}) = 0$ . Assume now that  $\beta(\hat{p}) \neq 0$ . By Theorem 18 we know that if  $l$  is a  $k$ -knot of  $\hat{p}$ ,  $\beta(\hat{p})$  is written as follows:

$$\frac{F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\bar{p}}^k(l)}{m_l^k} = \beta(\hat{p}). \quad (6.9)$$

Let us prove that if the support of  $\bar{p}$  is infinite then  $\beta(\hat{p}) = 0$ . Indeed if the support of  $\bar{p}$  is infinite,  $\bar{p}$  has an infinite number of  $k$ -knots and Equation (6.9) is true for an infinite number of integers  $l$ .

Moreover by Equation (29) the term  $m_l^k$  is a polynomial function in the variable  $l$  with degree  $k$  and by Lemma 41 (see Section 6.4) the term  $F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\bar{p}}^k(l)$  is a polynomial function with degree smaller than  $k - 1$ . Therefore the left side in Equation (6.9) tends to zero when  $l$  tends to infinity, showing that  $\beta(\hat{p}) = 0$ .

### Preuve de la propriété 29 : la masse de $\hat{p}^{*k}$ est supérieure à 1

Let  $s_{\max}$  the maximum of  $\hat{s}^*$  and  $\tilde{s}$  (the maxima of the supports of  $\hat{p}^*$  and  $\tilde{p}$  respectively), then using Property 28, for all  $l \geq s$  we have:

$$F_{\hat{p}^*}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) = \sum_{j=1}^k \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(s_{\max}) (F_{\hat{p}^*}^j(s_{\max}) - F_{\tilde{p}}^j(s_{\max})).$$



Because the quantities  $\bar{Q}_{l-1}^j(s_{\max})$  are polynomial functions of  $l - s_{\max}$  with degree  $j - 1$ , we get:

$$\begin{aligned} F_{\hat{p}^*}^k(l) - F_{\hat{p}^*}^k(s_{\max}) &= F_{\hat{p}^*}^1(s_{\max}) - F_{\hat{p}^*}^1(s_{\max}) \frac{(l - s_{\max})^{k-1}}{(k-1)!} + o(l^{k-1}) \\ &= \left( \sum_{j=0}^{s_{\max}} \hat{p}^*(j) - 1 \right) \frac{(l - s_{\max})^{k-1}}{(k-1)!} + o(l^{k-1}). \end{aligned}$$

If  $\sum_{j=0}^{s_{\max}} \hat{p}^*(j) < 1$  then, when  $l$  tends to infinity, the right-hand term tends to  $-\infty$  and the left-hand term is non-negative by Theorem 14. Therefore  $\sum_{j=0}^{s_{\max}} \hat{p}^*(j) \geq 1$ .

### Preuve du contre-exemple 15 : la projection de $\delta_1$ sur $\mathcal{S}^3$ est de masse strictement supérieure à 1

Our purpose is to show that the projection of  $\delta_1$  on the cone  $\mathcal{S}_3$  has a mass strictly greater than one. After some computational results, we guess that this projection is written as  $f = \alpha \bar{Q}_5^3 + \beta \bar{Q}_6^3$ . We will now establish a necessary and sufficient condition which makes sure that  $f$  is  $\hat{p}^{*3}$ . This condition is given in Property 14.

We search  $\alpha$  and  $\beta$  such as  $f = \alpha \bar{Q}_5^3 + \beta \bar{Q}_6^3$  satisfies the stopping criterion. For this  $p$  we have  $f = (21\alpha + 28\beta, 15\alpha + 21\beta, 10\alpha + 15\beta, 6\alpha + 10\beta, 3\alpha + 6\beta, \alpha + 3\beta, \beta, 0, \dots)$ . With elementary calculations we obtain the following necessary conditions for  $\alpha$  and  $\beta$ :

$$S1 = \begin{cases} F_p^3(0) = 21\alpha + 28\beta \geq 0 = F_{\delta_1}^3(0) \\ F_p^3(1) = 78\alpha + 105\beta \geq 1 = F_{\delta_1}^3(1) \\ F_p^3(2) = 181\alpha + 246\beta \geq 3 = F_{\delta_1}^3(2) \\ F_p^3(3) = 336\alpha + 461\beta \geq 6 = F_{\delta_1}^3(3) \\ F_p^3(4) = 546\alpha + 756\beta \geq 10 = F_{\delta_1}^3(4) \\ F_p^3(5) = 812\alpha + 1134\beta \geq 15 = F_{\delta_1}^3(5) \\ F_p^3(6) = 1134\alpha + 1596\beta \geq 21 = F_{\delta_1}^3(6) \\ F_p^3(7) = 1512\alpha + 2142\beta \geq 28 = F_{\delta_1}^3(7) \end{cases}$$

and

$$S2 = \begin{cases} F_p^1(7) = 61\alpha + 89\beta \geq 1 = F_{\delta_1}^1(7) \\ F_p^2(2) = 378\alpha + 546\beta \geq 7 = F_{\delta_1}^2(7) \end{cases}$$

and

$$S3 = \begin{cases} (-1)^3 \Delta^3 p(i) = 0 \text{ if } i > 8 \text{ or if } i < 5 \\ (-1)^3 \Delta^3 p(6) = 2\beta \\ (-1)^3 \Delta^3 p(5) = 2\alpha. \end{cases}$$

The condition  $S1$  assure that  $f$  satisfies 1.,  $S2$  that  $p$  satisfies 2.(c) and  $S3$  that  $p$  satisfies 2.(b). If we assume that  $\alpha$  and  $\beta$  are strictly nonnegative we find the more restrictive necessary condition:

$$S4 = \begin{cases} 812\alpha + 1134\beta = 15 \\ 1134\alpha + 1596\beta = 21 \end{cases} = \begin{cases} 812\alpha + 1134\beta = 15 \\ 54\alpha + 76\beta = 1, \end{cases}$$

whose unique solution is

$$\begin{cases} \alpha = \frac{3}{238} \\ \beta = \frac{1}{238}. \end{cases}$$

Reciprocally if we take  $\alpha$  and  $\beta$  like before then  $f$  satisfies the conditions  $S1$ ,  $S2$  and  $S3$ . Using Property 14 it follows that  $f$  is the projection of  $\delta_1$  on the set of 3-monotone sequences. Let us recall that  $m_j^k$  is the mass of  $\bar{Q}_j^k$ . Then the mass of  $f$  is equal to  $m(f) = \alpha m_5^3 + \beta m_6^3 = \frac{3}{238} \times 56 + \frac{1}{238} \times 84 = 1.058824$ .

### Preuve de la propriété 17 : la masse de $\hat{p}^{*k}$ converge vers 1

Let  $\varepsilon > 0$  be a real number. Since the set of  $k$ -monotone probabilities is included in the set of decreasing probabilities there exists an integer  $s_\varepsilon$  such as for all  $k$ -monotone probability  $q$ , the following inequality is true :

$$\sum_{i=s_\varepsilon+1}^{\infty} q(i) \leq \varepsilon/4.$$

Let  $p$  be a discrete  $k$ -monotone probability. The following inequalities are true :

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=0}^{\infty} \hat{p}^*(i) - 1 \right| &\leq \left| \sum_{i=0}^{s_\varepsilon} (\hat{p}^*(i) - p(i)) \right| + \left| \sum_{i=s_\varepsilon+1}^{\infty} (\hat{p}^*(i) - p(i)) \right| \\ &\leq \sum_{i=0}^{s_\varepsilon} |\hat{p}^*(i) - p(i)| + \varepsilon/2. \end{aligned}$$

Moreover, by Theorem 22  $\|p - \hat{p}^*\|_2 \leq \|p - \tilde{p}_n\|_2$  almost surely, therefore we have :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^*(i) - p(i))^2 = 0.$$

Then almost surely, for all  $i \in \mathbb{N}$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} (\hat{p}^*(i) - p(i)) = 0$  and  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{s_\varepsilon} |\hat{p}^*(i) - p(i)| = 0$ . Finally almost surely:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \sum_{i=0}^{\infty} \hat{p}^*(i) - 1 \right| = 0.$$

### Preuve de la Propriété 21 : Support

Let us assume that  $k$  is odd and prove that if  $\hat{s} \geq \tilde{s} + 1$  then  $\Delta^k \hat{p}(r) = 0$  for all  $r \in [\tilde{s} - k + 2, \hat{s} - 2]$ . We consider  $q_1, \dots, q_{k-1}$  the derivative functions of  $\hat{p}$  defined as before in Equation (6.5). As  $\hat{s}$  is a  $k$ -knot of  $\hat{p}$  there exist two consecutive 1-knots between  $r$  and  $\tilde{s}$ . This allows to define the function  $\bar{q}_{k-1}$  and  $\bar{p}$  as before in Equation (6.6) and Equation (6.7).

By construction  $\bar{q}_{k-1}$  is non-increasing (and nonnegative) and therefore  $\bar{p}$  is  $k$ -monotone (and nonnegative). Moreover  $\bar{p}$  is lower than  $\hat{p}$ , equal to  $\hat{p}$  on  $\{0, \dots, \tilde{s}\}$  and for  $i = r + k - 1$  we have  $\bar{p}(i) < \hat{p}(i)$ . Moreover  $r + k - 1 > \tilde{s}$  because  $r \in \{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 1\}$ . It follows that  $\|\bar{p} - \tilde{p}\|_2 < \|\hat{p} - \tilde{p}\|_2$  which contradicts the definition of  $\hat{p}$ . Therefore  $\hat{p}$  does not have any  $k$ -knot on  $\{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 1\}$ .

The proof is similar when  $k$  is even.

**Remarque 1:** The second case requires  $q_{k-1}(r+2) > 0$  for  $\bar{q}$  to be nonnegative. That is to say we need that  $r+2 \leq \hat{s}$ . This is the reason why the two sets  $\{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 2\}$  and  $\{\tilde{s} - k + 2, \dots, \hat{s} - 1\}$  are different if  $k$  is odd or  $k$  is even.

### Preuve de la Propriété 23 : moments de $\widehat{p}$

Let  $q$  be a sequence and let  $\varepsilon$  be a real number such that  $(1 - \varepsilon)\widehat{p} + \varepsilon q$  is a  $k$ -monotone probability. Using Lemma 37 (see Section 6.4) we obtain :

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i))q(i) - \sum_{i=0}^{\infty} \widehat{p}(i)(\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i)) \geq 0.$$

By definition  $\beta(\widehat{p}) = \langle \widehat{p}, \widehat{p} - \widetilde{p} \rangle$  therefore we have for all  $k \geq 2$ :

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\widehat{p}(i) - \widetilde{p}(i))q(i) \geq \beta(\widehat{p}).$$

For  $q(i) = |i-a|_+^u/m(a, u)$  we get the result. Moreover for  $q = \delta_0$  we find  $\widehat{p}(0) - \widetilde{p}(0) \geq \beta(\widehat{p})$ .

### Preuve de la Propriété 24 : vitesse paramétrique en norme $\mathcal{L}^r$

The proof is based on Lemma 6.2 of Jankowski and Wellner (2009b). First we assume that  $r = 2$ . Banach's Theorem for projection on a closed convex set says that the projection on the set of  $k$ -monotone probabilities is 1-lipschitzienne. Then if  $p_{\mathcal{S}^k}$  is the projection of  $p$  on the set  $\mathcal{S}^k$  we have:

$$\sqrt{n} \|p_{\mathcal{S}^k} - \widehat{p}\|_2 \leq \sqrt{n} \|p - \widetilde{p}\|_2$$

We need to show that:

$$\sqrt{n} \|p - \widetilde{p}\|_2 = O_{\mathbb{P}}(1).$$

In other terms we need to show that the series  $W_n = \sqrt{n}(p - \widetilde{p})$  is tight in  $L_2(\mathbb{N})$ . Using Lemma 6.2 of Jankowski and Wellner (2009) that is equivalent to:

$$\begin{cases} \sup_{n \in \mathbb{N}} \mathbb{E}[\|W_n\|_2^2] < \infty, \\ \lim_{m \rightarrow \infty} \sup_{n \in \mathbb{N}} \sum_{j \geq m} \mathbb{E}[\|W_n\|_2] = 0. \end{cases}$$

Then, because  $\text{var}(\widetilde{p}(j)) = p(j)(1 - p(j))/n$ , the series  $W_n = \sqrt{n}(p - \widetilde{p})$  is tight.

If  $r$  is larger than 2 we conclude because  $\sqrt{n} \|p_{\mathcal{S}^k} - \widehat{p}\|_r \leq \sqrt{n} \|p_{\mathcal{S}^k} - \widehat{p}\|_2$  for all  $r \in [2, \infty]$ .

### Preuve de la Propriété 25

#### Estimation consistante des noeuds de $p^*$

Let  $i$  be an integer. By the strong law of large numbers, a.s. the quantity  $\widetilde{p}(i)$  tends to  $p(i)$ . Because the maximum  $s$  of the support of  $p$  is finite we have the following limit:

$$a.s. \lim_{n \rightarrow \infty} \|\widetilde{p} - p\|_2^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^s (\widetilde{p}(i) - p(i))^2 = 0.$$

Then by Theorem 22 we get that for all integer  $i$ :

$$a.s. \lim_{n \rightarrow \infty} (\widehat{p}(i) - p(i))^2 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|\widehat{p} - p\|_2^2 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|\widetilde{p} - p\|_2^2 = 0.$$

It follows that:

$$a.s. \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ (-1)^k \Delta^k \widehat{p}(j) - (-1)^k \Delta^k p(j) \right] = 0.$$

Because  $(-1)^k \Delta^k p(j) > 0$ , almost surely for  $n$  large enough  $(-1)^k \Delta^k \widehat{p}(j) > 0$ , which proves that  $j$  is a  $k$ -knot of  $\widehat{p}$ .

### Estimation consistante du maximum du support de $p^*$

If  $\widehat{s} \leq s$  the theorem is true. We assume now that  $\widehat{s} > s$ .

Let us first consider the case where  $k$  is odd. Thanks to the second point of Theorem 20, if we note  $\widetilde{s}$  the maximum of the support of  $\widetilde{p}$  then  $\widehat{p}$  has not  $k$ -knot on  $\{\widetilde{s}-k+2, \dots, \widehat{s}-2\}$ . Moreover as  $\widetilde{s} \leq s$ ,  $\widehat{p}$  has no  $k$ -knot in  $\{s-k+2, \dots, \widehat{s}-2\}$  (this set may be empty).

The function  $p$  is  $k$ -monotone and  $s$  is a  $k$ -knot of  $p$ , then by Theorem 25 almost surely there exists  $n_0$  such as for all  $n \geq n_0$ ,  $s$  is a  $k$ -knot of  $\widehat{p}$ . It follows that (almost surely)  $s$  is not in the set  $\{s-k+2, \dots, \widehat{s}-2\}$  and therefore  $s \geq \widehat{s}-1$  or  $\widehat{s} \leq s+1$ . The proof of the result in the case where  $k$  is even is similar.

## Preuves de la Section 5.4 : Algorithme

### Preuve du théorème 5.4 : Estimation de $\pi$ sur un support fini

**The algorithme gives  $\widehat{p}_L$  with finite calculations :** During step 1 the set  $S$  is a subset of  $\{0, \dots, L\}$  and  $\pi$  is the minimizer of  $\Psi$  on the set  $S$ . The criterion allowing us to determine if  $\pi = \widehat{\pi}_L$  (and to stop the algorithm) is given by Lemma 34 (see Section 6.3.1).

In order to show that the algorithm returns  $\widehat{\pi}_L$  in a finite number of steps we need to show the both assertions :

- **Assertion 1 :** Going from Step 2 to Step 1 is done in a finite number of runs.
- **Assertion 2 :** If  $\pi_m$  denotes the value of  $\pi$  at iteration  $m$  of the algorithm, then  $(\Psi(\pi_m))$  converges to the minimum of  $\Psi$  on the set of probabilities with support on  $\{0, \dots, L\}$  that is to say to  $\widehat{\pi}_L$ .

At Step 2 the set  $S'$  may be reduced up to one element, but it can not be empty because the minimizer of  $\Psi$  on a singleton is non-negative. That proves Assertion 1.

Let us show Assertion 2 by proving that for all  $m \in \mathbb{N}^*$ ,  $\Psi(\pi_{m+1}) < \Psi(\pi_m)$ . Let  $S$  be the support of  $\pi_m$  at iteration  $m$ , and let  $j \in \{0, \dots, L\}$  be an integer such as  $D_{\delta_j} \Psi(\pi_m) < 0$ . We have  $S' = S + j$  and  $\Psi(\pi_{S'}) < \Psi(\pi_S)$  by Lemma 36 (see Section 6.3.1).

We consider two cases :

**1 :** If  $\pi_{S'}$  is a nonnegative measure we go to Step 1 with  $\pi = \pi_{S'}$ . In other terms  $\pi_{m+1} = \pi_{S'}$  then  $\Psi(\pi_{m+1}) < \Psi(\pi_m) = \Psi(\pi_S)$ .

**2 :** If  $\pi_{S'}$  is not a nonnegative measure the algorithm iterate inside Step 2 and  $\pi_{S'}$  is updated at each loop. We need to verify that at the end of this iterative procedure:

$$\Psi(\pi_{S''}) < \Psi(\pi_S).$$

Let  $r$  be the number of times when we enter Step 2 during the  $m$ -th curl. Let  $S''_h$  be the value of the set  $S''$  the  $h$ -th time when we enter Step 2 during the  $m$ -th curl. We have  $\pi_{m+1} = \pi_{S''_h}$ .

We show by induction the following property :

$$HR_h : \Psi(\pi_{S''_h}) < \Psi(\pi_S).$$

Thanks to the property 2. in Lemma 36 the property  $HR_1$  is true. Assume now that  $HR_h$  is true for some  $h \leq r - 1$ . Let  $l$  and  $\varepsilon$  be defined as follows:

$$l = \operatorname{argmin}_{i \in S'} \left\{ \frac{a_i}{a_i - \pi_{S_h''}(i)}, \text{ pour } i, \pi_{S_h''}(i) < a_i \right\},$$

$$\varepsilon = \frac{a_l}{a_l - \pi_{S_h''}(l)}.$$

Then  $(1 - \varepsilon)\pi_S + \varepsilon\pi_{S_h''}$  is a 1-mass function with support  $S_{h+1}'' = S_h'' - \{l\}$ . It follows, by convexity of  $\Psi$  that:

$$\begin{aligned} \Psi(\pi_{S_{h+1}''}) &\leq \Psi((1 - \varepsilon)\pi_S + \varepsilon\pi_{S_h''}) \\ &\leq (1 - \varepsilon)\Psi(\pi_S) + \varepsilon\Psi(\pi_{S_h''}). \end{aligned}$$

Thanks to  $HR_h$ :

$$\Psi(\pi_{S_{h+1}''}) < \Psi(\pi_S),$$

and  $HR_{h+1}$  is true.

Then  $\Psi(\pi_{m+1}) > \Psi(\pi_m)$  for all integer  $m$ , and  $(\Psi(\pi_m))_{m \in \mathbb{N}}$  converges (because it is a nonincreasing and bounded sequence). Because the nondecreasing is strict before the minimum of  $\Psi(\pi^L)$  and the sequence has only a finite number of terms, the limit is the minimum of  $\Psi$  and this proves Assertion 2.

**Proof of the lemmas :** The proof of Theorem 27 is based on the following lemmas, their proofs being given afterwards.

**Lemma 33.** *Let  $\pi$  and  $\mu$  be two probabilities with support on the set  $\{0, \dots, L\}$ . Then we have the following equality:*

$$D_\mu \Psi(\pi) = \sum_{j=0}^L \mu(j) D_{\delta_j} \Psi(\pi).$$

**Lemma 34.** *There is equivalence between :*

1.  $\pi = \widehat{\pi}_L$ .
2.  $\forall j \in \{0, \dots, L\}, D_{\delta_j} \Psi(\pi) \geq 0$ .

Moreover if  $\pi = \widehat{\pi}_L$  then for all  $j \in \operatorname{supp}(\pi)$  we have  $D_{\delta_j} \Psi(\pi) = 0$ .

**Lemma 35.** *Let  $\mathcal{M}_S$  be the set of positive measure  $\pi$  whose support is included in the set  $S$ . Let  $\pi_S$  and  $\pi'_S$  be defined as follows:*

$$\pi_S = \operatorname{argmin}_{\substack{\sum_{j \in S} \pi(j) = 1 \\ \pi \in \mathcal{M}_S}} (\Psi(\pi)) \tag{6.10}$$

and

$$\pi'_S = \operatorname{argmin}_{\pi \in \mathcal{M}_S} \left( \Psi(\pi) + \lambda_S \left( \sum_{j \in S} \pi(j) - 1 \right) \right). \tag{6.11}$$

Then we have  $\pi_S = \pi'_S$ .

The proof of the following lemma is in Durot et al. (2013):

**Lemme 36.** *Let  $\pi_S = \sum_{i \in S} a_i \delta_i$  be the minimizer of  $\Psi$  over the set of nonnegative sequences with support  $S \subset \{0, \dots, L\}$ . Let  $j$  an integer such that  $j \notin S$  and  $D_{\delta_j} \Psi(\pi_S) < 0$ . Let  $\pi_{S'}^* = \sum_{i \in S'} b_i \delta_i$  be the minimizer of  $\Psi$  over the set of sequences with support  $S' = S + \{j\}$ .*

*Then, the two following results are hold:*

1.  $\Psi(\pi_{S'}) < \Psi(\pi_S)$ .
2. Assume that  $b_i$  for some  $i \in S$  is strictly nonpositive and let:

$$l = \operatorname{argmin}_{i \in S'} \left\{ \frac{a_i}{a_i - b_i}, \text{ pour } i, b_i < a_i \right\}.$$

*If  $\pi_{S''}$  is the minimizer of  $\Psi$  over the set of sequences with support  $S'' = S' - \{l\}$ , then  $\Psi(\pi_{S''}) < \Psi(\pi_S)$ .*

**Proof of Lemma 33** Let  $\mu$  be a probability with support included in  $\{0, \dots, L\}$ . We write  $\mu = \sum_{j=0}^L \mu(j) \delta_j$  then, for  $L \leq \tilde{s}$ :

$$\begin{aligned} D_\mu \Psi(\pi) &= \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi((1-\varepsilon)\pi + \varepsilon\mu) - \Psi(\pi)) \\ &= \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \left( \sum_{i=0}^L \left( \sum_{l=0}^L [(1-\varepsilon)\pi(l) + \varepsilon\mu(l)] Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{i=0}^L \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right)^2 \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i=0}^L \left[ 2\varepsilon \left( \sum_{l=0}^L (\mu(l) - \pi(l)) Q_l^k(i) \right) \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right) \right] \\ &\quad \left. + \varepsilon^2 \left( \sum_{l=0}^L (\mu(l) - \pi(l)) Q_l^k(i) \right)^2 \right] \\ &= 2 \sum_{i=0}^L \left( \sum_{l=0}^L \mu(l) Q_l^k(i) - \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) \right) \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right). \end{aligned}$$

In particular for  $\mu = \delta_j$  we find:

$$D_{\delta_j} \Psi(\pi) = 2 \sum_{i=0}^L \left( Q_j^k(i) - \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) \right) \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right).$$

Then, by noting that  $\sum_j \mu(j) = 1$  we have the following equalities:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^L \mu(j) D_{\delta_j} \Psi(\pi) &= 2 \sum_{i=0}^L \left( \sum_{j=0}^L \mu(j) \left( Q_j^k(i) - \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) \right) \right) \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right) \\ &= 2 \sum_{i=0}^L \left( \sum_{j=0}^L \mu(j) Q_j^k(i) - \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) \right) \left( \sum_{l=0}^L \pi(l) Q_l^k(i) - \tilde{p}(i) \right) \end{aligned}$$

The lemma is proved.

**Proof of the lemma 34** We first show that  $\widehat{\pi}_L$  satisfies 2.

For all  $0 < \varepsilon < 1$  and  $j \in \{0, \dots, L\}$  the function  $(1 - \varepsilon)\widehat{\pi}_L + \varepsilon\delta_j$  is a probability. Then by definition of  $\widehat{\pi}_L$  we have the following inequality:

$$\lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi((1 - \varepsilon)\widehat{\pi}_L + \varepsilon\delta_j) - \Psi(\widehat{\pi}_L)) \geq 0,$$

which leads to  $D_{\delta_j} \Psi(\widehat{\pi}_L) \geq 0$  showing point 2.

Reciprocally, for  $\pi$  a probability that satisfies 2., let us show that  $\pi = \widehat{\pi}_L$ . Precisely we show that for all probability  $\mu$  with support on  $\{0, \dots, L\}$  we have  $\Psi(\mu) - \Psi(\pi) \geq 0$ . Let  $\mu$  be a probability with support on  $\{0, \dots, L\}$ . Because  $\Psi$  is convex we have:

$$\begin{aligned} D_\mu \Psi(\pi) &= \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi((1 - \varepsilon)\pi + \varepsilon\mu) - \Psi(\pi)) \\ &\leq \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} ((1 - \varepsilon)\Psi(\pi) + \varepsilon\Psi(\mu)) - \Psi(\pi) \\ &\leq \Psi(\mu) - \Psi(\pi). \end{aligned}$$

By Lemma 33:

$$D_\mu \Psi(\pi) = \sum_{j=0}^L \mu(j) D_{\delta_j} \Psi(\pi).$$

Because  $\pi$  satisfies 2.,  $D_\mu \Psi(\pi) \geq 0$ , and finally  $\Psi(\mu) - \Psi(\pi) \geq 0$  and  $\pi = \widehat{\pi}_L$ . To conclude assume now that  $j \in \text{supp}(\widehat{\pi}_L)$ . Then the function  $(1 + \varepsilon)\widehat{\pi}_L - \varepsilon\delta_j$  is a probability for  $\varepsilon$  positive small enough, and we have the following inequality:

$$-D_{\delta_j} \Psi(\pi) = \lim_{\varepsilon \searrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} (\Psi((1 + \varepsilon)\widehat{\pi}_L - \varepsilon\delta_j) - \Psi(\widehat{\pi}_L)) \geq 0$$

which concludes the proof of the lemma.

**Proof of Lemma 35** Let  $\pi_S$  be the solution of the first problem of minimization. Let  $Q_S$  and  $H_S$  be defined as in Section 5.4. The KKT's conditions give us that  $\pi_S$  is the unique sequence that satisfies:

$$\exists \lambda_S \in \mathbb{R}, \begin{cases} \sum_{j \in S} \pi_S(j) = 1 \\ \frac{\partial}{\partial \pi} \mathcal{L}(\pi_S, \lambda_S) = 0 \end{cases} \quad (6.12)$$

where  $\mathcal{L}$  is the Lagrange's function:

$$\mathcal{L}(\pi, \lambda) = \Psi(\pi) + \lambda \left( \sum_{j \in S} \pi(j) - 1 \right).$$

The partial derivative function of  $\mathcal{L}$  is:

$$\frac{\partial}{\partial \pi} \mathcal{L}(\pi, \lambda) = -Q_S^T (\tilde{p} - Q_S \pi) + \lambda Q_S^T \mathbb{I},$$

where  $\mathbb{I}$  is the vector with  $L + 1$  components equal to 1. We have

$$\pi_S = (Q_S^T Q_S)^{-1} Q_S^T (\tilde{p} - \lambda_S \mathbb{I}) \text{ and } Q_S \pi_S = H_S (\tilde{p} - \lambda_S \mathbb{I}),$$

leading to:

$$1 = \langle Q_S \pi_S, \mathbb{I} \rangle = \langle H_S \tilde{p}, \mathbb{I} \rangle - \lambda_S \langle H\mathbb{I}, \mathbb{I} \rangle .$$

Finally we obtain:

$$\lambda_S = \frac{\langle H\tilde{p}, \mathbb{I} \rangle - 1}{\langle H\mathbb{I}, \mathbb{I} \rangle} .$$

Then for all  $\pi$  with support included on  $S$  we have  $\mathcal{L}(\pi_S, \lambda_S) \leq \mathcal{L}(\pi, \lambda_S)$  and  $\pi_S$  is solution for the second problem:

$$\pi_S = \underset{\text{supp}(\pi) \subset S}{\text{argmin}} (\mathcal{L}(\pi, \lambda_S))$$

The both minimization problems are strictly convex, their solutions are unique and therefore  $\pi_S = \pi'_S$ .

### Preuve du Théorème 28 : Le théorème clé sur les primitives $k$ -ièmes

We prove this property by induction. First for  $k = 2$ , we have the following equalities:

$$\begin{aligned} F_f^2(l) - F_{\tilde{p}}^2(l) &= \sum_{h_1=0}^l \sum_{h_2=0}^{h_1} (f(h_2) - \tilde{p}(h_2)) \\ &= \sum_{h_1=0}^s \sum_{h_2=0}^{h_1} (f(h_2) - \tilde{p}(h_2)) + \sum_{h_1=s+1}^l \sum_{h_2=0}^{h_1} (f(h_2) - \tilde{p}(h_2)) \\ &= F_f^2(s) - F_{\tilde{p}}^2(s) + \sum_{h_1=s+1}^l \sum_{h_2=0}^s (f(h_2) - \tilde{p}(h_2)) \\ &= F_f^2(s) - F_{\tilde{p}}^2(s) + (F_f^1(s) - F_{\tilde{p}}^1(s))(l-s)_+ . \end{aligned}$$

Because  $\bar{Q}_{l-1}^2(s) = (l-s)_+$  the property is true for  $k = 2$ .

Assume now that the property is true until the rank  $k-1$ . We have the following properties:

$$\begin{aligned} F_f^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) &= \sum_{h=0}^l (F_f^{k-1}(h) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(h)) \\ &= \sum_{h=0}^s (F_f^{k-1}(h) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(h)) + \sum_{h=s+1}^l (F_f^{k-1}(l) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(l)) \\ &= F_f^k(s) - F_{\tilde{p}}^k(s) + \sum_{h=s+1}^l \left( \sum_{j=1}^{k-1} \bar{Q}_{h-1}^{k-1-j+1}(s) (F_f^j(s) - F_{\tilde{p}}^j(s)) \right) . \end{aligned}$$

The last equality is obtained by iteration. Using the definition of the  $Q_j^k$  we get:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{h-1}^{k-j}(l) &= \bar{Q}_{l-1}^{k-j}(l-h+s) \\ &= \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l-h+s) - \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l-h+s+1) , \end{aligned}$$



and the following equalities:

$$\begin{aligned} F_f^k(l) - F_{\hat{p}}^k(l) &= F_f^k(s) - F_{\hat{p}}^k(s) + \sum_{j=1}^{k-1} (F_f^j(s) - F_{\hat{p}}^j(s)) \sum_{h=s+1}^1 (\bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l-h+s) \\ &\quad - \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l-h+s+1)) \\ &= F_f^k(s) - F_{\hat{p}}^k(s) + \sum_{j=1}^{k-1} (F_f^j(s) - F_{\hat{p}}^j(s)) (\bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(s) - \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l)). \end{aligned}$$

Because  $\bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(l) = 0$  and  $\bar{Q}_{l-1}^{k-k+1}(s) = 1$ , we finally obtain:

$$F_f^k(l) - F_{\hat{p}}^k(l) = \sum_{j=1}^k \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(s) (F_f^j(s) - F_{\hat{p}}^j(s)).$$

### Preuve de la Propriété 30 : critère d'arrêt pour $k = 3, 4$

We first show that  $\hat{p}$  satisfies the four properties stated in 1. We know by Theorem 18 that it satisfies 1.(a) and 1.(b). Moreover by Lemma 40 (see Section 6.4) it satisfies 1.(d). It remains to show 1.(c).

For  $\varepsilon$  a real number, and for any  $j \in \{2, k-1\}$ , let  $q_\varepsilon$  be the function defined as follows:

$$q_\varepsilon(i) = (1 - \varepsilon)\hat{p}(i) + \varepsilon \frac{\bar{Q}_{\hat{s}+1}^j(i)}{m_{\hat{s}+1}^j}$$

where  $\bar{Q}_{\hat{s}+1}^j$  is defined at Equation (4.5). The function  $q_\varepsilon$  is a  $k$ -monotone probability for  $\varepsilon$  small enough.

Indeed  $(-1)^k \Delta^k \bar{Q}_{\hat{s}+1}^j(i)$  is strictly nonpositive only for  $i = \hat{s}$ . Moreover  $(-1)^k \Delta^k \hat{p}(\hat{s}) = \hat{p}(\hat{s}) > 0$  then for  $\varepsilon$  smaller enough,

$$(-1)^k \Delta^k q_\varepsilon(\hat{s}) = (1 - \varepsilon)\hat{p}(\hat{s}) - \varepsilon \bar{Q}_{\hat{s}+1}^j(i) / m_{\hat{s}+1}^j$$

is nonnegative.

Using Lemma 37 (see Section 6.4) we obtain :

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}(i) - \tilde{p}(i)) \frac{\bar{Q}_i^k(i)}{m_i^k} - \sum_{i=0}^{\infty} \hat{p}(i) (\hat{p}(i) - \tilde{p}(i)) \geq 0.$$

By Lemma 38 (see Section 6.4) and the fact that  $\beta(\hat{p}) = \langle \hat{p}, \hat{p} - \tilde{p} \rangle$  we deduce that:

$$\frac{F_{\hat{p}}^j(\hat{s}+1) - F_{\tilde{p}}^j(\hat{s}+1)}{m_{\hat{s}+1}^j} \geq \beta(\hat{p}),$$

which is exactly 2.(c).

Reciprocally we assume now that  $f$  satisfies 1. and we show that  $f = \hat{p}$ , which by Theorem 18, is equivalent to show that

$$F_f^k(l) - F_{\hat{p}}^k(l) \geq \beta(f) m_l^k,$$

for all  $l \in \mathbb{N}$  with equality if  $l$  is a  $k$ -knot of  $f$ .

This is true for  $l \leq s + 1$  because  $f$  satisfies 2.(a) and 2.(b). Because  $f$  has no  $k$ -knot after  $s$  it remains to show that the inequality is true for  $l \geq s + 2$ . We begin with the case  $k = 3$ . Because  $s \geq \tilde{s}$  and  $f$  and  $\tilde{p}$  are probabilities, applying Theorem 28, we obtain that for all  $l \geq s + 1$ ,

$$\begin{aligned} F_f^3(l) - F_{\tilde{p}}^3(l) &= \sum_{j=2}^3 Q_{l-1}^{3-j+1}(s+1)(F_f^j(s+1) - F_{\tilde{p}}^j(s+1)) \\ &= (F_f^3(s+1) - F_{\tilde{p}}^3(s+1)) + (l-s-1)(F_f^2(s+1) - F_{\tilde{p}}^2(s+1)). \end{aligned}$$

As  $f$  satisfies 1.(a) we have:

$$F_f^3(l) - F_{\tilde{p}}^3(l) \geq \beta(f)m_{s+1}^3 + (l-s-1)(F_f^2(s+1) - F_{\tilde{p}}^2(s+1)).$$

Moreover as  $f$  satisfies 1.(c):

$$F_f^3(l) - F_{\tilde{p}}^3(l) \geq \beta(f)m_{s+1}^3 + (l-s-1)\beta(f)m_{s+1}^2 = \beta(f)(m_{s+1}^3 + (l-s-1)m_{s+1}^2).$$

Finally, because  $\beta(f) \leq 0$  by 1.(d), it remains to show that:

$$m_{s+1}^3 + (l-s-1)m_{s+1}^2 \leq m_l^3. \quad (6.13)$$

Thanks to Equation (29), Equation (7.16) may be written as follows:

$$\frac{(s+4)(s+3)(s+2)}{6} + (l-s-1)\frac{(s+3)(s+2)}{2} \leq \frac{(l+3)(l+2)(l+1)}{6}.$$

After some calculations, we can show that (7.16) is satisfied if and only if  $P_3(l) \geq 0$  where  $P_3$  is the polynomial function  $P_3(l) = (l-s)(l-(s+1))(l+2s+7)$ . This is true because  $l \geq s + 1$ .

Let us now prove the case  $k = 4$ . By Theorem 28 we obtain for all  $l \geq s + 1$ :

$$\begin{aligned} F_f^4(l) - F_{\tilde{p}}^4(l) &= (F_f^4(s+1) - F_{\tilde{p}}^4(s+1)) + (l-s-1)(F_f^3(s+1) - F_{\tilde{p}}^3(s+1)) \\ &\quad + Q_{l-1}^3(s+1)(F_f^2(s+1) - F_{\tilde{p}}^2(s+1)). \end{aligned}$$

Let  $A_I(s) = \prod_{i \in I}(s+i)$ , then using Equation (29) we need to show that:

$$A_{[3,5]}(s) + 4A_{[3,4]}(s)(l-s-s) + 6(l-s-1)(l-s-2)A_{\{3\}}(s) \leq \frac{(l+1)A_{[1,4]}(l)}{s+2}. \quad (6.14)$$

After some calculations, we can show that (6.14) is satisfied if and only if  $P_4(l) \geq 0$  where  $P_4$  is the polynomial function

$$P_4(l) = A_{[1,4]}(l) - 6(l-(s+1))(l-(s+2))A_{[2,3]}(s) + 4(l-(s+1))A_{[2,4]}(s) - A_{[2,5]}(s).$$

We have  $P_4(l+1) - P_4(l) = 4(P_3(l+1) + 3(s+2)(s+3))$  and  $P_4(s+2) = 12(s+3)(s+4) > 0$  then  $P_4(l) \geq 0$  because  $l \geq s + 2$ .

## Preuves des lemmes techniques

Let us state technical lemmas used in the proofs given before. Their proofs are given afterwards.

**Lemma 37.** Let  $q$  be a sequence. For all  $\varepsilon$  real number we note  $q_\varepsilon = (1 - \varepsilon)\hat{p}^k + \varepsilon q$ . We note also  $D(\hat{p}^k, \tilde{p}, q) = \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))q(i) - \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))\hat{p}^k(i)$ .

1. We assume that for all  $\varepsilon > 0$  the sequence  $q_\varepsilon$  is a  $k$ -monotone probability. Then  $D(\hat{p}^k, \tilde{p}, q) \geq 0$ .
2. We assume that for all  $\varepsilon < 0$  the sequence  $q_\varepsilon$  is a  $k$ -monotone probability. Then  $D(\hat{p}^k, \tilde{p}, q) \leq 0$ .

**Lemma 38.** For all integer  $k \geq 2$ , for all  $l \in \mathbb{N}$  and for all  $f \in \mathcal{P}$ , the following assumption is true:

$$\sum_{i=0}^l f(i)\bar{Q}_i^k(i) = F_f^k(l). \quad (6.15)$$

**Lemma 39.** For all  $k \geq 0$ , for all  $f \in \mathcal{S}^k$ , for all  $g \in L^1(\mathbb{N})$ :

$$\sum_{i=0}^{\infty} f(i)g(i) = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(i)F_g^k(i).$$

In particular for all  $f \in \mathcal{S}^k$  the coefficient  $\beta(f)$  defined at Equation (5.3) satisfies:

$$\beta(f) = \sum_{i=0}^{\infty} f(i)(f(i) - \tilde{p}(i)) = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(i)(F_f^k(i) - F_{\tilde{p}}^k(i)).$$

**Lemma 40.** The coefficient  $\beta(\hat{p})$  defined at Equation (5.3) is always non-positive.

**Remarque 1:** The coefficient  $\beta(\hat{p}^k)$  equals to zero if and only if  $\hat{p}^k$  satisfies the characterization of  $\hat{p}^{*k}$ , that is to say if  $\hat{p}^k = \hat{p}^{*k}$ .

**Lemma 41.** Let  $k$  be an integer with  $k \geq 2$ . Let  $f$  be a function in  $\mathcal{L}^1(\mathbb{N})$ , let  $s \in \mathbb{N}$  and  $l \geq s$ . The following equality is true:

$$F_f^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) = \frac{(l-s)^{k-1}}{(k-1)!} (F_f^1(s) - F_{\tilde{p}}^1(s)) + o(l^{k-1}).$$

**Proof of Lemma 37** We prove the first point. The function  $q_\varepsilon$  is a  $k$ -monotone probability and  $\hat{p}^k$  minimizes  $\mathcal{Q}$  on the set of  $k$ -monotone probabilities then for all  $\varepsilon > 0$  we have  $\mathcal{Q}(q_\varepsilon) \geq \mathcal{Q}(\hat{p}^k)$  and:

$$\liminf_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (\mathcal{Q}(q_\varepsilon) - \mathcal{Q}(\hat{p}^k)) \geq 0,$$

that is equivalent to:

$$\liminf_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left( \sum_{i=0}^{\infty} ((1 - \varepsilon)\hat{p}^k(i) + \varepsilon q(i) - \tilde{p}(i))^2 - \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))^2 \right) \geq 0.$$

Therefore we have the following inequality:

$$\liminf_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left( \sum_{i=0}^{\infty} [(\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))^2 + 2\varepsilon(\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))(q(i) - \hat{p}^k(i)) + \varepsilon^2(q(i) - \hat{p}^k(i))^2] - \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))^2 \right) \geq 0,$$

leading to:

$$\liminf_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left( \varepsilon^2 \sum_{i=0}^{\infty} (q(i) - \hat{p}^k(i))^2 + 2\varepsilon \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))(q(i) - \hat{p}^k(i)) \right) \geq 0,$$

and finally to:

$$\sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))q(i) - \sum_{i=0}^{\infty} (\hat{p}^k(i) - \tilde{p}(i))\hat{p}^k(i) \geq 0.$$

The proof of the second point is similar. The function  $q_\varepsilon$  is a  $k$ -monotone probability and  $\hat{p}^k$  minimizes  $\mathcal{Q}$  on the set of  $k$ -monotone probabilities then for all  $\varepsilon < 0$  we have  $\mathcal{Q}(q_\varepsilon) \leq \mathcal{Q}(\hat{p}^k)$  and:

$$\liminf_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (\mathcal{Q}(q_\varepsilon) - \mathcal{Q}(\hat{p}^k)) \leq 0,$$

The following calculations are the same that for the first point.

**Proof of Lemma 38** The lemma is proved by induction. Let us first consider  $k = 2$ . Let  $f$  be a positive sequence and  $l \in \mathbb{N}$ . We have:

$$F_f^2(l) = \sum_{h=0}^l \sum_{i=0}^h f(i) = \sum_{i=0}^l \sum_{h=i}^l f(i) = \sum_{i=0}^l f(i)(l+1-i) = \sum_{i=0}^l f(i)\bar{Q}_l^2(i),$$

and Equation (6.15) is shown. Assume that Equation (6.15) is true for  $k-1 \geq 2$ . We have the following equalities:

$$F_f^k(l) = \sum_{h=0}^l F_f^{k-1}(h) = \sum_{h=0}^l \sum_{i=0}^h f(i)\bar{Q}_h^{k-1}(i) = \sum_{i=0}^l f(i) \sum_{h=i}^l \bar{Q}_h^{k-1}(i).$$

Using Pascal's Triangle and the definition of  $\bar{Q}_j^k$ , we get:

$$\begin{aligned} F_f^k(l) &= \sum_{i=0}^l f(i) \sum_{h=i}^l (\bar{Q}_h^k(i) - \bar{Q}_h^k(i+1)) \\ &= \sum_{i=0}^l f(i) \left( \sum_{h=i}^l \bar{Q}_h^k(i) - \sum_{h=i}^l \bar{Q}_{h-1}^k(i) \right) \end{aligned}$$

where the last equality comes from  $\bar{Q}_h^k(i+1) = \bar{Q}_{h-1}^k(i)$  with the convention  $\bar{Q}_0^k = 0$ . Finally we obtain:

$$F_f^k(l) = \sum_{i=0}^l f(i)(\bar{Q}_l^k(i)),$$

and the lemma is shown.

**Proof of Lemma 39** The lemma is proved by induction. First it is true for  $k = 0$  with the convention  $\Delta^0 f(i) = f(i) = F_f^0(i)$ . Assume now that the result is true for some

$k - 1 \geq 0$ . We have the following inequalities:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{\infty} \Delta^k f(i) F_g^k(i) &= \sum_{i=0}^{\infty} (\Delta^{k-1} f(i+1) - \Delta^{k-1} f(i)) F_g^k(i) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \Delta^{k-1} f(i) F_g^k(i-1) - \sum_{i=0}^{\infty} \Delta^{k-1} f(i) F_g^k(i) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \Delta^{k-1} f(i) [F_g^k(i-1) - F_g^k(i)] - \Delta^{k-1} f(0) F_g^k(0) \\
&= - \sum_{i=1}^{\infty} \Delta^{k-1} f(i) F_g^{k-1}(i) - \Delta^{k-1} f(0) F_g^{k-1}(0)
\end{aligned}$$

because  $F_g^k(0) = \sum_{h_1=0}^0 \cdots \sum_{h_k=0}^0 g(h_k) = f(0) = F_g^{k-1}(0)$ .

**Remarque 2:** These sums are well-defined by Lemma 38 ((see Section 6.4):

$$\begin{aligned}
\sum_{l=0}^{\infty} |F_g^k(l) \Delta^k f(l)| &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{i=0}^l g(i) \bar{Q}_l^k(i) (-1)^k \Delta^k f(l) \\
&= \sum_{i=0}^{\infty} \left( \sum_{l=i}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(l) \bar{Q}_l^k(i) \right) g(i).
\end{aligned}$$

By Property 13 we have the equality:

$$f(i) = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(l) \bar{Q}_l^k(i).$$

Then  $\sum_{l=i}^{\infty} (-1)^k \Delta^k f(l) \bar{Q}_l^k(i) \leq 1$  and finally :

$$\sum_{l=0}^{\infty} |F_g^k(l) \Delta^k f(l)| \leq \sum_{i=0}^{\infty} f(i) < \infty.$$

It follows that  $\sum_{i=0}^{\infty} \Delta^k f(i) F_g^k(i) = - \sum_{i=0}^{\infty} \Delta^{k-1} f(i) F_g^{k-1}(i)$  and the lemma is proved.

**Proof of Lemma 40** We note  $\hat{s}$  and  $\tilde{s}$  the maxima of the supports of  $\hat{p}$  and  $\tilde{p}$  respectively. We note  $s_{\max} = \max(\hat{s}, \tilde{s})$ . We use Property 28 with  $f = \hat{p}$  and we obtain that for all  $l \geq s_{\max} + 1$ :

$$\begin{aligned}
F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) &= \sum_{j=1}^k \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(s_{\max}) (F_{\hat{p}}^j(s_{\max}) - F_{\tilde{p}}^j(s_{\max})) \\
&= \sum_{j=2}^k \bar{Q}_{l-1}^{k-j+1}(s_{\max}) (F_{\hat{p}}^j(s_{\max}) - F_{\tilde{p}}^j(s_{\max})).
\end{aligned}$$

The last equality comes from  $F_{\hat{p}}^1(s_{\max}) = F_{\tilde{p}}^1(s_{\max}) = 1$  because  $\hat{p}$  and  $\tilde{p}$  are probabilities and  $s_{\max}$  is greater than  $\hat{p}$  and  $\tilde{p}$ . Because the quantities  $\bar{Q}_{l-1}^j(s_{\max})$  are polynomial functions with degree  $j - 1$  in the variable  $l - s_{\max}$  we write  $F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l)$  in the following form:

$$F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) = \frac{(F_{\hat{p}}^2(s_{\max}) - F_{\tilde{p}}^2(s_{\max}))}{(k-2)!} (l-s)^{k-2} + o(l^{k-2}).$$

Thanks to Equation (29),  $m_l^k$  is a polynomial function with degree  $k$  and we have the limit:

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l)}{m_l^k} = 0.$$

Moreover for all  $l \in \mathbb{N}$  the characterization of  $\hat{p}$  gives us:

$$\frac{F_{\hat{p}}^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l)}{m_l^k} \geq \beta(\hat{p}).$$

Necessarily  $\beta(\hat{p}) \leq 0$ .

**Proof of Lemma 41** We show this result by induction. For  $k = 2$  the result is shown in Durot et al. (2013). Assume that the result is true for some  $k - 1 \geq 2$ . We have the following equalities:

$$\begin{aligned} F_f^k(l) - F_{\tilde{p}}^k(l) &= \sum_{h=0}^l \left( F_f^{k-1}(h) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(h) \right) \\ &= \sum_{h=0}^s \left( F_f^{k-1}(h) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(h) \right) + \sum_{h=s+1}^l \left( F_f^{k-1}(h) - F_{\tilde{p}}^{k-1}(h) \right) \\ &= \left( F_f^k(s) - F_{\tilde{p}}^k(s) \right) + \sum_{h=s+1}^l \left( \frac{(h-s)^{k-2}}{(k-2)!} (F_f^1(s) - F_{\tilde{p}}^1(s)) + o(h^{k-2}) \right) \\ &= \frac{(l-s)^{k-1}}{(k-1)!} (F_f^1(s) - F_{\tilde{p}}^1(s)) + o(l^{k-1}). \end{aligned}$$

The last equality is due to a result of Bernoulli for Faulhaber's sum : the  $k$ -th sum of Faulhaber is denoted by  $S_k$  and defined as follows :

$$S_k(m) = \sum_{i=1}^m i^k.$$

It is shown that:

$$S_k(m) = \frac{1}{k+1} \sum_{j=0}^k C_{k+1}^j B_j m^{k+1-j} = \frac{1}{k+1} \left( m^{k+1} + \frac{k+1}{2} m^k + \dots \right)$$

where the  $B_j$  are Bernoulli's numbers (with the convention  $B_1 = \frac{1}{2}$ ). A proof of this result can be found in Conway and Guy (1996).

## Preuve de la Propriété 32 : $k$ -monotonie des lois de Poisson

We prove that Poisson distribution  $\mathcal{P}(\lambda)$  is  $\ell$ -monotone if and only if  $\lambda \leq \lambda_\ell$ . The distribution  $q = \mathcal{P}(\lambda)$  is  $\ell$ -monotone if and only if for all  $i \in \mathbb{N}$  :  $(-1)^\ell \Delta^\ell q(i) \geq 0$ . We have for all  $l \in \mathbb{N}$  the following equalities:

$$(-1)^\ell \Delta^\ell q(i) = \sum_{h=0}^{\ell} (-1)^h \binom{\ell}{h} \frac{\lambda^{h+i} e^{-\lambda}}{(h+i)!} = \frac{\lambda^i e^{-\lambda}}{(h+\ell)!} R_\ell(\lambda, i)$$

where  $R_\ell$  is the polynomial function defined as follows:

$$R_\ell(\lambda, i) = \sum_{h=0}^{\ell} (-1)^h \binom{\ell}{h} \lambda^h (h+\ell) \dots (h+i+1).$$

Therefore a necessary condition for  $\mathcal{P}(\lambda)$  to be  $\ell$ -monotone is " $R_\ell(\lambda, 0)$  is nonnegative" which is equivalent to " $P_\ell(\lambda)$  is nonnegative" where  $P_\ell(\lambda)$  is defined as follows:

$$P_\ell(\lambda) = \sum_{h=0}^{\ell} (-1)^h \frac{(\ell!)^2}{h!((\ell-h)!)^2} \lambda^h.$$

Conversely, because  $i \leftrightarrow R_\ell(\lambda, i)$  is an increasing function for  $\lambda \in [0, 1]$ , the condition is sufficient.

When  $\lambda$  tends to infinity,  $P_\ell(\lambda, 0)$  tends to  $+\infty$  then  $P_\ell(\lambda)$  is nonnegative until the smallest root of  $P_\ell$  which is nonnegative. In other terms the previous condition is true in particular for  $\lambda \leq \lambda_\ell$ .

## Conclusion de la Partie I

Dans cette partie deux estimateurs des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie ont été proposés pour estimer une densité discrète,  $k$  désignant un entier supérieur à 2 fixé. Les espaces de séquences  $k$ -monotones étant emboîtés, l'idée était de gagner en vitesse d'estimation en se plaçant dans des modèles plus réduits lorsque la vraie distribution  $p^*$  est effectivement  $k$ -monotone pour un  $k$  strictement supérieur à 2 plutôt que d'utiliser l'estimateur sous contrainte de convexité défini par Durot et al. (2013).

Le premier estimateur est défini comme la projection de l'estimateur empirique sur l'espace des fonctions  $k$ -monotones, il n'est pas une probabilité en général. Le second estimateur est alors défini comme le projeté sur l'espace des probabilités  $k$ -monotones pour corriger ce défaut. Leurs propriétés structurelles ont été étudiées, en particulier ces deux estimateurs sont de support fini. La qualité statistique des estimateurs, mesurée en terme d'erreur quadratique, a également été montrée dans le cas d'un modèle bien spécifié et mal spécifié. Enfin ces estimateurs ont été implémentés. L'algorithme proposé repose sur une méthode développée par Groeneboom et al. (2008), l'Algorithme de Réduction de Support, et une caractérisation des estimateurs faisant intervenir leurs primitives  $k$ -ièmes. Cet algorithme renvoie l'estimateur exact en un nombre très réduit de calculs en pratique. Enfin une étude par simulation a conforté la qualité d'estimation vis-à-vis de l'estimateur empirique ainsi que l'intérêt existant à se placer sous le modèle de  $\ell$ -monotonie avec  $\ell$  le réel degré de monotonie de  $p^*$ .

Bien que la construction de ces estimateurs a été largement inspirée par le travail de Balabdaoui (2004), ces résultats ne se déduisent pas du cas continu. En effet, pour  $k \geq 3$ , contrairement au cas convexe, il n'est pas simple de construire une densité  $k$ -monotone qui passerait par les points d'une suite  $k$ -monotone, ni même qui approcherait cette suite  $k$ -monotone. En revanche lorsque  $k = 2$ , le fait de relier les points d'une suite convexe pour obtenir une fonction affine par morceaux suffit à définir une fonction convexe de la variable réelle. En effet la convexité ne nécessite aucune propriété de différentiabilité ou de continuité. On retrouvera cette distinction entre les cas  $k = 2$  et  $k > 2$  dans la partie II, elle sera à l'origine de résultats d'entropie à crochet d'ordres de grandeur différents pour le cas discret et le cas continu. Enfin la différence la plus notable entre le cas continu et le cas convexe concerne la vitesse de convergence des estimateurs. Cette différence est classique dans le domaine de la contrainte de forme, elle a déjà été signalée dans les cas monotones, convexes et log-concave. Si la vitesse de convergence est mesurée en terme d'erreur quadratique, alors les estimateurs sont  $\sqrt{n}$ -consistants, tandis que l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie converge à la vitesse  $n^{-k/2k+1}$  dans le cas réel.





## Part II

# Bornes de risque

### **Avant-propos**

Cette partie présente le calcul de bornes oracles adaptatives pour l'estimateur des moindres carrés décrit dans la partie I. Les outils utilisés sont essentiellement de deux types : d'une part une reformulation du problème sous la forme variationnelle proposée par Chatterjee (2014), d'autre part des inégalités de concentration de type chaînage nécessitant le calcul d'entropies à crochet pour les espaces de fonctions  $k$ -monotones discrètes. Cette partie est organisée en deux chapitres. Le chapitre 7 présente le résultat principal et sa preuve. Le second chapitre regroupe quelques résultats annexes montrés autour de ce travail, concernant des inégalités entropiques.

# Chapter 7

## Une borne oracle adaptative

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>116</b>
7.1.1	Rappel de la Partie I	116
7.1.2	Le contexte	117
7.1.3	La démarche	119
<b>7.2</b>	<b>Résultat principal</b>	<b>122</b>
<b>7.3</b>	<b>Fil de la preuve</b>	<b>124</b>
7.3.1	Formulation variationnelle du problème	124
7.3.2	Découpage en espaces sans nœud	126
7.3.3	Majoration du supremum de processus empiriques	128
7.3.4	Calculs d'entropies à crochet	128
<b>7.4</b>	<b>Discussion</b>	<b>129</b>
7.4.1	Le cas $k = 1$ : vers un résultat optimal ?	130
7.4.2	Le calcul d'entropie dans le cas $k \geq 2$	130
	Des raisons de penser qu'il est possible d'améliorer ce résultat	130
	Conjecture et résultat associé	131
	A propos du lien entre le cas continu et le cas discret	133
	A propos de la stratégie de récurrence	135
7.4.3	A propos des méthodes de Bellec	136
<b>7.5</b>	<b>Preuves</b>	<b>137</b>
7.5.1	Preuve du résultat principal	137
7.5.2	Calculs d'entropies à crochet	143
	Un premier résultat d'entropie	143
	Preuve du Lemme 54 : récurrence dans le calcul d'entropie	147
	Preuve du Lemme 47 : Entropies sur une boule	148
7.5.3	Preuve de la Section 7.3.3 : vérification des hypothèses du théorème de grandes déviations	152
7.5.4	Preuve du Théorème 45 : formulation variationnelle du problème	153
7.5.5	Preuve du Lemme 50	154
7.5.6	Preuve du Théorème 51	155

---

## Introduction

### Rappel de la Partie I

Pour faciliter la lecture de ce chapitre, un bref rappel sur l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie développée en Partie I est donné ci-dessous.

Une fonction discrète  $p$  est dite  $k$ -monotone,  $k$  étant un entier supérieur à 1 fixé, si son  $k$ -ième Laplacien  $(-1)^k \Delta^k p(i)$  est positif pour tout  $i \in \mathbb{N}$  où les opérateurs laplaciens sont définis par la relation de récurrence suivante :

$$\begin{aligned}\Delta^1 p(i) &= p(i+1) - p(i) \\ \Delta^k p(i) &= \Delta^{k-1} p(i+1) - \Delta^{k-1} p(i).\end{aligned}$$

Une fonction  $g$  mesurable par rapport à la mesure de Lebesgues sur  $\mathbb{R}_+$  est dite 1-monotone si elle est positive et décroissante, 2-monotone si elle est positive, décroissante et convexe et  $k$ -monotone,  $k \geq 3$ , si elle est de classe  $C^{k-2}$  et que pour tout  $j \in 1, \dots, k-2$ ,  $(-1)^j g^{(j)}$  est positive, décroissante et convexe.

La  $k$ -monotonie est donc une généralisation de la décroissance ( $k = 1$ ) et de la convexité ( $k = 2$ ). L'entier  $k$  mesure le degré de creux de la fonction discrète  $p$  : plus  $k$  est élevé et plus la fonction est creuse. Les principales propriétés et définitions intéressantes pour cette partie sont rappelées ci-dessous :

- Les fonctions discrètes  $k$ -monotones sont  $j$ -monotones pour tout  $j \leq k-1$ .
- $\mathcal{P}^k$  est l'ensemble des probabilités discrètes  $k$ -monotones,  $\mathcal{P}_0^k$  celui des probabilités discrètes  $k$ -monotones à support fini et  $\mathcal{S}^k$  est le cône des fonctions discrètes  $k$ -monotones et positives.
- Soit  $p$  une fonction discrète  $k$ -monotone. Les entiers  $i$  tels que  $(-1)^k \Delta^k p(i) > 0$  sont appelés les  $k$ -noeuds de  $p$ .
- Le nombre de  $k$ -noeuds de  $p$  est noté  $r(p)$ .
- Pour tout entier  $k$ , soit la base de splines  $(Q_j^k)_{j \in \mathbb{N}}$  définie par :

$$\forall i \in \mathbb{N}, Q_j^k(i) = \binom{j-i+k-1}{k-1} \mathbb{I}_{\{j \geq i\}} = \frac{(j-i+k-1) \dots (j-i+1)}{(k-1)!} \mathbb{I}_{\{j \geq i\}}. \quad (7.1)$$

Alors la fonction discrète  $p$  est  $k$ -monotone si et seulement si il existe une mesure positive  $\pi$  sur  $\mathbb{N}$  telle que pour tout  $i \in \mathbb{N}$ ,  $p(i)$  satisfait :

$$p(i) = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k(i) = \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i). \quad (7.2)$$

De plus l'ensemble des  $k$ -noeuds de  $p$  est exactement le support de  $\pi$ .

Soit un entier  $k \geq 1$  fixé. Nous estimons une densité discrète  $p^*$  sur la base de  $n$  observations i.i.d.  $X_1 \dots X_n$ . Le projeté orthogonal de  $p^*$  sur l'espace  $\mathcal{P}^k$  des probabilités  $k$ -monotones est noté  $p^{*k}$ . L'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie, noté  $\hat{p}^k$ , est défini ainsi :

$$\hat{p}^k = \operatorname{argmin} \left\{ \|f - \tilde{p}\|_2^2, f \in \mathcal{P}^k \right\} \quad (7.3)$$

où  $\tilde{p}$  est l'estimateur empirique de  $p^*$ . L'existence et l'unicité de cet estimateur ont été montrées en Partie I. Sa qualité d'estimation est mesurée en terme d'erreur quadratique.

En particulier cet estimateur se concentre à la classique vitesse paramétrique  $1/\sqrt{n}$  grâce au résultat suivant :

$$\|\widehat{p}^k - p^{*k}\|_2^2 \leq \|\tilde{p} - p^{*k}\|_2^2.$$

L'objectif de cette Partie est d'établir des bornes de risques non-asymptotiques pour la concentration de cet estimateur. Ces dernières sont adaptatives en un sens précisé à la Section 7.1.2. Le lecteur pourra se référer au Chapitre 3 pour un rappel à propos des bornes oracle, de l'entropie, des résultats de chaînage et pour plus de précisions sur la formulation variationnelle proposée par Chatterjee (2014). La définition de toutes les normes évoquées dans ce chapitre est rappelée à la Section 3.1.

## Le contexte

La qualité d'un estimateur est ici mesurée en terme d'erreur quadratique. L'optimalité est évaluée au moyen de bornes oracles ou de type oracle. Guntuboyina et Sen (2015) soulignent dans leur papier la difficulté, dans le cadre de l'estimation sous contrainte de forme, à calculer des bornes oracles *globales*, c'est-à-dire dont la vitesse est établie uniformément pour toute densité  $p^*$ . En effet, d'une part les estimateurs sont souvent non-explicitables, et d'autre part les espaces à considérer ne sont pas compacts en général. Ce dernier point empêche le calcul des outils nécessaires à l'établissement de bornes de risque, généralement des entropies métriques ou à crochet. De plus, elles sont pessimistes car elles contrôlent le pire des cas et le risque peut être bien plus faible pour certains  $p^*$ .

Une alternative est de calculer des bornes *locales*, c'est-à-dire des bornes dont la vitesse dépend de la position de la vraie distribution  $p^*$  par rapport à un bord de l'espace considéré,  $\mathcal{P}^k$  dans notre problème. Ces bornes sont parfois plus simples à calculer, elles ont en outre l'avantage de mettre en lumière une propriété fréquente des estimateurs sous contrainte de forme à savoir leur *adaptativité*.

L'objet principal de cette partie est de montrer une borne oracle adaptative pour l'estimateur  $\widehat{p}^k$ . Cette borne, dont l'énoncé exact peut-être retrouvé au Théorème 43, est de la forme suivante :

$$\|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} \left( \|p^* - q\|_2 + \frac{K(q, p^*)}{\sqrt{n}} \right). \quad (7.4)$$

Elle est vérifiée avec grande probabilité, l'ensemble  $\mathcal{P}_0^k$  désigne les densités  $k$ -monotones à support fini et  $K$  une quantité qui dépend du nombre  $r(q)$  de  $k$ -nœuds de la densité discrète  $q$  ainsi que du cardinal de son support. Cette borne est adaptative, au sens où elle s'adapte à la distance de la vraie distribution  $p^*$  par rapport à un bord de l'espace  $\mathcal{P}_0^k$ . En particulier la vitesse de concentration sera plus rapide si  $p^*$  peut être approché par une densité  $k$ -monotone  $q$  possédant peu de nœuds et dont la longueur du support est faible. En d'autres termes, au voisinage d'un bord de  $\mathcal{P}^k$  de dimension  $r(q)$ , l'estimateur  $\widehat{p}^k$  se comporte de la même manière que l'estimateur des moindres carrés sur ce bord.

Cette propriété d'adaptativité est un phénomène classique en estimation sous contrainte de forme. En particulier, dans le cadre de la régression gaussienne, de très récents papiers ont proposé deux méthodes alternatives de calcul de bornes oracles pour des estimateurs des moindres carrés, sous diverses contraintes de forme dont la  $k$ -monotonie pour  $k = 1, 2$ . Une première démarche proposée par Bellec (2016) et Chatterjee et al. (2015) utilise la structure polyédrale du cône associé au problème pour trouver des bornes oracles sharp et adaptatives. Les bornes oracles de Bellec, notamment, sont adaptatives au sens où elles dépendent du nombre de morceaux (respectivement de changements de pente) nécessaires

pour approcher le vrai vecteur  $\mu$  par des vecteurs constants par morceaux (respectivement affines par morceaux) dans le cas de la régression monotone (respectivement convexe). L'énoncé exact est le suivant (dans le cas monotone) :

**Théorème 42** (Bellec, 2015, le cas monotone). *Soit  $\mu \in \mathbb{R}^n$ , soit  $n \in \mathbb{N}^*$  et soit  $\xi$  un vecteur gaussien de  $\mathbb{R}^n$  :  $\xi \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_{n \times n})$ . On suppose que l'on observe  $n$  variables aléatoires i.i.d.  $Y_1 \dots Y_n$  définies de la façon suivante :*

$$Y_i = \mu_i + \xi_i, \quad i = 1 \dots n.$$

*Soit  $K$  le cône des vecteurs monotones de  $\mathbb{R}^n$ , soit  $\hat{\mu}$  l'estimateur des moindres carrés de  $\mu$  sous contrainte de monotonie :*

$$\hat{\mu} = \underset{u \in K}{\operatorname{argmin}} \|Y - u\|_2.$$

*Pour tout vecteur  $u$  monotone on note  $\kappa(u)$  le nombre de valeurs différentes de  $u$ . Alors la borne de risque suivante est vérifiée :*

$$\mathbb{E}_\mu \|\hat{\mu} - \mu\|^2 \leq \min_{u \in K} \left( \|u - \mu\|^2 + \frac{\sigma^2 \kappa(u)}{n} \log \left( \frac{en}{\kappa(u)} \right) \right).$$

Cette borne adaptative s'interprète de la façon suivante : s'il existe un vecteur  $u$  suffisamment proche du vrai vecteur  $\mu$ , alors la vitesse de concentration de  $\hat{\mu}$  dépend du nombre de morceaux du vecteur  $u$ , bien que ce dernier soit inconnu au moment de la définition de  $\hat{\mu}$ . En particulier si  $\mu$  est lui-même un vecteur monotone, la vitesse de convergence de  $\hat{\mu}$  est directement liée à son nombre de morceaux. Dans le cas général la vitesse est liée au meilleur compromis entre le biais et le nombre de morceaux.

L'objectif de ce chapitre est d'établir une borne semblable pour des modèles d'estimation de densités discrètes sous contrainte de  $k$ -monotonie, avec  $k$  quelconque. Bien que les résultats obtenus soient de même nature que ceux de Bellec, la démarche adoptée par Bellec n'est pas applicable dans le cas de l'estimation de densité car elle utilise à la fois la structure polyédrale de l'ensemble des vecteurs monotones (ou convexes) qui n'existe pas dans le cas de la densité, et les propriétés du vecteur gaussien associé à son problème de régression. Ce point sera rediscuté dans la Section 7.4.

Parallèlement aux papiers de Bellec (2016) et Chatterjee et al. (2015) une seconde démarche a été développée récemment, utilisant une formulation variationnelle du problème énoncée initialement par Chatterjee (2014). Flammarion et al. (2016) ont notamment adopté cette approche dans le contexte de sériation de matrices tandis que Chatterjee et Lafferty (2015) l'ont utilisée pour obtenir des bornes de risque pour un estimateur des moindres carrés dans un modèle de régression unimodale. Cette démarche est également celle adoptée dans ce chapitre, elle est développée à la Section 7.1.3.

Peu de résultats de borne de risque ont été prouvés concernant des estimateurs de densité sous contrainte de forme. Kim et al. (2016) ont montré récemment un résultat adaptatif pour un estimateur du maximum de vraisemblance sous contrainte de log-concavité pour des densités continues. La vitesse de convergence de cet estimateur dépend du nombre de morceaux affines nécessaires pour approcher suffisamment le logarithme de la vraie densité  $p^*$ . Leur résultat été obtenu à l'aide d'une formulation variationnelle du problème et de calculs d'entropies similaires à ceux développés dans ce chapitre.

Aucune borne oracle n'a été proposée pour des estimateurs sous contrainte de  $k$ -monotonie, cependant Gao et Wellner (2009) ont utilisé des outils proches de ceux développés ici (en particulier le calcul d'entropies et d'entropies à crochet) pour établir une vitesse de convergence pour un estimateur du maximum de vraisemblance sous contrainte de  $k$ -monotonie d'une densité continue sur un intervalle, pour tout  $k \geq 1$ . Ils montrent que la vitesse de convergence (au sens de la distance de Hellinger) est de nature non-paramétrique, en  $n^{-k/(2k+1)}$ .

A notre connaissance aucune borne oracle n'a été établie à ce jour pour des densités discrètes sous contrainte de forme.

## La démarche

La preuve de l'inégalité oracle (7.4) est basée sur une formulation variationnelle pour la majoration de l'erreur quadratique de l'estimateur des moindres carrés. Cette formulation, due à Chatterjee (2014), exprime l'erreur quadratique d'un estimateur des moindres carrés  $\hat{\theta}$  sur un espace convexe  $\Theta$  comme la recherche du lieu du maximum d'une fonction strictement concave. Plus précisément il montre l'inégalité suivante dans un cadre de régression classique  $y = \theta^* + \xi$ , avec  $y = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$  le vecteur des observations,  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  un vecteur i.i.d. de bruit et  $\theta^* \in \Theta \subset \mathbb{R}^n$  un vecteur inconnu :

$$\|\hat{\theta} - \theta^*\|_2 \leq \operatorname{argmax}_{t \geq 0} \left( \sup_{\theta \in \Theta, \|\theta - \theta^*\|_2 \leq t} \langle \theta - \theta^*, \xi \rangle - \frac{t^2}{2} \right). \quad (7.5)$$

Une formulation variationnelle analogue est énoncée pour l'estimation de densité (Théorème 45). La borne oracle recherchée se ramène alors au contrôle du supremum de processus empiriques défini de la façon suivante :

$$M_{p^*}(t, q) = \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p - q\|_2 \leq t} \langle \tilde{p} - p^*, p - q \rangle \quad (7.6)$$

où  $t$  est un réel positif et  $q$  une probabilité  $k$ -monotone discrète à support fini. Une heuristique développée à la Section 7.3.1 fait ensuite le lien entre l'inégalité oracle (7.4) et le supremum de processus empirique  $M_{p^*}(t, q)$ .

Le contrôle du supremum du processus  $M_{p^*}(t, q)$  est effectué en découpant le support de  $q$  en sous-espaces sur lesquels  $q$  ne possède pas de  $k$ -noeuds. Ce découpage astucieux a été proposé initialement par Chatterjee et Lafferty (2015) dans le cadre de la régression unimodale. Il permet de se restreindre à des sous-espaces sur lesquels le contrôle des processus est plus facile.

Des inégalités de grandes déviations usuelles établies par Massart (2007) permettent de contrôler le supremum grâce au calcul des outils topologiques que sont l'entropie métrique et l'entropie à crochet (voir Section 3.2). Une partie de la démarche a donc consisté à calculer des entropies à crochet relatives aux sous-espaces que nous considérons, généralisant ainsi le travail effectué par Gao (2008) et Gao et Wellner (2009) dans le cas des fonctions  $k$ -monotones continues sur un intervalle.

Toute la démarche de ce chapitre a été effectuée dans le cadre de l'estimation d'une densité discrète. Un cadre proche, celui de la régression gaussienne, sera discuté à la Section 7.4.



**Organisation des résultats du Chapitre 7** : Ce chapitre a pour objet principal la borne de type oracle adaptative énoncée au Théorème 43. La figure 7.1 résume les résultats intermédiaires à ce théorème. Les références bibliographiques associées à cette figure sont les suivantes :

- **Chatterjee** correspond à la formulation variationnelle d'un problème de risque quadratique énoncée au Théorème 1 (ou Théorème 1 de Chatterjee (2014)).
- **Chatterjee et Lafferty** correspond au Lemme 5.1 de l'article de Chatterjee et Lafferty (2015) dans lequel est effectué un découpage de l'espace en sous-espaces sur lesquels la probabilité monotone considérée est constante.
- **Gao et Wellner** correspond au résultat d'entropie énoncé au Théorème 49 dont la preuve figure dans l'article de Gao et Wellner (2009).
- **Flammarion et al.** correspond à divers résultats d'entropies énoncés à l'Annexe B de l'article de Flammarion et al. (2016) dans le cadre des problèmes de sériation de matrice.
- **Massart** correspond à l'inégalité de chaînage du Théorème 46 que l'on retrouve à la Section 3.3.3 ou dans le livre de Massart (2007)
- **Van de Geer** correspond au résultat d'entropie sur les fonctions continues décroissantes à support quelconque montré dans le papier de Van de Geer (1993) et énoncé au Lemme 53.

Ci-dessous un sommaire des différents résultats bleus :

- Le résultat principal (**Résultat 6**) est la borne oracle adaptative pour  $\widehat{p}^k$  qui est énoncée au Théorème 43, **Section 7.2**.
- Dans la **Section 7.3.1** une adaptation de la formulation variationnelle proposée par Chatterjee (2014) est énoncée (**Résultat 5**). L'heuristique de départ de la preuve du théorème principal est également donnée.
- Dans la **Section 7.3.2** le problème du contrôle du processus  $M_{p^*}(t, q)$  est découpé en sous-problèmes sur des sous-espaces sur lesquels  $q$  ne possède pas de  $k$ -nœuds. C'est le **résultat 2**.
- Le contrôle des différents suprema de processus empiriques est énoncé à la **Section 7.3.3** (**résultat 4**).
- Enfin dans la **Section 7.3.4** les majorations d'entropies à crochet relatives aux sous-espaces de fonctions  $k$ -monotones sont énoncées. C'est le **résultat 3** de la figure, il nécessite un premier résultat d'entropie (**résultat 2**), énoncé dans les preuves au Lemme 54.

La **Section 7.5** comprend toutes les preuves de ce chapitre. Enfin la **Section 7.4** est une discussion autour de l'optimalité des résultats obtenus et des pistes pour poursuivre ce travail.

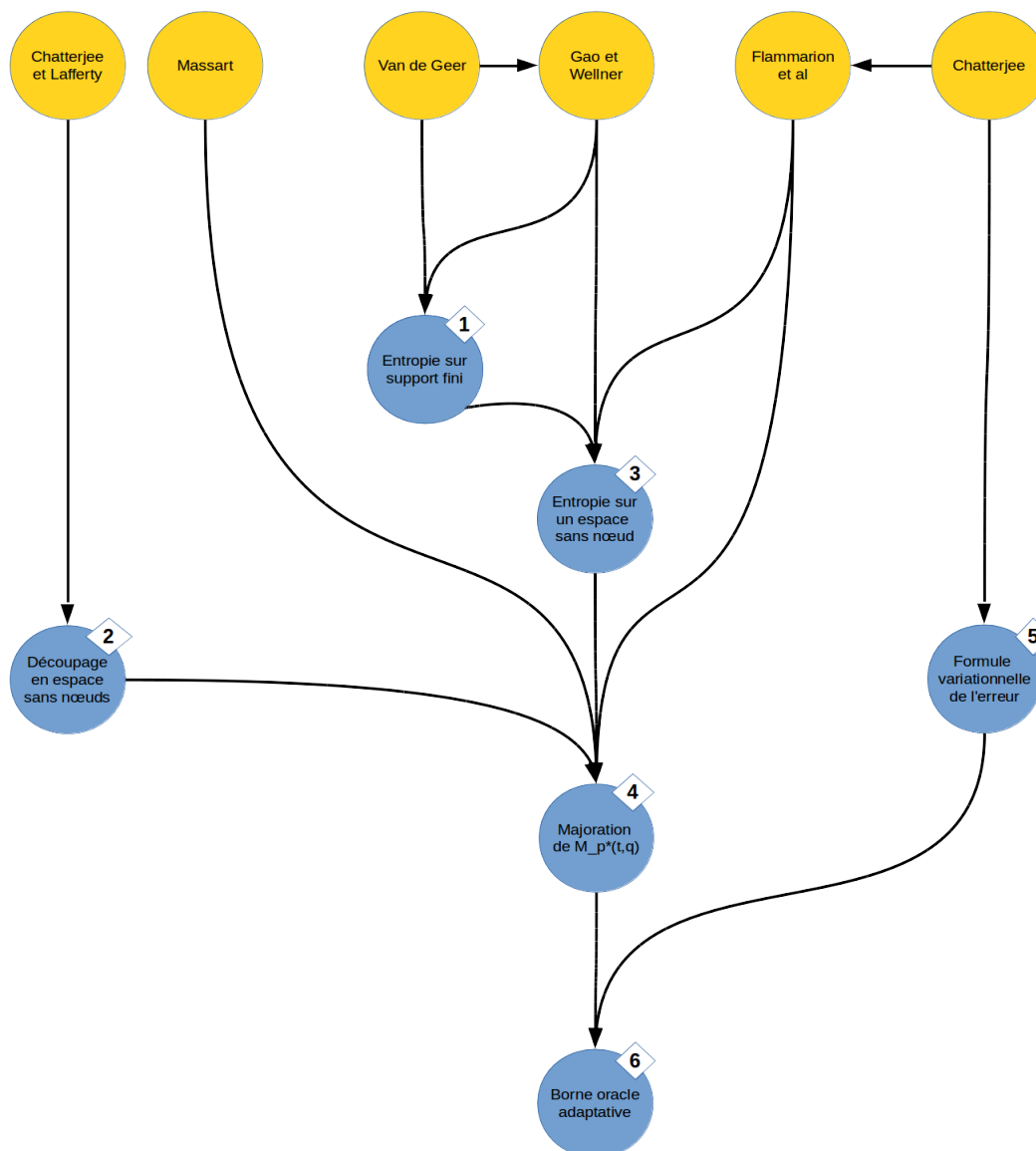


Figure 7.1: Plan de la partie. En jaune les résultats de la littérature, en bleu les résultats intermédiaires du chapitre.

## Résultat principal

L'objet de ce chapitre est la preuve d'une inégalité oracle adaptative pour l'estimateur des moindres carrés sur l'espace des probabilités discrètes  $k$ -monotones  $\mathcal{P}^k$  défini à l'équation (5.1). Cette inégalité est énoncée au Théorème 43.

On note  $\mathcal{P}_0^k$  l'ensemble des probabilités  $k$ -monotones discrètes à support fini. Pour tout  $q \in \mathcal{P}_0^k$  on rappelle que  $r(q)$  est le nombre de  $k$ -noeuds de  $q$ , et on note  $I_1 \dots I_{r(q)}$  les intervalles (disjoints) sur lesquels  $q$  ne possède pas de  $k$ -noeud hormis au point extrême à droite. En d'autres termes il existe  $i_1 \leq \dots \leq i_{r(q)}$  des entiers tels que pour tout  $i$ ,  $q$  s'écrive sous la forme  $q(i) = \sum_{j=1}^{r(q)} \pi_{i_j} Q_{i_j}^k(i)$  avec  $\pi$  une probabilité discrète et les splines  $Q_j^k$  définies à l'équation (4.5). On note également  $I_{r(q)+1} = i_{r(q)+1}, +\infty$  et  $L_j$  le cardinal de l'intervalle  $I_j$ . Pour tout intervalle  $I$ , pour toute densité  $p$ , on rappelle que  $p_I$  est la densité discrète tronquée en  $I$ .

Pour toute probabilité  $q \in \mathcal{P}_0^k$  avec les notations précédentes on définit :

$$K_1(q, p^*) = \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k} \|p_{I_j}^*\|_\infty \right)^{1/2} \quad (7.7)$$

$$K_2(q, p^*) = \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{2k-2}{k}} \log(eL_j)^{2/k} \right)^{1/2} \quad (7.8)$$

$$f(x, n, r, p^*) = \left( \frac{7 \left( \sum_{j=1}^r \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty} \right) \sqrt{2(x + \log(r+1))}}{\sqrt{n}} + \frac{2(x + \log(r+1))}{n} \right), \quad (7.9)$$

ainsi que :

$$K(q, p^*, n) = \frac{K_1(q, p^*)}{\sqrt{n}} + \frac{K_2(q, p^*)}{n}. \quad (7.10)$$

Pour finir si  $p^*$  est de support fini et  $L^*$  désigne le maximum de son support, on définit :

$$R(q, p^*, n) = \left( \frac{\log(e(L^* - i_r)) \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{\log(e(L^* - i_r))}{n} \right) \mathbb{I}_{\text{supp}(q) \leq \text{supp}(p^*)}. \quad (7.11)$$

Le résultat central du chapitre est le théorème suivant :

**Théorème 43.** *Soit  $p^*$  une probabilité discrète et soit  $L^*$  le maximum de son support, éventuellement infini. Soit  $k \geq 1$  un entier fixé. Alors les bornes oracles suivantes sont vérifiées :*

### 1. Inégalités moyennes :

(a) *Cas général* :

$$\mathbb{E} \left[ \|\hat{p}^k - p^*\|_2 \right] \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} \left( \|p^* - q\|_2 + K(q, p^*, n) + \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r(q)+1}^{\infty} p_i^* (1 - p_i^*) \right)^{1/2} \right)$$

(b) *Lorsque  $p^*$  est de support fini* :

$$\mathbb{E} \left[ \|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \right] \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} (\|p^* - q\|_2 + K(q, p^*, n) + R(q, p^*, n))$$

2. *Inégalités de déviation* : de même, pour tout  $x > 0$ , avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$  :

(a) *Cas général* :

$$\begin{aligned} \|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \leq & C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} \left( \|p^* - q\|_2 + K(q, p^*, n) + 2\sqrt{r(q)}f(x, n, r(q), p^*) \right) \\ & + \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r(q)+1}^{\infty} p_i^*(1 - p_i^*) \right)^{1/2} \end{aligned}$$

(b) *Lorsque  $p^*$  est de support fini* :

$$\|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} \left( \|p^* - q\|_2 + K(q, p^*, n) + 2\sqrt{r(q)}f(x, n, r(q), p^*) + R(q, p^*, n) \right)$$

où  $C$  est une constante strictement supérieure à 1 qui ne dépend que de  $k$ .

La preuve de ce théorème se trouve à la Section 7.5.1. Elle passe par le contrôle du supremum de processus empiriques  $M_{p^*}(t, q)$ , défini à l'équation (7.6), pour toute probabilité  $k$ -monotone  $q$  à support fini. L'heuristique de cette preuve est expliquée à la Section 7.3.1.

Dans le cas particulier où  $k = 1$ , le terme  $K(q, p^*, n)$  se majore en remarquant que :

$$\begin{aligned} K_1(q, p^*) &= \left( \sum_{j=1}^{r(q)} \log(eL_j) \|p_{I_j}^*\|_{\infty} \right)^{1/2} \leq \sqrt{r(q) \log(eL(q)) \|p_{I_j}^*\|_{\infty}} \\ K_2(q, p^*) &= \left( \sum_{j=1}^{r(q)} \log(eL_j)^2 \right)^{1/2} \leq L(q). \end{aligned}$$

avec  $L(q)$  la longueur du support de  $q$ . On obtient finalement une majoration de la forme (par exemple pour l'inégalité 1.(a)) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[ \|\widehat{p}^1 - p^*\|_2 \right] \leq & C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^1} \left( \|p^* - q\|_2 + \frac{\sqrt{r(q) \log(eL(q)) \|p_{I_j}^*\|_{\infty}}}{\sqrt{n}} + \frac{L(q)}{n} \right) \\ & + \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r(q)+1}^{\infty} p_i^*(1 - p_i^*) \right)^{1/2} \end{aligned}$$

Cette borne de type oracle est *adaptative* au sens où elle dépend de l'approximation de  $p^*$  par une probabilité  $q$   $k$ -monotone à support fini réalisant le meilleur compromis possible entre :

- le biais  $\|q - p^*\|_2$

- une quantité qui est d'autant plus faible que la fonction  $q$  :
  - possède peu de  $k$ -nœuds (autrement dit telle que  $r(q)$  est faible)
  - a un maximum de support  $L(q)$  réduit

Ainsi la vitesse de concentration de  $\widehat{p}^k$  sera d'autant plus rapide qu'on sera capable d'approcher *suffisamment près*  $p^*$  par une probabilité  $k$ -monotone  $q$  dont la décomposition en base de splines est de *faible complexité* (on rappelle que si  $q$  est  $k$ -monotone, sa décomposition en base de splines est de la forme  $q = \sum_{j \in \mathcal{N}(q)} \pi_j Q_j^k$  avec  $\pi$  une probabilité discrète,  $(Q_j^k)$  la base de splines rappelée en introduction et  $\mathcal{N}(q)$  l'ensemble des  $k$ -nœuds de  $q$ ). En d'autres termes la vitesse de concentration de  $\widehat{p}^k$  s'adapte à la position de  $p^*$  par rapport à l'espace  $\mathcal{P}_0^k$ .

Exprimons le phénomène autrement. Soit  $\mathcal{N}$  un sous-espace fini de  $\mathbb{N}$  et soit  $\mathcal{P}_{\mathcal{N}}^k$  l'ensemble des probabilités  $q$   $k$ -monotones dont les  $k$ -nœuds sont inclus dans  $\mathcal{N}$ , soit  $\mathcal{N}(q) = \mathcal{N}$ . Alors l'espace  $\mathcal{P}_{\mathcal{N}}^k$  peut être vu comme *un bord* de l'espace  $\mathcal{P}^k$ , de *dimension*  $\text{card}(\mathcal{N})$ . Soit alors  $\widehat{p}_{\mathcal{N}}^k$  l'estimateur des moindres carrés sur  $\mathcal{P}_{\mathcal{N}}^k$ . Le Théorème 43 exprime le fait que l'estimateur  $\widehat{p}^k$  présente la même vitesse que  $\widehat{p}_{\mathcal{N}}^k$  lorsque la vraie densité  $p^*$  se trouve au voisinage de  $\mathcal{P}_{\mathcal{N}}^k$ .

Dans le cas où  $p^*$  est elle-même une probabilité  $k$ -monotone à support fini on obtient facilement le corollaire suivant :

**Corollaire 44.** *Soit  $p^*$  une probabilité discrète  $k$ -monotone à support fini de maximum  $L^*$  possédant  $r(p^*)$   $k$ -nœuds. Avec les notations précédentes les bornes de risque suivantes sont vérifiées :*

1. Inégalité moyenne :

$$\mathbb{E} \left[ \|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \right] \leq \frac{K_1(p^*, p^*, n)}{\sqrt{n}} + \frac{L^*}{n}.$$

2. Inégalité de déviation : pour tout  $x > 0$ , avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$  :

$$\|\widehat{p}^k - p^*\|_2 \leq C \left( \frac{K_1(p^*, p^*, n)}{\sqrt{n}} + \frac{L^*}{n} + 2\sqrt{r(p^*)} f(x, n, r(p^*), p^*) \right).$$

La vitesse de concentration de  $\widehat{p}^k$  est fonction de la *complexité* de  $p^*$  en terme de décomposition dans la base de spline.

L'optimalité de ces résultats est discutée à la Section 7.4.

## Fil de la preuve

### Formulation variationnelle du problème

Le point de départ de la preuve du Théorème 43 est une extension de la formulation variationnelle de Chatterjee (2014) dans le cadre d'estimation de densité que nous énonçons

ci-dessous. Soit  $q$  une probabilité  $k$ -monotone. Soient pour tout  $t > 0$  les notations suivantes :

$$M_q(t) = M_q(t, q) = \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t} \langle \tilde{p} - q, p - q \rangle, \quad (7.12)$$

$$F(t) = F_q(t) = M_q(t) - \frac{t^2}{2}, \quad (7.13)$$

Par convention on décide que  $\sup(\emptyset) = -\infty$ .

La propriété suivante établit un lien entre le lieu du maximum de la fonction  $F_q$  et l'estimateur  $\hat{p}^k$ . La preuve de cette propriété est donnée à la Section 7.5.4.

**Lemme 45** (d'après Chatterjee, 2014). *Soit  $\mathcal{P}^k$  l'ensemble des probabilités  $k$ -monotones discrètes, soit  $q \in \mathcal{P}^k$ , soit  $\tilde{p}$  l'estimateur empirique d'une densité  $p^*$  quelconque et soit  $\hat{p}^k$  l'estimateur des moindres carrés défini en (7.3). Avec les notations précédentes, il existe une unique variable aléatoire  $t^* > 0$  (dépendante de  $q$ ) telle que :*

$$t^* = \underset{t}{\operatorname{argmax}} (F_q(t)). \quad (7.14)$$

De plus l'égalité suivante est vérifiée :

$$\|\hat{p}^k - q\|_2 = t^*. \quad (7.15)$$

**Heuristique** : Montrons le Théorème 43. D'une part on peut relier le risque quadratique lié à l'estimateur des moindres carrés et la variable aléatoire  $t^*$  de la façon suivante : soit  $q$  une probabilité  $k$ -monotone à support fini, les inégalités suivantes sont vraies :

$$\begin{aligned} \|\hat{p}^k - p^*\|_2 &\leq \|\hat{p}^k - q\|_2 + \|q - p^*\|_2 \\ &\leq \underset{t}{\operatorname{argmax}} (F_q(t)) + \|q - p^*\|_2 \\ &= t^* + \|q - p^*\|_2. \end{aligned} \quad (7.16)$$

D'autre part on a le découpage suivant :

$$\begin{aligned} F_q(t) &= \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t} \langle p - q, \tilde{p} - q \rangle - \frac{t^2}{2} \\ &\leq \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t} \langle p - q, \tilde{p} - p^* \rangle + \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t} \langle p - q, p^* - q \rangle - \frac{t^2}{2} \\ &\leq M_{p^*}(t, q) + t\|p^* - q\|_2 - \frac{t^2}{2}. \end{aligned}$$

Supposons que l'on ait montré l'un des deux contrôles suivants pour  $M_{p^*}(t, q)$  pour toute probabilité  $k$ -monotone  $q$  à support fini :

1. Contrôle moyen :

$$\mathbb{E} [M_{p^*}(t, q)] \leq \frac{Ct}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{Dt}{n} K_2(q, p^*) + tR(q, p^*, n) \quad (7.17)$$

2. Contrôle en déviation : pour tout  $x > 0$  (simultanément pour tout  $t > 0$ ) l'inégalité suivante :

$$M_{p^*}(t, q) \leq \frac{Ct}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{Dt}{n} K_2(q, p^*) + t\sqrt{r}f(x, n, r, p^*) + tR(q, p^*, n) \quad (7.18)$$

est vraie avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$ .

pour des quantités  $K_1, K_2, f$  et un terme de reste  $R$  à déterminer,  $C$  et  $D$  désignant des constantes ne dépendant que de  $k$ . On pose la notation suivante :

$$\frac{Ct}{\sqrt{n}}K_1(q, p^*) + \frac{Dt}{n}K_2(q, p^*) + t\sqrt{r}f(x, n, r, p^*) + tR(q, p^*, n) = t\mathcal{K}(q, p^*, x, n) \quad (7.19)$$

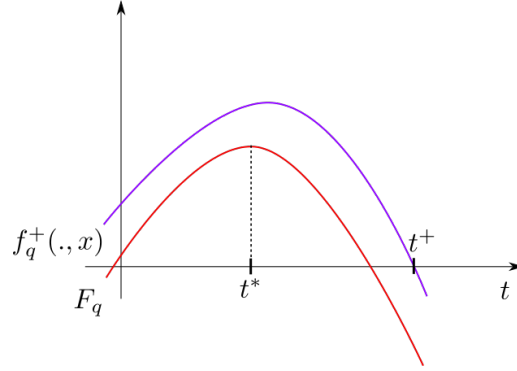
Raisonnons en terme d'inégalités de déviation, les inégalités moyennes se montrent de la même manière. L'équation (7.18) donne, avec grande probabilité, l'inégalité suivante :

$$F_q(t) \leq t\mathcal{K}(q, p^*, x, n) + t\|p^* - q\|_2 - \frac{t^2}{2}. \quad (7.20)$$

On pose alors la fonction suivante :

$$f_q^+(t, x) = t\mathcal{K}(q, p^*, x, n) + t\|p^* - q\|_2 - \frac{t^2}{2}.$$

Fixons un réel  $x > 0$ . La fonction  $t \mapsto f_q^+(t, x)$  est un trinôme, ainsi si l'on pose  $t^+$  la seconde racine de  $f_q^+$ , la quantité  $f_q^+(t, x)$  est strictement négative pour  $t > t^+$ . De plus les deux fonctions  $t \mapsto F_q(t)$  et  $t \mapsto f_q^+(t, x)$  sont strictement concaves, donc par l'équation (7.20) et la définition de  $t^*$  on a  $t^* \leq t$ . Ceci peut être illustré par le schéma ci-dessous :



Ainsi on est ramené à chercher la seconde racine de  $f_q^+$ . Celle-ci étant atteinte en :

$$t^+ = 2(\mathcal{K}(q, p^*, x, n) + \|p^* - q\|_2),$$

on obtient finalement la borne suivante par l'équation (7.16) :

$$\|\hat{p}^k - p^*\|_2 \leq t^+ + \|q - p^*\|_2 \leq 2\mathcal{K}(q, p^*, x, n) + 3\|p^* - q\|_2$$

Et ainsi l'inégalité suivante

$$\|\hat{p}^k - p^*\|_2 \leq C' \left( \frac{K_1(q, p^*)}{\sqrt{n}} + \frac{K_2(q, p^*)}{n} + \|p^* - q\|_2 \right) + 2\sqrt{r}f(x, n, r, p^*) + 2R(q, p^*, n)$$

est vraie avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$  avec  $C'$  une constante ne dépendant pas de  $q$  ni de  $p^*$  (mais dépendant de  $k$ ).

Il reste à montrer un contrôle pour  $M_{p^*}(t, q)$  de la forme des équations (7.17) et (7.18).

### Découpage en espaces sans nœud

Supposons dans cette section que  $q$  est une probabilité  $k$ -monotone fixée possédant  $k$ -noeuds. Soient  $I_1 = i_0 + 1 = 0, i_1, \dots, I_r = i_{r-1} + 1, i_r$  les intervalles (disjoints) sur lesquels  $q$  ne possède pas de  $k$ -noeud hormis éventuellement en les  $i_j$ . On note également

$$I_{r+1} = i_{r(q)} + 1, +\infty.$$

Dans cette section nous montrons qu'un contrôle pour  $M_{p^*}(t, q)$  de la forme de l'équation (7.17) ou (7.18) peut être découpé en plusieurs contrôles de supremum de processus empiriques sur les sous-espaces  $I_j$ . L'avantage de diviser ainsi le problème en sous-problèmes est de se restreindre à des sous-espaces sur lesquels les majorations seront plus faciles, car entropies à crochet seront majorées plus finement.

On rappelle que l'objectif est de contrôler le supremum de processus empiriques :

$$M_{p^*}(t, q) = \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|(p-q)\|_2 \leq t} \langle \tilde{p} - p^*, p - q \rangle.$$

On rappelle que  $\mathcal{S}^k$  est le cône convexe des fonctions discrètes  $k$ -monotones et positives. Comme  $\mathcal{P}^k \subset \mathcal{S}^k$ , l'inégalité suivante est vraie :

$$M_{p^*}(t, q) \leq \sup_{\alpha \in \mathbb{R}_+^{r+1}, \|\alpha\|_2 \leq t} \left( \sum_{j=1}^{r+1} \left( \sup_{p \in \mathcal{S}^k, \|(p-q)_{I_j}\|_2 \leq \alpha_j} \langle \tilde{p} - p^*, (p-q)_{I_j} \rangle \right) \right).$$

Or  $\mathcal{S}^k$  est un cône convexe et ainsi :

$$M_{p^*}(t, q) \leq \sup_{\alpha \in \mathbb{R}_+^{r+1}, \|\alpha\|_2 \leq t} \left( \sum_{j=1}^{r+1} \left( \alpha_j \sup_{p \in \mathcal{S}^k, \|(p-q)_{I_j}\|_2 \leq 1} \langle \tilde{p} - p^*, (p-q)_{I_j} \rangle \right) \right)$$

On note alors, pour  $j \in \{1, r+1\}$  :

$$\mathcal{F}_{I_j}^k(t, q) = \{f = (p-q)_{I_j}, p \in \mathcal{S}^k, \|(p-q)_{I_j}\|_2 \leq t\}. \quad (7.21)$$

et

$$\delta_j(t, q, p^*) = \sup_{p \in \mathcal{S}^k, \|(p-q)_{I_j}\|_2 \leq t} \langle \tilde{p} - p^*, (p-q)_{I_j} \rangle = \sup_{f \in \mathcal{F}_{I_j}^k(t, q)} \langle \tilde{p} - p^*, f_{I_j} \rangle \quad (7.22)$$

Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz on trouve désormais :

$$M_{p^*}(t, q) \leq t \left( \sum_{j=1}^{r+1} \delta_j^2(1, q, p^*) \right)^{1/2}$$

On est donc ramené à contrôler les quantités  $\delta_j^2(1, q, p^*)$ . C'est l'équivalent de la notion de *Gaussian width* évoquée par Bellec (2016) dans le cadre de la régression gaussienne. Nous verrons à la Section 7.3.3 comment utiliser les outils de grandes déviations montrés par Massart (2007) pour contrôler les quantités  $\delta_j^2(1, q, p^*)$ .

L'idée à l'origine de ce découpage est la suivante : dans le cas général, si  $p$  et  $q$  sont des fonctions  $k$ -monotones sur un intervalle  $I$ , alors  $p - q$  n'est a priori pas une fonction  $k$ -monotone. En revanche si  $q$  ne possède pas de  $k$ -nœud sur  $I$  (hormis au point extrémal à droite), tous ses Laplaciens  $\Delta^k q(i)$  pour  $i \in I$  sont nuls, ce qui montre que  $p - q$  est une fonction  $k$ -monotone.



## Majoration du supremum de processus empiriques

Dans cette section  $q$  est toujours une probabilité  $k$ -monotone fixée possédant  $r$  noeuds, les intervalles  $I_j$  associés à  $q$  sont définis comme à la section 7.3.2. Pour commencer  $j \in \{1, \dots, r\}$  est fixé.

Le Théorème 46 donné ci-dessous a été montré par Massart (2007). L'énoncé initial de ce théorème nécessite la vérification de deux hypothèses, qui est faite dans les preuves à la Section 7.5.3. Ce résultat fait le lien entre le supremum de processus empiriques  $\delta_j(1, q, p^*)$  et une notion topologique concernant l'espace métrique relatif au processus, l'entropie à crochet, dont la définition est rappelée au Chapitre 3.

**Lemme 46** (Massart, Théorème 6.8). *Soit  $I_j = i_{j-1} + 1, i_j$  un intervalle discret. Soit  $q$  une probabilité  $k$ -monotone ne possédant pas de  $k$ -noeud sur  $I_j \setminus \{i_j\}$ . Soit  $\mathcal{F}_{I_j}^k(t)$  l'ensemble de fonctions défini par l'équation (7.21). On note  $H$  l'entropie à crochet suivante :*

$$H(\varepsilon) = H_j^k(\varepsilon, q, p^*, 1) = \log \left( N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}_{I_j}^k(1, q), \|\cdot\|_{2, p^*}) \right) \quad (7.23)$$

et  $\sigma_j^2$  le réel suivant :

$$\sigma_j^2 = \|p_{I_j}^*\|_\infty. \quad (7.24)$$

Alors l'inégalité de concentration suivante est vérifiée :

$$\mathbb{E} [\delta_j(1, q, p^*)] \leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \sqrt{H(u) \wedge ndu} + \frac{4H(\sigma_j)}{n}. \quad (7.25)$$

De plus pour tout réel positif  $x$  :

$$\mathbb{P} \left( \delta_j(1, q, p^*) \leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \sqrt{H(u) \wedge ndu} + \frac{4H(\sigma_j)}{n} + \frac{7\sigma_j \sqrt{2x}}{\sqrt{n}} + \frac{2x}{n} \right) \geq 1 - e^{-x} \quad (7.26)$$

où  $\delta_j$  est définie en (7.22).

Le contrôle des quantités  $\delta_j(1, q, p^*)$  définies en (7.22) est donc lié au calcul de l'entropie à crochet  $H_j^k(\varepsilon, q, p^*, 1)$  (équation (7.23)). Une majoration de cette entropie est calculée à la Section 7.3.4. Le découpage de la Section 7.3.2 revient à se ramener à des sous-espaces sur lesquels l'entropie ne va pas dépendre de  $q$ .

## Calculs d'entropies à crochet

Dans cette Section nous calculons une majoration de l'entropie à crochet  $H_I^k(\varepsilon, q, p^*, 1)$  définie en (7.23), où  $I = a, b$  est un intervalle sur lequel  $q$  n'a pas de  $k$ -noeud, sauf éventuellement en  $b$ .

Le calcul de cette entropie dans le cas  $k = 1$  est analogue à un résultat de Flammarion et al. (2016) dans un cadre de regression monotone. Leur preuve appelle un résultat de Chatterjee (2014) dont l'analogue dans notre cadre est le Lemme 52 énoncé dans les preuves à la Section 7.5.2. Il s'agit d'une seconde borne entropique, pour les fonctions  $k$ -monotones bornées par une constante  $B$  et possédant un support fixé (et fini). La majoration dans le cas où  $k = 1$  sert d'initialisation pour le cas  $k \geq 2$ , dont la preuve est effectuée par récurrence, l'argument clé étant emprunté à Gao et Wellner (2009). Finalement le résultat d'entropie s'énonce ainsi :

**Lemme 47.** Soient  $I = a, b$  un intervalle discret de longueur  $L$ ,  $p^*$  une probabilité discrète quelconque et  $k$  un entier supérieur à 1 fixé. Soient également  $q$  une densité  $k$ -monotone ne possédant pas de  $k$ -noeud sur  $I \setminus \{b\}$  et  $t > 0$ .

Il existe une constante  $C_k$  dépendant uniquement de  $k$  (et donc indépendante de  $t$ ,  $q$  et  $I$ ) telle que pour tout  $0 < \varepsilon \leq t$  :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq C_k \left( \frac{t \log(eL)}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{k-1}{k}} \quad (7.27)$$

$$H_j^k = \log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p_I^*} \right) \leq C_k \left( \frac{t \log(eL) \sqrt{\|p_I^*\|_\infty}}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{k-1}{k}} \quad (7.28)$$

Si de plus  $g$  désigne la probabilité constante sur  $I$  alors :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, g} \right) \leq C_k \left( \frac{t \log(eL)}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{2k-3}{2k}} \quad (7.29)$$

où  $H_j^k$  et  $\mathcal{F}_I^k(t, q)$  sont définis respectivement en (7.23) et (7.21).

La preuve est donnée à la Section 7.5.2. Une discussion concernant l'optimalité de cette borne supérieure est faite à la Section 7.4. En particulier pour  $k = 1$  ce Lemme s'écrit :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^1(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq \frac{C_1 t}{\varepsilon} \times \log(eL) \quad (7.30)$$

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^1(t, q), \|\cdot\|_{2, p_I^*} \right) \leq \frac{C_1 t \sqrt{\|p_I^*\|_\infty}}{\varepsilon} \times \log(eL). \quad (7.31)$$

## Discussion

Dans toute cette discussion  $k$  est un entier supérieur à 1,  $p^*$  désigne une probabilité discrète quelconque,  $q$  une probabilité discrète  $k$ -monotone à support fini,  $I$  un intervalle de longueur  $L$  sur lequel  $q$  ne possède pas de  $k$ -noeud et  $t$  un réel strictement positif. On rappelle que  $\mathcal{S}^k$  est le cône des fonctions discrètes  $k$ -monotones et  $\mathcal{S}_L^{k, B}$  le sous-ensemble de  $\mathcal{S}^k$  des fonctions  $k$ -monotones à support dans  $0, L - 1$  et bornées en norme infinie par  $B > 0$ . Toutes les normes considérées sont définies à la Section 3.1.

Dans ce chapitre nous avons établi une borne de type oracle adaptative pour le risque quadratique lié à l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie discrète (voir Théorème 43). Cette borne de risque est liée, grâce aux résultats de concentration de Massart, à l'entropie à crochet suivante :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p^*} \right) \quad (7.32)$$

où l'ensemble  $\mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p^*}$  est défini par :

$$\mathcal{F}_I^k(t, q) = \{f = (p - q)_I, p \in \mathcal{S}^k, \|(p - q)_I\|_2 \leq t\}. \quad (7.33)$$

L'optimalité du Théorème 43 est donc intrinsèquement liée à l'optimalité de la borne d'entropie (7.32).

### Le cas $k = 1$ : vers un résultat optimal ?

Dans le cas où  $k = 1$ , la borne est de la forme suivante (voir Lemme 47) :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p^*} \right) \leq C \frac{t \log(eL) \sqrt{\|p_I^*\|_\infty}}{\varepsilon}.$$

Cette borne est obtenue grâce à un découpage en produit de cônes proposé par Flammarion et al. (2016). Il est raisonnable de penser que cette borne est optimale pour notre problème (à constante multiplicative près), au vu des résultats classiques d'entropie dans ce type de problèmes (voir par exemple Flammarion et al. (2016) ou Chatterjee (2014)) ainsi que de la borne de risque obtenue (Théorème 43), analogue à constante près à celle de Bellec (2016) qui travaille dans un cadre de régression gaussienne. Pour s'en assurer nous pourrions :

- Calculer une borne inférieure pour l'entropie à crochet comme cela a été fait par Gao (2008) dans le cas des entropies métriques pour les fonctions  $k$ -monotones continues à support fini.
- Vérifier que les vitesses obtenues à partir de ces résultats entropiques atteignent la vitesse minimax (voir Section 3.3.1).

L'optimalité de ce résultat est absolument liée à la dépendance *lente* en la longueur du support  $L$ , à vitesse  $\log(eL)$ , qui est ainsi compensée par la norme  $\sqrt{\|p_I^*\|_\infty}$ . Cette dernière décroît à vitesse au moins  $1/\sqrt{L}$ , lorsque  $p^*$  est une probabilité décroissante.

### Le calcul d'entropie dans le cas $k \geq 2$

Dans le cas où  $k \geq 2$  nous avons montré la majoration suivante (voir Lemme 47) :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p^*} \right) \leq C_k \left( \frac{t \log(eL) \sqrt{\|p_I^*\|_\infty}}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{k-1}{k}} \quad (7.34)$$

où  $C_k$  est une constante ne dépendant que de  $k$ .

### Des raisons de penser qu'il est possible d'améliorer ce résultat

Dans le cas continu, les résultats suivants ont été montrés :

**Théorème 48** (Gao, 2008). *Soit  $k$  un entier supérieur ou égal à 1. Soient  $A, B > 0$ . Soit  $\mathcal{M}_k^B([0, A])$  l'espace des fonctions  $k$ -monotones sur  $\mathbb{R}_+$  de support dans  $[0, A]$  et bornées (en norme infinie) par  $B$ . Il existe deux constantes  $C_1(k)$  et  $C_2(k)$ , dépendant de  $k$ , telles que pour tout  $\delta > 0$ , l'entropie en norme  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}$  de  $\mathcal{M}_k^B([0, A])$  est encadrée de la sorte :*

$$\frac{C_1(k) A^{1/k} B^{1/k}}{\delta^{1/k}} \leq \log \left( N \left( \delta, \mathcal{M}_k^B([0, A]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2} \right) \right) \leq \frac{C_2(k) A^{1/k} B^{1/k}}{\delta^{1/k}} \quad (7.35)$$

**Théorème 49** (Gao et Wellner, 2009). *Soit  $k$  un entier supérieur ou égal à 1. Soient  $A, B > 0$ . Soit  $p^*$  une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $[0, A]$ . Soit  $\mathcal{M}_k^B([0, A])$  l'espace des fonctions  $k$ -monotones sur  $\mathbb{R}_+$  de support dans  $[0, A]$  et bornées (en norme infinie) par  $B$ . Il existe une constante  $C$ , indépendante de  $k$ , telle que pour tout  $\delta > 0$ , l'entropie en norme  $\mathcal{L}_2(p^*)$  de l'espace  $\mathcal{M}_k^B([0, A])$  est majorée de la sorte :*

$$\log \left( N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{M}_k^B([0, A]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}_2(p^*)} \right) \right) \leq \frac{C^{\frac{k+1}{2}} (\|p^*\|_\infty AB^2)^{1/2k}}{\delta^{1/k}} \quad (7.36)$$

La principale différence entre le résultat (7.36) et les résultats de Gao et Gao et Wellner est la puissance liée à la taille  $L$  du support :

- $\log(\epsilon L)^{1/k} L^{\frac{k-1}{k}} \approx L$  dans le cas discret
- $\sqrt{L}^{1/k}$  dans le cas continu.

Dans le cas continu ce terme est donc décroissant avec  $k$  et le résultat final plus fin. Pourtant, si l'on imagine que l'espace  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  peut être mis en bijection avec un sous-espace de  $\mathcal{M}_k^B([0, L])$  via une application  $\phi$  :

$$\begin{aligned} \phi : \mathcal{S}_L^{k,B} &\longrightarrow \mathcal{M}_k^B([0, L]) \\ p &\longmapsto \bar{p} \end{aligned}$$

alors l'inégalité suivante sur les entropies pourrait être vérifiée :

$$\log N_{[\cdot]}(\epsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2) \leq \log N_{[\cdot]}(\epsilon, \mathcal{M}_k^B([0, L]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}), \quad (7.37)$$

à condition que l'application  $\phi$  soit 1-lipschitzienne de  $(\mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2)$  vers  $(\mathcal{M}_k^B([0, L]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2})$ , (ou tout du moins,  $d$ -lipschitzienne avec  $d$  une constante absolue et connue). Nous reviendrons sur les difficultés liées à la définition d'une telle fonction  $\phi$ , et la déduction de l'équation (7.37), au paragraphe *A propos du lien entre le cas continu et le cas discret*. Néanmoins, à défaut de pouvoir exhiber une telle fonction  $\phi$ , l'heuristique suivante incite à penser que les cas continus et discrets sont plus proches que ne laisse supposer le résultat en  $\log(\epsilon L)^{1/k} L^{\frac{k-1}{k}}$ .

**Heuristique** Soit  $\bar{p}$  une fonction  $k$ -monotone continue à support dans  $[0, 1]$ , et majorée en norme infinie par  $B > 0$ . Pour tout entier  $L$  supérieur à 1 on peut lui associer la fonction discrète  $k$ -monotone suivante :

$$\forall i \in \mathbb{N}, p_L(i) = \bar{p}\left(\frac{i}{L}\right) \mathbb{I}_{i \leq L}.$$

La fonction  $p_L$  appartient à  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  et sa norme quadratique, en conséquence des propriétés sur les sommes de Riemann, vérifie :

$$\|p_L\|_2 = \left( \sum_{i=0}^{L-1} p_L^2(i) \right)^{1/2} = \left( \sum_{i=0}^{L-1} \bar{p}^2\left(\frac{i}{L}\right) \right)^{1/2} \underset{L \rightarrow +\infty}{\approx} \left( L \int_0^1 \bar{p}\left(\frac{x}{L}\right)^2 dx \right)^{1/2} = \sqrt{L} \|\bar{p}\|_{\mathcal{L}^2}.$$

Il est alors naturel d'espérer que l'entropie à crochet de l'espace  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  puisse être de l'ordre de  $\sqrt{L}$  fois l'entropie à crochet de l'espace  $\mathcal{M}_k^B([0, 1])$ , c'est-à-dire :

$$N_{[\cdot]}(\epsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2) \approx \sqrt{L} N_{[\cdot]}(\epsilon, \mathcal{M}_k^B([0, 1]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}) = N_{[\cdot]}(\epsilon, \mathcal{M}_k^B([0, L]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2})$$

### Conjecture et résultat associé

Pour les raisons précédemment évoquées il est raisonnable de penser que la conjecture suivante est vraie, remplaçant l'actuel Lemme 54 :

**Conjecture 1.** Soient  $B > 0$  et  $L \in \mathbb{N}^*$ . Il existe une constante  $C_k$  dépendant uniquement de  $k$  telle que pour tout  $0 < \varepsilon \leq t$  :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2 \right) \leq C_k \left( \frac{B\sqrt{L}}{\varepsilon} \right)^{1/k} \quad (7.38)$$

En admettant que cette conjecture soit vraie, il est intéressant de remarquer que le corps de preuve du Théorème 43 est très peu modifié. La modification principale réside dans le remplacement du Lemme 47 par le Lemme suivant :

**Lemme 50.** Soient  $I = a, b$  un intervalle discret de longueur  $L$ ,  $p^*$  une probabilité discrète quelconque et  $k$  un entier supérieur à 1 fixé. Soient également  $q$  une densité  $k$ -monotone ne possédant pas de  $k$ -noeud sur  $I \setminus \{b\}$  et  $t > 0$ . Supposons que la Conjecture 1 soit vraie, il existe alors une constante  $C_k$  dépendant uniquement de  $k$  (et donc indépendante de  $t$ ,  $q$  et  $I$ ) telle que pour tout  $0 < \varepsilon \leq t$  :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq C_k \log(eL) \times \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k}. \quad (7.39)$$

La preuve de ce Lemme est à la Section 7.5.5. Le reste de la preuve étant inchangé nous pouvons alors énoncer une nouvelle borne, qui dépend de ces nouvelles notations :

$$K'_1(q, p^*) = \left( \sum_{j=1}^r \log(eL_j) \|p_{I_j}^*\|_\infty \right)^{1/2} \quad (7.40)$$

$$K'_2(q, p^*) = \left( \sum_{j=1}^r \log(eL_j)^2 \right)^{1/2} \quad (7.41)$$

$$f(x, n, r, p^*) = \left( \frac{7 \left( \sum_{j=1}^r \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty} \right) \sqrt{2(x + \log(r+1))}}{\sqrt{n}} + \frac{2(x + \log(r+1))}{n} \right), \quad (7.42)$$

ainsi que

$$K'(q, p^*, n) = \frac{K_1(q, p^*)}{\sqrt{n}} + \frac{K_2(q, p^*)}{n}. \quad (7.43)$$

**Théorème 51.** Soient  $I = a, b$  un intervalle discret de longueur  $L$ ,  $p^*$  une probabilité discrète quelconque et  $k$  un entier supérieur à 1 fixé. Soient également  $q$  une densité  $k$ -monotone ne possédant pas de  $k$ -noeud sur  $I \setminus \{b\}$  et  $t > 0$ . On suppose que la Conjecture 1 est vraie. Alors les bornes de type oracle suivantes sont vraies :

1. Inégalités moyennes :

$$\mathbb{E} \left[ \|\hat{p}^k - p^*\|_2 \right] \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} \left( \|p^* - q\|_2 + K'(q, p^*, n) + \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r(q)+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2} \right)$$

2. Inégalités en déviation : de même, pour tout  $x > 0$ , avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$  :

$$\begin{aligned} \|\hat{p}^k - p^*\|_2 \leq C \inf_{q \in \mathcal{P}_0^k} & \left( \|p^* - q\|_2 + K'(q, p^*, n) + 2\sqrt{r(q)}f(x, n, r(q), p^*) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r(q)+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2} \right) \end{aligned}$$

où  $C$  est une constante strictement supérieure à 1 qui ne dépend que de  $k$ .

Ce théorème est montré à la Section 7.5.6. La borne adaptative qui découle de la conjecture serait ainsi beaucoup plus précise que celle du Théorème 43 lorsque  $k$  est supérieur à 2 et de plus en plus précise lorsque  $k$  croît.

### A propos du lien entre le cas continu et le cas discret

Nous venons de voir qu'une idée naturelle dans notre démarche est de chercher à montrer les résultats dans le cas discret à partir de ceux qui ont été établis dans le cas continu. L'heuristique est la suivante : étant donnée une probabilité discrète  $k$ -monotone  $p$ , on lui associe la fonction interpolée  $\bar{p}$  qui est :

- soit une fonction continue  $k$ -monotone égale à  $p$  sur les entiers
- soit une fonction continue  $k$ -monotone dont on sait contrôler l'écart à  $p$  en norme quadratique discrète.

Il faut veiller à ce que le support  $I$  de  $\bar{p}$  ainsi que sa norme infinie soient majorés. La fonction  $\bar{p}$  appartient alors à l'ensemble  $\mathcal{M}_k^B(I)$ , ainsi le résultat de Gao et Wellner (Théorème 49) permet de construire un  $\varepsilon$ -crochet  $\bar{\mathcal{B}}$  de  $(\mathcal{M}_k^B(I), \|\cdot\|_{\mathcal{L}_2(\bar{p}^*)})$  de longueur  $N$  avec :

$$N = \exp \left( C_k \left( \frac{t\sqrt{L}\sqrt{\|p_I^*\|_\infty}}{\varepsilon} \right)^{1/k} \right) \quad (7.44)$$

L'enjeu est alors de savoir construire un  $\varepsilon$ -crochet de  $(\mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,p^*})$  à partir de  $\bar{\mathcal{B}}$ . Cette démarche a été adoptée dans le cas où  $k = 1$  pour montrer le Lemme 52.

Deux problèmes principaux ont empêché d'étendre cette heuristique lorsque  $k > 1$  :

1. **Dans le cas où  $k \geq 3$** , l'interpolation par une fonction  $k$ -monotone continue est une question difficile. Elle nécessite, entre autres, d'être capable de contrôler la positivité de toutes les dérivées  $j$ -ièmes, pour  $j = 1 \dots k - 2$ . En particulier, les éléments de la base de splines  $(Q_j^k)$  s'écrivent :

$$\forall i \in \mathbb{N}, Q_j^k(i) = \sum_{l=1}^{k-1} (j+1-i)_+^l$$

et la fonction  $\bar{Q}_j^k$  associée naturellement à  $Q_j^k$  :

$$\begin{aligned} \bar{Q}_j^k : \mathbb{R}_+ &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto \sum_{l=1}^{k-1} (j+1-x)_+^l \end{aligned}$$

n'est pas  $k$ -monotone. En effet elle n'est notamment pas dérivable au voisinage de  $j+1$ . Les fonctions  $k$ -monotones discrètes étant combinaison linéaire des splines  $(Q_j^k)$ , il y a potentiellement un problème de saut au voisinage de chaque entier. On pourrait penser qu'on pallie ce problème en prolongeant plutôt les  $Q_j^k$  par les polynômes  $\bar{Q}_j^{k'}$  suivants :

$$\begin{aligned} \bar{Q}_j^{k'} : \mathbb{R}_+ &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto \sum_{l=1}^{k-1} (j+1-x)^l \end{aligned}$$

plutôt que les splines  $\bar{Q}_j^k$ , mais cela entraîne une autre difficulté. Ces polynômes sont en effet  $\mathcal{C}^\infty$  sur  $\mathbb{R}$  tout entier, mais il est difficile de contrôler leur norme infinie, pour montrer leur appartenance à un ensemble  $\mathcal{M}_k^B(I)$ .

2. **Dans le cas où  $k \geq 2$** , le problème de construire un  $\varepsilon$ -crochet de  $(\mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,p^*})$  à partir de  $\bar{\mathcal{B}}$  n'est pas aussi trivial qu'il y paraît. En effet les deux crochets ne sont pas associés à la même norme ( $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(\bar{p}^*)}$  contre  $\|\cdot\|_{2,p^*}$ ). L'idée naturelle, étant donné un élément  $(\bar{f}_-, \bar{f}_+)$  de  $\bar{\mathcal{B}}$ , est de prendre les versions discrétisées de  $(\bar{f}_-, \bar{f}_+)$ , c'est-à-dire de poser  $f_+$  (respectivement  $f_-$ ) la suite telle que pour tout entier positif  $i$ :

$$f'_+(i) = \bar{f}'_+(i).$$

Avec une telle définition, la propriété suivante est vérifiée :

$$\bar{f}_- \leq \bar{p} \leq \bar{f}_+ \implies f_- \leq p \leq f_+$$

et l'ensemble  $\mathcal{B} = \{(f_-, f_+), (\bar{f}_-, \bar{f}_+) \in \bar{\mathcal{B}}\}$  est donc bien un crochet de  $\mathcal{S}_L^{k,B}$ . Cependant il reste ensuite à contrôler la distance entre  $f_+$  et  $f_-$  (en norme  $\|\cdot\|_{2,p^*}$ ) à partir de celle entre  $\bar{f}_+$  et  $\bar{f}_-$  (en norme  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(\bar{p}^*)}$ ). Plus formellement il s'agit de montrer que :

$$\begin{aligned} \|f_+ - f_-\|_{2,p^*}^2 &= \sum_{i=0}^{+\infty} (f_+ - f_-)_i^2 p_i^* \\ &\leq C \int_I (\bar{f}_+ - \bar{f}_-)^2(t) \bar{p}^*(t) \\ &= C \|\bar{f}_+ - \bar{f}_-\|_{\mathcal{L}^2(\bar{p}^*)}^2 \\ &\leq C\varepsilon^2 \end{aligned} \quad (7.45)$$

avec  $C$  une constante absolue. Ceci n'est pas vrai dans le cas général. Cela l'était dans le cas où  $k = 1$  (voir la preuve du Lemme 52) car les fonctions interpolées  $\bar{p}$  sont constantes par morceaux entre deux entiers consécutifs et qu'il est alors possible de déduire de  $\bar{\mathcal{B}}$ , un crochet de  $\{\bar{p}, p \in \mathcal{S}_L^{k,B}\}$  constitué de fonctions elles-mêmes constantes par morceaux entre deux entiers consécutifs.

**Concernant la comparaison des deux normes**, deux solutions peuvent être envisagées dans le cas où  $k = 2$  :

1. Guntuboyina et Sen (2015, Lemme A4) ont montré que pour deux fonctions convexes et affines par morceaux entre deux entiers consécutifs, notées  $f$  et  $g$ , de support  $I = [a, b]$  (avec -pour simplifier-  $a$  et  $b$  des entiers), l'inégalité des normes suivantes est vraie :

$$\int_a^b (f(x) - g(x))^2 dx \leq \sum_{i=a}^b (f(i) - g(i))^2 \leq 6 \int_a^b (f(x) - g(x))^2 dx \quad (7.46)$$

Ce lemme montre que si on arrive à déduire de  $\bar{\mathcal{B}}$  un  $\varepsilon$ -crochet composé de fonctions convexes et affines par morceaux, l'inégalité (7.45) sera vérifiée.

2. Dans le cas où  $p^*$  est décroissante, l'inégalité de comparaison série-intégrale assure que l'inégalité (7.45) est vraie dès lors que pour tout élément  $(\bar{f}_-, \bar{f}_+)$  de  $\bar{\mathcal{B}}$ , la fonction  $|\bar{f}_+ - \bar{f}_-|$  est elle-même décroissante. En d'autres termes lorsque les éléments du crochet se resserrent quand la variable  $x$  croît. Une seconde piste serait donc de déduire de  $\bar{\mathcal{B}}$  un crochet de telle forme.

### A propos de la stratégie de récurrence

Déduire les résultats du cas continu au cas discret s'avère délicat lorsque  $k \geq 2$ . La stratégie adoptée dans ce chapitre a donc été plutôt de s'inspirer de la méthode de Gao et Wellner dans le cas continu. La démarche est la suivante : étant donné un premier résultat pour  $k = 1$ , le résultat pour  $k$  quelconque est obtenu par récurrence. Le Lemme de récurrence (Lemme 54) permet de passer d'une majoration d'entropie à crochet pour  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  à une majoration d'entropie pour l'espace  $\mathcal{S}_L^{k+1,B}$  en exploitant le fait que ce second espace est constitué des primitives du premier espace. Cette stratégie utilise ainsi la nature itérative de la définition des fonctions  $k$ -monotones.

Une question naturelle au vu des conclusions du paragraphe *Des raisons de penser qu'il est possible d'améliorer ce résultat* est alors la suivante :

*Pourquoi, alors que la stratégie engagée est la même dans le cas continu et le cas discret, les ordres de grandeur des résultats différent-ils ?*

Essentiellement pour des raisons liées aux natures des normes considérées. En effet la stratégie de récurrence peut se représenter schématiquement ainsi :

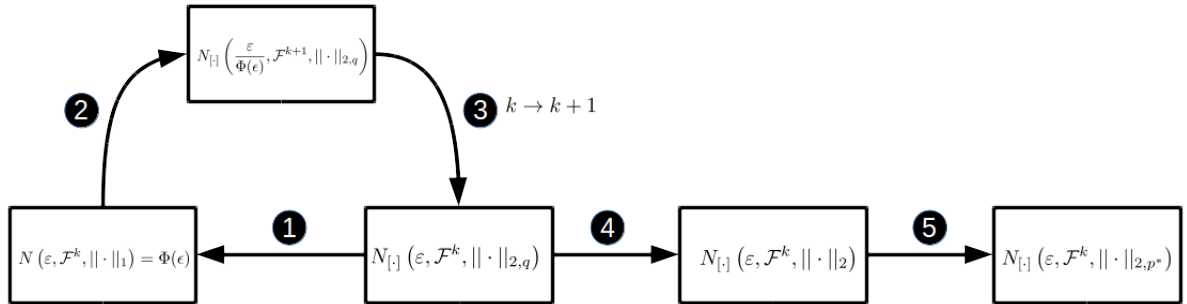


Figure 7.2: Schéma de la preuve des calculs d'entropie.

La figure 7.2 illustre les grandes étapes de la récurrence, aussi bien dans le cas continu que dans le cas discret. L'ensemble  $\mathcal{F}^k$  désigne un sous-ensemble de fonctions  $k$ -monotones discrètes ou continues ( $\mathcal{S}_L^{k,B}$  ou  $\mathcal{M}_k^B([0, L])$ ),  $q$  est la probabilité constante sur l'ensemble considéré,  $p^*$  une probabilité quelconque. Les normes  $\|\cdot\|_2$ ,  $\|\cdot\|_{2,q}$  et  $\|\cdot\|_{2,p^*}$  sont les normes discrètes usuelles ou -abusivement- les normes continues associées, exceptionnellement notées différemment pour simplifier la lecture du schéma.

L'étape 3 est un calcul formel, l'étape 2 s'effectue grâce au Lemme de Gao et Wellner (2008) dans le cas continu et au Lemme 54 dans le cas discret, et enfin l'étape 5 est identique dans le cas discret et le cas continu, elle utilise l'inégalité suivante :

$$N_{[·]}(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_2) \leq N_{[·]} \left( \frac{\varepsilon}{\sqrt{\|p^*\|_\infty}}, \mathcal{F}, \|\cdot\|_{2,p^*} \right)$$

vraie pour tout ensemble de fonction  $\mathcal{F}$ . La différence entre les cas continu et discret réside donc dans les étapes 1 et 4, à cause du phénomène suivant : alors que dans le cas continu tous les calculs étaient effectués sur  $[0, 1]$  en remarquant l'effet de dilatation suivant :

$$\sqrt{\int_0^L p^2 \left( \frac{x}{L} \right) dx} = \sqrt{L \int_0^1 p^2(x) dx}$$



qui engendre le fait que  $N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{M}_k^B([0, L]), \|\cdot\|) \leq N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{M}_k^{B\sqrt{L}}([0, 1]), \|\cdot\|)$ ; dans le cas discret en revanche les normes d'une fonction  $p$  et de sa dilatée  $p(\frac{\cdot}{L})$  sont identiques, les calculs doivent donc être effectués en tenant compte du support.

Ainsi, durant l'étape 1 qui fait le lien entre les inégalités à crochet en norme  $\|\cdot\|_{2,q}$  (respectivement  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(q)}$  dans le cas continu) et les entropies métriques en norme 1, dans le cas continu Gao et Wellner utilisent l'inégalité suivante :

$$N(\varepsilon, \mathcal{M}_k^{B\sqrt{L}}([0, 1]), \|\cdot\|_1) \leq N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{M}_k^{B\sqrt{L}}([0, 1]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(q)}),$$

tandis que l'analogie dans le cas discret est :

$$N(\varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_1) \leq N_{[\cdot]}(\frac{\varepsilon}{L}, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,q}).$$

De même durant l'étape 4, alors que l'inégalité suivante est vraie dans le cas continu :

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{M}_k^{B\sqrt{L}}([0, 1]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}) \leq N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{M}_k^{B\sqrt{L}}([0, 1]), \|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(q)}),$$

dans le cas discret, en revanche :

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2) \leq N_{[\cdot]}(\frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,q}).$$

Ainsi, à chaque étape de la récurrence, l'impossibilité dans le cas discret de se ramener par dilatation à un support neutre entraîne l'apparition de termes en " $L$ " parasites qui n'existaient pas dans le cas continu.

En conclusion une stratégie de récurrence rigoureusement analogue au cas continu ne permet pas d'obtenir des bornes entropiques de même ordre, en raison des différences d'ordre entre les normes. L'obtention des bornes d'entropie espérées à la Conjecture 1 nécessitera donc la définition d'une nouvelle stratégie de récurrence.

## A propos des méthodes de Bellec

Le Théorème 43 est énoncé dans le cadre de l'estimation de densité discrète. Sous certains aspects ce cadre est proche de celui de la régression gaussienne sous contrainte de forme. On pourrait en effet définir un cadre de régression  $k$ -monotone *emboîtée* de la manière suivante : supposons que l'on ait des observations de la forme :

$$Y_i = \mu_i + \xi_i, \quad i \in 1 \dots n,$$

avec  $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)^T$  un vecteur de  $\mathbb{R}^n$  inconnu à estimer et  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)^T \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_{n \times n})$  un bruit gaussien de variance  $\sigma^2$  inconnue.

Le vecteur  $\mu$  sera dit fortement  $k$ -monotone,  $k \geq 2$ , si  $\mu$  est fortement  $(k-1)$ -monotone et que pour tout  $i \in \{1, n-k+1\}$  il vérifie  $(-1)^k \Delta^k \mu(i) \geq 0$ , en faisant l'abus de notation  $\mu(i) = \mu_i$ , et fortement 1-monotone si il est monotone, et non pas nécessairement décroissant comme c'était le cas pour l'estimation de densité.

L'espace des séquences fortement  $k$ -monotones de  $\mathbb{R}^n$  est noté  $\mathcal{S}_n^k$ . On remarque en particulier que cette définition de la  $k$ -monotonie introduit l'emboîtement des espaces  $\mathcal{S}_n^k$ , caractéristique nécessaire pour envisager une adaptation des calculs d'entropies des Sections 7.3.4 et 7.5.2. Ce cadre est donc en particulier différent du cadre classique de la *régression convexe* (voir Etat de l'art, Section 1.1.4) qui n'impose pas la décroissance du

vecteur  $\mu$ , comme c'est le cas par exemple dans les papiers de Bellec (2016) et Bellec et Tsybakov (2015).

On définit l'estimateur des moindres carrés sous hypothèse de  $k$ -monotonie ainsi :

$$\hat{\mu}^k \in \operatorname{argmin}_{u \in \mathcal{S}_n^k} \|y - u\|_2^2. \quad (7.47)$$

Dans le cas où  $k = 1, 2$  Bellec (2016) a montré lui aussi une inégalité oracle. Dans son cas elle est sharp et adaptative :

$$\|\hat{\mu}^k - \mu\|_2^2 \leq \min_{u \in \mathcal{S}_n^k} \left( \|u - \mu\|_2^2 + \frac{c\sigma^2 r(u)}{n} \log \left( \frac{en}{r(u)} \right) \right) \quad (7.48)$$

la quantité  $r(u)$  désigne le nombre de plateaux ( $k = 1$ ) ou changements de pentes ( $k = 2$ ) du vecteur  $u$ . Cette inégalité est très similaire à celle que nous avons montré dans le cas de l'estimation de densité dans le cas où  $k = 1$  et celle envisagée au Théorème 51 dans le cas où  $k \geq 2$ , qui est généralisable au cadre de la régression  $k$ -monotone emboîtée. Son caractère optimal est renforcé par le fait qu'elle soit sharp.

Revenons sur l'approche globale adoptée dans ce chapitre. L'origine du Théorème 43 est une formulation variationnelle développée par Chatterjee (2014). Cette approche, très flexible et puissante présente l'avantage d'être applicable dans un très grand nombre de cas. Associée à des inégalités de chaînage liées à des calculs d'entropie à crochet, elle a permis de montrer une borne de risque locale adaptative. L'approche de Bellec (2016) et de Chatterjee et al. (2015) dans le cadre de la régression (notamment isotone, convexe ou unimodale) n'est pas exactement la même. Elle est basée sur le calcul de la dimension statistique associée à un cône convexe  $\Theta$  dont la définition est la suivante :

$$\delta(\Theta) = \mathbb{E} \left[ \left( \sup_{\theta \in \Theta, \|\theta\|_2 \leq 1} g^T \theta \right)^2 \right],$$

$g$  désignant une variable aléatoire gaussienne :  $g \sim \mathcal{N}(0, I_{n \times n})$ . Cette dimension a été calculée par Amelunxen et al. (2014) dans le cas du cône des séquences croissantes  $\Theta = \mathcal{S}_n^\uparrow$  et étendue à des cas proches par Bellec (2016) et Chatterjee et al. (2015). Le calcul de Amelunxen et al. (2014) fait intervenir des outils de dénombrement issus du domaine de l'informatique théorique. Concernant notre problème il est impossible d'adopter l'état d'esprit de Bellec dans le cadre de l'estimation de densité. En effet d'une part la structure sous-jacente de notre espace convexe  $\Theta$  n'est pas polyédrale comme expliqué dans Flammarion et al. (2016), et d'autre part aucun cadre gaussien n'est posé. En revanche il est crédible que cette approche puisse s'appliquer au cadre de la régression sous contrainte de  $k$ -monotonie (non nécessairement emboîtée) si une majoration de la dimension statistique  $\delta(\mathcal{S}_n^k)$  était calculée.

## Preuves

### Preuve du résultat principal

Montrons le Théorème 43. Soit  $x > 0$  un réel fixé. On rappelle la définition suivante :

$$M_{p^*}(t, q) = \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p - q\|_2 \leq t} \langle \tilde{p} - p^*, p - q \rangle.$$

Par l'heuristique de la Section 7.3.1 il s'agit de montrer des inégalités de la forme :

1. Inégalité moyenne :

$$\mathbb{E} [M_{p^*}(t, q)] \leq tK + tR \quad (7.49)$$

2. Inégalité de déviation :

$$\mathbb{P} (M_{p^*}(t, q) \leq tK + t\sqrt{r}f(x, n, r, p^*) + tR) \geq 1 - e^{-x} \quad (7.50)$$

pour tout  $t > 0$  et pour toute probabilité  $q$   $k$ -monotone à support fini,  $K$ ,  $R$  et  $f$  désignant des quantités à déterminer et  $r$  le nombre de  $k$ -nœuds de  $q$ .

Fixons une probabilité  $q$  avec les mêmes notations qu'à la Section 7.3.2. Nous avons alors montré que le supremum de processus empiriques  $M_{p^*}(t, q)$  se majorait ainsi :

$$M_{p^*}(t, q) \leq t \left( \sum_{j=1}^{r+1} \delta_j^2(1, q, p^*) \right)^{1/2} \quad (7.51)$$

avec  $\delta_j$  défini à l'équation (7.22).

Commençons par montrer l'inégalité de type oracle moyenne. Fixons  $j \leq r$ . Par le Théorème 46 :

$$\mathbb{E} [\delta_j(1, q, p^*)] \leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \sqrt{H_j^k(u, q, p^*, 1) \wedge ndu} + \frac{4H_j^k(\sigma_j, q, p^*, 1)}{n},$$

les  $H_j^k$  étant définies par :

$$H_j^k(\varepsilon, q, p^*, t) = \log \left( N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}_{I_j}^k(t, q), \|\cdot\|_{2, p^*}) \right)$$

Soit  $E_j$  défini ainsi :

$$E_j = \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \sqrt{H_j^k(u, q, p^*, 1) \wedge ndu} + \frac{4H_j^k(\sigma_j, q, p^*, 1)}{n}. \quad (7.52)$$

Par le Lemme 47 avec  $\sigma_j^2 = \|p_{I_j}^*\|_\infty$ , il existe une constante  $C_k$  supérieure à 1 telle que les inégalités suivantes sont vérifiées :

$$\begin{aligned} E_j &\leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \left( C_k \left( \frac{\log(eL_j) \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\varepsilon} \right)^{1/k} L_j^{\frac{k-1}{k}} \right)^{1/2} du \\ &\quad + \frac{4C_k L_j^{\frac{k-1}{k}}}{n} \left( \frac{\log(eL_j) \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}} \right)^{1/k} \\ &\leq \frac{C'_k L_j^{\frac{k-1}{2k}} \log(eL_j)^{1/2k} \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_k L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k}}{n} \end{aligned} \quad (7.53)$$

où  $C'_k$  et  $C''_k$  sont des constantes dépendant de  $k$  :

$$C'_k = 27\sqrt{C_k} \times \frac{2k}{2k-1} \quad \text{et} \quad C''_k = 4C_k.$$

Majorons maintenant la quantité  $\mathbb{E} [\delta_{r+1}^2(1, q, p^*)]$ .

Cas général : Les inégalités suivantes sont vérifiées par l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\begin{aligned} \delta_{r+1}(1, q, p^*) &= \sup_{p \in \mathcal{S}^k, \|p_{I_{r+1}}\|_2 \leq 1} \langle \tilde{p} - p^*, p_{I_{r+1}} \rangle \\ &\leq \sup_{p \in \mathcal{S}^k, \|p_{I_{r+1}}\|_2 \leq 1} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} (\tilde{p}_i - p_i^*)^2 \right)^{1/2} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} (\tilde{p}_i - p_i^*)^2 \right)^{1/2} \times 1. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Les variables aléatoires  $X_i$  étant indépendantes et identiquement distribuées, l'espérance du terme de droite est égale à :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[ \sum_{i=i_r+1}^{\infty} (\tilde{p}_i - p_i^*)^2 \right] &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} \mathbb{E} \left[ \left( \sum_{l=1}^n (\mathbb{I}_{X_l=i} - p_i^*) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} \text{var} \left( \underbrace{\mathbb{I}_{X_i=i} - p_i^*}_{\sim \mathcal{B}(p_i^*)} \right) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1 - p_i^*). \end{aligned}$$

Finalement l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\mathbb{E} [\delta_{r+1}^2(1, q, p^*)] \leq \frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1 - p_i^*). \quad (7.55)$$

Lorsque  $p^*$  est de support fini  $0, L^* - 1$  : Dans ce cas particulier la quantité  $\delta_{r+1}(1, q, p^*)$  est majorée par :

$$\sup_{p \in \mathcal{S}^1, \|p_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1}\|_2 \leq 1} \langle \tilde{p} - p^*, p_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1} \rangle \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset}. \quad (7.56)$$

Lorsque l'ensemble  $I_{r+1} \cap 0, L^* - 1$  n'est pas vide, la majoration de  $\delta_{r+1}(1, q, p^*)$  peut donc être calculée de la même manière que celles des quantités  $\delta_j(1, q, p^*)$ , via un contrôle d'entropie à crochet, cette fois-ci sur l'espace suivant :

$$\mathcal{F}_{r+1} = \{p \in \mathcal{S}^1, \|p_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1}\|_2 \leq 1\}.$$

Par le Lemme 47 celle-ci est majorée par :

$$\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}_{r+1}, \|\cdot\|_{2, p^*}) \leq \frac{C_1 t \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_{\infty}}}{\varepsilon} \times \log(eL) \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset}$$

où  $L = \text{card}(I_{r+1} \cap 0, L^* - 1) = L^* - i_r$ . Le reste du calcul étant identique à celui de la majoration de  $E_j$  pour  $k = 1$  et  $j \leq r$ , il est omis, et finalement on obtient la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [\delta_{r+1}(1, q, p^*)] &\leq \left( \frac{C'_1 (\log(e(L^* - i_r)))^{1/2} \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_{\infty}}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_1 \log(e(L^* - i_r))}{n} \right) \\ &\quad \times \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset}. \end{aligned} \quad (7.57)$$

**Conclusion** Par l'équation (7.51) et l'inégalité de Jensen :

$$\mathbb{E}[M_{p^*}(t, q)] \leq t \sqrt{\sum_{j=1}^r E_j^2 + \mathbb{E}[\delta_{r+1}^2(1, q, p^*)]} \quad (7.58)$$

Dans le cas d'un contrôle moyen, additionnée des équations (7.55) et (7.53), cette inégalité donne :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[M_{p^*}(t, q)] &\leq t \left( \sum_{j=1}^r \left( \frac{C'_k L_j^{\frac{k-1}{2k}} \log(eL_j)^{1/2k} \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_k L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k}}{n} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k} \|p_{I_j}^*\|_\infty \right)^{1/2} + \frac{C''_k t}{n} \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{2k-2}{k}} \log(eL_j)^{2/k} \right)^{1/2} \\ &\quad + \frac{t}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2} \\ &= \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) + \frac{t}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

De même, dans le cas d'un contrôle en déviation, on déduit de l'équation (7.51), de l'inégalité triangulaire et de l'inégalité de Jensen, l'équation suivante :

$$\mathbb{E}[M_{p^*}(t, q)] \leq t \times \left( \left( \sum_{j=1}^r E_j^2 \right)^{1/2} + \mathbb{E}[\delta_{r+1}(1, q, p^*)] \right), \quad (7.59)$$

qui, associée aux inégalités (7.57) et (7.53), entraîne :

$$\begin{aligned} M_{p^*}(t, q) &\leq t \left( \sum_{j=1}^r \left( \frac{C'_k L_j^{\frac{k-1}{2k}} \log(eL_j)^{1/2k} \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_k L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k}}{n} \right)^2 \right)^{1/2} + \\ &\quad t \left( \frac{\log(e(L^* - i_r)) \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{\log(e(L^* - i_r))}{n} \right) \times \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset} \\ &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{k-1}{k}} \log(eL_j)^{1/k} \|p_{I_j}^*\|_\infty \right)^{1/2} + \frac{C''_k t}{n} \left( \sum_{j=1}^r L_j^{\frac{2k-2}{k}} \log(eL_j)^{2/k} \right)^{1/2} \\ &\quad + t \left( \frac{\log(e(L^* - i_r)) \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{\log(e(L^* - i_r))}{n} \right) \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset} \\ &= \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) + tR(q, p^*, n) \end{aligned}$$

Ceci clôt la preuve de l'inégalité oracle moyenne.

Montrons désormais l'inégalité de type oracle en déviation. Pour tout  $j \in \{1, \dots, r+1\}$  on pose  $x_j$  tel que  $\sum_{j=1}^{r+1} e^{-x_j} \leq e^{-x}$ , par exemple en posant :

$$x_j = x + \log(r+1)$$

Pour commencer, fixons  $j \leq r$ . Par le Théorème 46, les quantités  $\delta_j(1, q, p^*)$  se majorent de la sorte :

$$\delta_j(1, q, p^*) \leq E_j + \frac{7\sigma_j \sqrt{2x_j}}{\sqrt{n}} + \frac{2x_j}{n}$$

avec probabilité  $1 - e^{-x_j}$ .

Majorons maintenant le terme  $\delta_{r+1}^2(1, q, p^*)$  avec probabilité  $1 - e^{-x_{r+1}}$  par une quantité déterministe  $E_{r+1}^2$ . Alors avec probabilité  $1 - e^{-x}$  on aura :

$$\begin{aligned} M_{p^*}(t, q) &\leq t \left( \sum_{j=1}^r \delta_j^2(1, q, p^*) + E_{r+1}^2 \right)^{1/2} \\ &\leq t \left( \sum_{j=1}^r \left( E_j + \frac{7\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty} \sqrt{2x_j}}{\sqrt{n}} + \frac{2x_j}{n} \right)^2 + E_{r+1}^2 \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Cas général : Par l'équation (7.54) :

$$\delta_{r+1}(1, q, p^*) \leq \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} (\tilde{p}_i - p_i^*)^2 \right)^{1/2} = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} \left( \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{X_l=i} - p_i^* \right)^2 \right)^{1/2} \quad (7.61)$$

Posons alors la fonction  $f$  définie par :

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} \left( \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{x_l=i} - p_i^* \right)^2 \right)^{1/2}$$

Pour tous vecteurs  $x$  et  $y$  de  $\mathbb{R}^n$  les équations suivantes sont vérifiées, par l'inégalité triangulaire :

$$\begin{aligned} |f(x) - f(y)| &\leq \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=i_r+1}^{+\infty} \left( \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{x_l=i} - \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{y_l=i} \right)^2} \\ &\leq \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=i_r+1}^{+\infty} \left( \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{x_l \neq y_l} \mathbb{I}_{x_l=i \text{ ou } y_l=i} \right)^2} \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{+\infty} \left( \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{x_l \neq y_l} \mathbb{I}_{x_l=i \text{ ou } y_l=i} \right) \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{x_l \neq y_l}, \end{aligned}$$

la fonction  $f$  vérifie donc la condition de différences bornées (voir un rappel en Section 3.3.3) avec  $c_l = 1/n$  et donc  $v = \frac{\sum_{l=1}^n c_l^2}{4} = 1/4n$ . Posons  $W$  la variable aléatoire

$W = f(X_1, \dots, X_n)$ , l'inégalité de Mac Diarmid entraîne alors que pour tout  $w > 0$  :

$$\mathbb{P}(W - \mathbb{E}[W] \geq w) \leq \exp\left(-\frac{w^2}{2v}\right) = \exp(-2w^2n). \quad (7.62)$$

Finalement, par les équations (7.62) et (7.61), les inégalités suivantes sont vérifiées :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\delta_{r+1}^2(1, q, p^*) \leq \left(\mathbb{E}[W] + \sqrt{\frac{x_{r+1}}{2n}}\right)^2\right) &\geq \mathbb{P}\left(\delta_{r+1}(1, q, p^*) \leq \mathbb{E}[W] + \sqrt{\frac{x_{r+1}}{2n}}\right) \\ &\geq \mathbb{P}\left(W \leq \mathbb{E}[W] + \sqrt{\frac{x_{r+1}}{2n}}\right) \\ &\geq 1 - \exp\left(-2n \times \frac{x_{r+1}}{2n}\right) \\ &= 1 - e^{-x_{r+1}} \end{aligned}$$

On conclut en remarquant que par l'inégalité de Jensen, l'espérance de  $W$  est majorée par :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[W] &= \mathbb{E}\left[\left(\sum_{i=i_r+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{X_l=i} - p_i^*\right)^2\right)^{1/2}\right] \\ &\leq \frac{1}{n} \sqrt{\mathbb{E}\left[\sum_{i=i_r+1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \mathbb{I}_{X_l=i} - p_i^*\right)^2\right]} \\ &\leq \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*)}. \end{aligned}$$

Lorsque  $p^*$  est de support fini  $0, L^* - 1$  : Dans ce cas, de la même manière que dans le cas d'une inégalité moyenne, la quantité  $\delta_{r+1}(1, q, p^*)$  est majorée grâce au Lemme 47 et au Théorème 46 :

$$\begin{aligned} \delta_{r+1}(1, q, p^*) &\leq \left(\frac{C'_1 (\log(e(L^* - i_r)))^{1/2} \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_{\infty}}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_1 \log(e(L^* - i_r))}{n} + \right. \\ &\quad \left. \frac{7\sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_{\infty} \sqrt{2x_{r+1}}}}{\sqrt{n}} + \frac{2x_{r+1}}{n}\right) \times \mathbb{I}_{I_{r+1} \cap 0, L^* - 1 \neq \emptyset} \end{aligned} \quad (7.63)$$

avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x_{r+1}}$ .

**Conclusion** Le reste du calcul est effectué dans les deux cas de la même manière que dans le cas d'une inégalité oracle moyenne, grâce aux équations (7.60) et (7.53): avec probabilité supérieure à  $1 - e^{-x}$  les inégalités suivantes sont vraies :

$$\begin{aligned} M_{p^*}(t, q) &\leq t \left( \sum_{j=1}^r \left( E_j + \frac{7\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_{\infty} \sqrt{2x_j}}}{\sqrt{n}} + \frac{2x_j}{n} \right)^2 + E_{r+1}^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) + t \left( r \times \left( \frac{7\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_{\infty} \sqrt{2x_j}}}{\sqrt{n}} + \frac{2x_j}{n} \right)^2 + E_{r+1}^2 \right)^{1/2} \end{aligned}$$

avec  $E_{r+1}$  un majorant déterministe de  $\delta_{r+1}(1, q, p^*)$ . Dans le cas général cela donne, par l'équation (7.53) :

$$\begin{aligned}
 M_{p^*}(t, q) &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) \\
 &\quad + t \left( r \times \left( \frac{7\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty \sqrt{2(x + \log(r+1))}}}{\sqrt{n}} + \frac{2(x + \log(r+1))}{n} \right)^2 \right. \\
 &\quad \left. + \left( \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*)} + \sqrt{\frac{x_{r+1}}{2n}} \right)^2 \right)^{1/2} \\
 &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) + t f(x, n, r, p^*) + \frac{t}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=i_r+1}^{\infty} p_i^*(1-p_i^*) \right)^{1/2}
 \end{aligned}$$

Dans le cas où  $p^*$  est de support fini, l'équation (7.63) donne :

$$\begin{aligned}
 M_{p^*}(t, q) &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) \\
 &\quad + t\sqrt{r+1} \left( \frac{7\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty \sqrt{2(x + \log(r+1))}}}{\sqrt{n}} + \frac{2(x + \log(r+1))}{n} \right) \\
 &\quad + \left( \frac{C'_1 (\log(e(L^* - i_r)))^{1/2} \sqrt{\|p_{I_{r+1}}^*\|_\infty}}{\sqrt{n}} + \frac{C''_1 \log(e(L^* - i_r))}{n} \right) \\
 &\leq \frac{C'_k t}{\sqrt{n}} K_1(q, p^*) + \frac{C''_k t}{n} K_2(q, p^*) + t f(x, n, r, p^*) + t R(q, p^*, n).
 \end{aligned}$$

## Calculs d'entropies à crochet

### Un premier résultat d'entropie

On montre le Lemme 47 par récurrence sur  $k$ . L'initialisation est analogue au Lemme B.3 de Flammarion et al. (2016) et nécessite le Lemme suivant :

**Lemme 52.** Soient  $L \in \mathbb{N}^*$ ,  $k \in \mathbb{N}^*$ ,  $B > 0$  et  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  l'ensemble suivant :

$$\mathcal{S}_L^{k,B} = \{p \text{ k-monotone, } \|p\|_\infty \leq B, \text{ supp}(p) \subset 0, L-1\} \quad (7.64)$$

Soit  $p^*$  une mesure discrète. Il existe une constante  $C$  absolue supérieure strictement à 1 telle que l'entropie à crochet de  $\mathcal{S}_L^{k,B}$  est majorée par :

$$\log(N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_2) \leq C^{(k+1)/2} L^{\frac{2k-1}{2k}} \left( \frac{B}{\varepsilon} \right)^{1/k}, \quad (7.65)$$

$$\log(N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq C^{(k+1)/2} L^{\frac{2k-1}{2k}} \left( \frac{\|p^*\|_\infty^{1/2} B}{\varepsilon} \right)^{1/k}. \quad (7.66)$$

De plus si  $q$  est la probabilité constante sur  $0, L-1$  alors l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\log(N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,q}) \leq C^{(k+1)/2} L^{\frac{k-1}{k}} \left( \frac{B}{\varepsilon} \right)^{1/k}. \quad (7.67)$$



Comme l'espace  $\mathcal{P}_L^k$  est inclus dans l'espace  $\mathcal{S}_L^{k,1}$  on en déduit le résultat immédiat suivant :

$$\log(N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{P}_L^k, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq C^{(k+1)/2} \sqrt{L}^{\frac{k-1}{k}} \left( \frac{\|p^*\|_{\infty}^{1/2} B}{\varepsilon} \right)^{1/k}. \quad (7.68)$$

Dans le cas des fonctions  $k$ -monotones continues sur  $\mathbb{R}^+$  une majoration analogue a été montrée par Gao et Wellner (2009) (voir le Théorème 49). Une idée naturelle est donc de se servir des résultats disponibles dans le cas continu. Malheureusement il n'est pas évident de déduire les résultats directement du cas continu au cas discret dès lors que  $k \geq 2$ . En effet si une fonction  $k$ -monotone discrétisée devient une suite  $k$ -monotone, il n'est pas facile en revanche de construire une fonction  $k$ -monotone passant par les points d'une suite  $k$ -monotone  $p$  ou des points arbitrairement proches de  $p$ . De plus les résultats du cas continu sont montrés pour des normes  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2}$  et  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^2(p^*)}$  tandis que ceux du cas discret sont montrés pour des normes  $\|\cdot\|_2$  ou  $\|\cdot\|_{2,p^*}$ . Dans le cas général il n'est pas simple d'établir une relation d'ordre entre ces normes.

Dans le cas  $k = 1$  néanmoins il a été possible de définir une bijection entre les espaces discrets et continus, et d'en déduire le résultat de l'équation (7.65). A la Section 7.4 nous présentons les difficultés à généraliser cette méthode pour  $k \geq 2$ .

*Proof.* Ce lemme se montre par récurrence sur  $k$ . Soit  $\mathcal{S}^{1,B}$  l'ensemble des fonctions discrètes décroissantes bornées par  $B$ . Dans le cas où  $k = 1$  on montre en fait le résultat plus fort suivant :

$$\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{S}^{1,B}, \|\cdot\|_{2,p}) \leq \frac{cB}{\varepsilon} \quad (7.69)$$

analogue du résultat de Van de Geer (1993) rappelé ci-dessous :

**Lemme 53** (Van de Geer, 1993). *Soient  $B > 0$  et  $f$  une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathbb{R}^+$ . Soit  $\mathcal{M}^B(\mathbb{R}^+)$  l'ensemble des fonctions décroissantes et positives sur  $\mathbb{R}^+$ . Il existe une constante  $c > 0$  telle que pour tout  $\delta > 0$  l'inégalité suivante soit vraie :*

$$\log N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{M}^B(\mathbb{R}^+), \|\cdot\|_{\mathcal{L}_2(f)}) \leq \frac{cB}{\delta}. \quad (7.70)$$

Ce résultat est plus général que celui énoncé à l'équation (7.66) puisqu'il ne dépend pas du support.

**Initialisation** Soit  $p \in \mathcal{S}^{1,B}$ . On peut prolonger  $p$  en une fonction  $\bar{p}$  constante par morceaux, continue à droite sur  $\mathbb{R}^+$  et valant  $p(i)$  en les entiers  $i$ . La fonction  $\bar{p}$  est bornée par  $B$ , positive et décroissante, ainsi la fonction  $p \mapsto \bar{p}$  est bien définie de  $\mathcal{S}^{1,B}$  dans  $\mathcal{M}_1^B(\mathbb{R}^+)$  et injective.

Par le résultat de Van de Geer (1993) il existe un  $\varepsilon$ -crochet  $\bar{\mathcal{B}}$  de  $\mathcal{M}_1^B(\mathbb{R}^+)$  pour la norme  $\|\cdot\|_{\mathcal{L}_2(\bar{p})}$  de longueur  $N = \exp\left(\frac{cB}{\varepsilon}\right)$ . Pour tout élément  $(\bar{f}_-, \bar{f}_+)$  de ce crochet on note  $(\bar{f}'_-, \bar{f}'_+)$  la version constante par morceau *intérieure* de cet élément. En d'autres termes  $\bar{f}'_-$  et  $\bar{f}'_+$  sont les fonctions constantes par morceaux entre deux entiers consécutifs et continue à droite telles que pour tout  $i \in \mathbb{N}$  :

$$\begin{aligned} \bar{f}'_-(i) &= \max_{x \in [i, i+1]} \bar{f}_-(x) \\ \bar{f}'_+(i) &= \min_{x \in [i, i+1]} \bar{f}_+(x) \end{aligned}$$

On note également  $(f'_-, f'_+)$  la version discrétisée de  $(\bar{f}'_-, \bar{f}'_+)$  c'est-à-dire la suite telle que pour tout entier positif  $i$ :

$$\begin{aligned} f'_-(i) &= \bar{f}'_-(i) \\ f'_+(i) &= \bar{f}'_+(i). \end{aligned}$$

La Figure 7.3 illustre la construction des  $(f'_-, f'_+)$  :

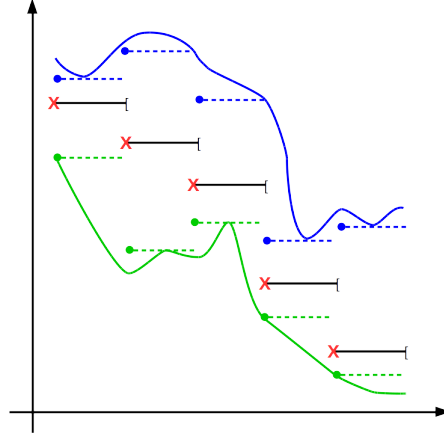


Figure 7.3: Construction des crochets pour l'ensemble des fonctions 1-monotones discrètes. En "X", la densité  $p$ , en "—" la densité  $\bar{p}$ , en "—" la fonction  $\bar{f}_-$ , en "—" la fonction  $\bar{f}_+$ , en "- -" la fonction  $\bar{f}'_-$  et en "- -" la fonction  $\bar{f}'_+$

Montrons que l'ensemble  $\mathcal{B}$  des  $(f'_-, f'_+)$  est un  $\varepsilon$ -crochet de  $\mathcal{S}^{1,B}$  pour la norme  $\|\cdot\|_{2,p}$ . Tout d'abord il s'agit bien d'un crochet puisque si  $g \in \mathcal{S}^{1,B}$  alors  $\bar{g} \in \mathcal{M}_1^B(\mathbb{R}^+)$ . Ainsi il existe  $(\bar{f}_-, \bar{f}_+)$  dans  $\bar{\mathcal{B}}$  tel que  $\bar{f}_- \leq \bar{g} \leq \bar{f}_+$ . De plus comme  $\bar{g}$  est constante par morceaux entre deux entiers consécutifs il est également vrai que  $\bar{f}'_- \leq \bar{g} \leq \bar{f}'_+$  et donc que  $f'_- \leq g \leq f'_+$ . Enfin il s'agit bien d'un  $\varepsilon$ -crochet puisque :

$$\begin{aligned} \|f'_+ - f'_-\|_{2,p}^2 &= \sum_{l=0}^{+\infty} (f'_+(l) - f'_-(l))^2 p(l) \\ &= \int_0^{\infty} (\bar{f}'_+ - \bar{f}'_-)^2(t) \bar{p}(t) dt \\ &\leq \int_0^{\infty} (\bar{f}_+ - \bar{f}_-)^2(t) \bar{p}(t) dt \\ &\leq \|\bar{f}_+ - \bar{f}_-\|_{\mathcal{L}^2(\bar{p})}^2 \\ &\leq \varepsilon^2. \end{aligned}$$

On a donc l'égalité (7.69). L'inégalité (7.65) s'obtient en remarquant que si  $q$  est la probabilité constante sur  $0, L-1$ , c'est-à-dire  $q \equiv \frac{1}{L}$ , alors pour tout ensemble de fonction  $\mathcal{F}$  sur  $0, L-1$ :

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_2) = N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}, \mathcal{F}, \|\cdot\|_{2,q} \right) \quad (7.71)$$

Ainsi dans le cas où  $\mathcal{F} = \mathcal{S}_L^{1,B}$  :

$$\log \left( N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{S}_L^{1,B}, \|\cdot\|_2 \right) \right) \leq \frac{cB}{\varepsilon/\sqrt{L}} = \frac{c\sqrt{L}B}{\varepsilon}.$$

La seconde inégalité du Lemme est due au fait que pour toute probabilité  $p^*$  et pour tout ensemble de fonctions  $\mathcal{F}$ , l'inégalité suivante est vérifiée :

$$N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\|p^*\|_{\infty}^{1/2}}, \mathcal{F}, \|\cdot\|_2 \right) \quad (7.72)$$

**Itération** : Supposons le résultat vrai pour un  $k$  et montrons-le pour  $k + 1$ . Il suffit en fait de montrer l'inégalité (7.67). L'équation (7.65) se déduit alors de l'équation (7.71) tandis que l'équation (7.66) se déduit de l'équation (7.72).

Énonçons le lemme suivant dont la preuve se trouve page 147 :

**Lemme 54.** *Soit  $L$  un entier positif. On suppose que  $\mathcal{F}$  est un ensemble de fonctions discrètes à support dans  $0, L - 1$  dont l'entropie à crochet en norme 1 est majorée de la sorte :*

$$N(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_1) \leq e^{\Phi(\varepsilon)}$$

pour une certaine fonction  $\Phi$ . Soit  $\mathcal{G} = \{g/g(i) = \sum_{l=i}^{L-1} f(l), f \in \mathcal{F}\}$  l'ensemble des primitives de  $\mathcal{F}$ . Alors il existe une constante  $C$  (indépendante des ensembles  $\mathcal{F}$  et  $\mathcal{G}$ ) telle que l'inégalité suivante sur l'entropie à crochet de  $\mathcal{G}$  est vérifiée :

$$N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\Phi(\varepsilon)}, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,p} \right) \leq e^{C\Phi(\varepsilon)}.$$

pour toute probabilité  $p$ .

Revenons à la preuve du Lemme 52. On rappelle que  $q$  est la probabilité constante sur  $0, L - 1$ . Par hypothèse de récurrence, l'entropie à crochet en norme  $\|\cdot\|_{2,q}$ , pour  $\mathcal{F} = \mathcal{S}_L^{k,B}$ , est majorée par :

$$N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_{2,q} \right) \leq \exp \left( C^{(k+1)/2} L^{\frac{k-1}{k}} \left( \frac{B}{\varepsilon} \right)^{1/k} \right). \quad (7.73)$$

Or pour tout ensemble de fonctions  $\mathcal{F}$  discrète sur  $0, L - 1$  :

$$N(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_1) \leq N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{L}, \mathcal{F}, \|\cdot\|_{2,q} \right). \quad (7.74)$$

En effet supposons que  $\mathcal{B}$  soit un  $(\varepsilon/L)$ -crochet de  $\mathcal{F}$  pour la norme  $\|\cdot\|_{2,q}$ . Soit  $g$  une fonction de  $\mathcal{F}$ , il existe  $(f_-, f_+) \in \mathcal{B}$  tel que  $f_- \leq g \leq f_+$ . Posons  $f = \frac{f_- + f_+}{2}$ , les inégalités suivantes sont alors vérifiées :

$$\begin{aligned} \|g - f\|_1 &\leq \sum_{i=0}^{L-1} \left| g(i) - \frac{f_-(i) + f_+(i)}{2} \right| \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{L-1} |g(i) - f_-(i)| + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{L-1} |g(i) - f_+(i)| \\ &\leq \sum_{i=0}^{L-1} |f_+(i) - f_-(i)| \times \frac{\sqrt{q(i)}}{\sqrt{q(i)}}. \end{aligned}$$

Ainsi par l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\|g - f\|_1 \leq \|g - f\|_{2,q} \times \sqrt{\sum_{i=0}^{L-1} \frac{1}{q(i)}} = L \|f_+ - f_-\|_{2,q} \leq \varepsilon.$$

L'ensemble  $\{f = \frac{f_- + f_+}{2}, (f_-, f_+) \in \mathcal{B}\}$  est donc un  $\varepsilon$ -réseau de  $\mathcal{F}$  pour la norme  $\|\cdot\|_1$ , et l'équation (7.74) est donc vérifiée.

Ainsi par les inégalités (7.74) et (7.73), l'entropie métrique en norme  $\|\cdot\|_1$  est majorée de la sorte :

$$N\left(\varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_1\right) \leq \exp\left(C^{(k+1)/2} L \left(\frac{B}{\varepsilon}\right)^{1/k}\right).$$

On pose alors  $\Phi(\varepsilon)$  ainsi :

$$\Phi(\varepsilon) = C^{(k+1)/2} L \left(\frac{B}{\varepsilon}\right)^{1/k} := \frac{D}{\varepsilon^{1/k}}.$$

On a donc  $N(\varepsilon, \mathcal{S}_L^{k,B}, \|\cdot\|_1) \leq e^{\Phi(\varepsilon)}$ , ainsi par le lemme 54 avec  $q$  la probabilité constante sur  $0, L-1$  :

$$N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon^{1+1/k}}{D}, \mathcal{S}_L^{k+1,B}, \|\cdot\|_{2,q} \right) \leq \exp\left(C \times \frac{D}{\varepsilon^{1/k}}\right), \quad (7.75)$$

ce qui donne en posant  $\delta = \frac{\varepsilon^{1+1/k}}{D}$  (soit  $\varepsilon = (D\delta)^{k/(k+1)}$ ) :

$$\begin{aligned} N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{S}_L^{k+1,B}, \|\cdot\|_{2,q} \right) &\leq \exp\left(\frac{CD}{((D\delta)^{\frac{k}{k+1}})^{1/k}}\right) \\ &\leq \exp\left(\frac{CD^{\frac{k}{k+1}}}{\delta^{1/(k+1)}}\right) \\ &\leq \exp\left(\frac{C(LB^{1/k})^{\frac{k}{k+1}}}{\delta^{1/(k+1)}}\right) \\ &\leq \exp\left(C^{(k+2)/2} L^{\frac{k}{k+1}} \left(\frac{B}{\delta}\right)^{1/(k+1)}\right). \end{aligned}$$

L'équation (7.67) est donc vérifiée à l'ordre  $k+1$ . □

### Preuve du Lemme 54 : récurrence dans le calcul d'entropie

L'hypothèse signifie qu'il existe un  $\varepsilon$ -réseau pour la norme  $\|\cdot\|_1$  de  $\mathcal{F}$  qui contient  $e^{\Phi(\varepsilon)}$  points. On note  $\{f_h\}_{1 \leq h \leq e^{\Phi(\varepsilon)}}$  les centres de ce réseau. Construisons un  $(\varepsilon/\Phi(\varepsilon))$ -crochet de  $\mathcal{G}$ . Soit  $g \in \mathcal{G}$ . Il existe une fonction  $f \in \mathcal{F}$  de maximum de support inférieur à  $L-1$  telle que  $g$  est la primitive de  $f$  :

$$\forall i, g(i) = \sum_{l=i}^{L-1} f(l).$$

Il existe alors  $h$  tel que  $f$  vérifie :

$$\begin{cases} \|f - f_h\|_1 \leq \varepsilon \\ f = (f - f_h)_+ - (f_h - f)_+ + f_h \end{cases}$$

En d'autres termes si l'on pose  $\mathcal{G}_h^+$  et  $\mathcal{G}_h^-$  les ensembles de fonctions suivants :

$$\mathcal{G}_h^+ = \left\{ g/g(i) = \sum_{l=i}^{L-1} (f - f_h)_+(l), f \in \mathcal{F}, \|f - f_h\|_1 \leq \varepsilon \right\}$$

$$\mathcal{G}_h^- = \left\{ g/g(i) = \sum_{l=i}^{L-1} (f_h - f)_+(l), f \in \mathcal{F}, \|f - f_h\|_1 \leq \varepsilon \right\}$$

alors  $\mathcal{G} \subset \bigcup_{h=1}^{e^{\Phi(\varepsilon)}} \left( \mathcal{G}_h^+ - \mathcal{G}_h^- + \sum_{l=1}^{L-1} f_h(l) \right)$ . De plus  $\mathcal{G}_h^+$  et  $\mathcal{G}_h^-$  contiennent des fonctions positives, monotones et bornées par  $\varepsilon$ , l'inégalité (7.69) donne ainsi l'existence d'un  $(\varepsilon/\Phi(\varepsilon))$ -crochet de  $\mathcal{G}_h^+ - \mathcal{G}_h^-$  contenant  $M$  points pour la norme  $\|\cdot\|_{2,p}$ , pour toute probabilité  $p$ , où  $M$  est défini par :

$$M = \exp\left(\frac{c\varepsilon}{\varepsilon/\Phi(\varepsilon)}\right) = \exp(c\Phi(\varepsilon))$$

avec  $c$  une constante. On note  $[\underline{\chi}_l^h, \bar{\chi}_l^h]$  pour  $l \leq M$  les bornes de ce crochet. On peut alors poser l'ensemble suivant d'intervalles :

$$\mathcal{B} = \left\{ \left[ \underline{\chi}_l^h + \sum_{j=1}^{L-1} f_h(j), \bar{\chi}_l^h + \sum_{j=1}^{L-1} f_h(j) \right]_{h \leq e^{\Phi(\varepsilon)}, l \leq M} \right\}$$

L'ensemble  $\mathcal{B}$  est un  $(\varepsilon/\Phi(\varepsilon))$ -crochet de  $\mathcal{G}$  pour la norme  $\|\cdot\|_{2,p}$  et contient  $e^{\Phi(\varepsilon)} \times M = e^{(c+1)\Phi(\varepsilon)} = e^{C\Phi(\varepsilon)}$  éléments. Ainsi l'inégalité suivante pour l'entropie est vérifiée :

$$N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\Phi(\varepsilon)}, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,p} \right) \leq e^{C\Phi(\varepsilon)}$$

### Preuve du Lemme 47 : Entropies sur une boule

On commence par énoncer ce lemme qui est l'exact analogue du Lemme B.2 dans le papier de Flammarion et al. (2016) :

**Lemme 55.** *Soient  $\mathcal{C}_1 \dots \mathcal{C}_m$  des cônes convexes et soit  $\mathcal{C} = \mathcal{C}_1 \times \dots \times \mathcal{C}_m$  le produit de ces cônes. Soit  $a = (a_1, \dots, a_j) \in \mathcal{C} \cap (-\mathcal{C})$ . Alors pour tout  $t > 0$  et pour tout  $0 < \varepsilon \leq t$  on a l'inégalité suivante :*

$$\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{C} \cap \mathcal{B}_2(a, t), \|\cdot\|_2) \leq m \log \frac{Ct}{\varepsilon} + \sum_{j=1}^h \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \mathcal{C}_j \cap \mathcal{B}_2(a_j, t), \|\cdot\|_2 \right)$$

où  $C$  est une constante universelle strictement positive.

La preuve est la même que celle du Lemme B.2 de Flammarion et al. (2016) en remplaçant les  $\varepsilon$ -réseaux par des  $\varepsilon$ -crochets, elle est donc omise. Montrons maintenant le Lemme 47. On se fixe un  $0 < \varepsilon \leq t$ . Soit  $L$  la longueur de l'intervalle  $I$ . L'espace  $\mathcal{F}_I^k(t, q)$  s'injectant canoniquement dans l'espace  $\mathcal{F}_{0, L-1}^k(t, q)$  on peut supposer sans perdre de généralité que  $I = 0, L - 1$ .

**Le cas  $k = 1$  :** Ici  $I$  la densité  $q$  est constante,  $q \equiv \bar{q}$ , et  $\mathcal{F}_I^1(t, q) = \{f = (p - q)_I, p \in \mathcal{P}^1, \|(p - q)_I\|_2 \leq t\}$ .

Le résultat est immédiat pour  $L = 1$ , supposons que  $L \geq 2$ . Soit  $L' = \lfloor \frac{L}{2} \rfloor$  la partie entière de  $L/2$ . On note alors pour tout sous-ensemble  $J \subset I$ ,  $\tilde{\mathcal{F}}_J^1(t, q)$  l'ensemble suivant :

$$\tilde{\mathcal{F}}_J^1(t, q) = \{f_J; f \in \mathcal{F}_I^1(t, q)\}.$$

Comme les entropies à crochet des espaces  $\tilde{\mathcal{F}}_{L', L-1}^1(t, q)$  et  $\tilde{\mathcal{F}}_{0, L'-1}^1(t, q)$  sont équivalentes, l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{F}_{0, L-1}^1(t, q), \|\cdot\|_2) \leq 2 \log N_{[\cdot]}\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}, \tilde{\mathcal{F}}_{0, L'-1}^1(t, q), \|\cdot\|_2\right) \quad (7.76)$$

Calculons le membre de droite. Soit  $h$  l'unique entier tel que  $2^h > L' - 1 \geq 2^{h-1}$ . On note, pour  $j = 1 \dots h$ ,  $A_j$  l'ensemble suivant :  $A_j = L', L-1 \cap 2^{j-1} - 1, 2^j - 1$ . Alors  $0, L' - 1 = \bigcup_{j=1}^h A_j$  est une partition de  $L', L-1$  en  $h$  morceaux et on note  $m_j$  le cardinal de  $A_j$ . L'ensemble  $\tilde{\mathcal{F}}_{L', L-1}^1(t, q)$  s'injecte canoniquement, et de manière isométrique, dans l'ensemble  $\tilde{\mathcal{F}}_{A_1}^1(t, q) \times \dots \times \tilde{\mathcal{F}}_{A_h}^1(t, q)$  d'où l'inégalité suivante par le Lemme 55 :

$$\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \tilde{\mathcal{F}}_{L', L-1}^1(t, q), \|\cdot\|_2) \leq h \log \frac{C_1 t}{\varepsilon} + \sum_{j=1}^h \log N_{[\cdot]}\left(\frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1(t, q), \|\cdot\|_2\right) \quad (7.77)$$

avec  $C_1$  une constante absolue. Soit  $j \in 1 \dots h$  fixé, on va calculer l'entropie à crochet sur  $\tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1$ .

Par le Lemme 52 l'inégalité suivante est vérifiée pour  $B > 0$ , et  $1 \leq j \leq h$ , l'espace  $\mathcal{S}_{m_j}^{1, B}$  étant défini en (7.64) :

$$\log N_{[\cdot]}\left(\frac{\varepsilon}{3}, \mathcal{S}_{m_j}^{1, B}, \|\cdot\|_2\right) \leq \frac{C_2 B \sqrt{m_j}}{\varepsilon}, \quad (7.78)$$

avec  $C_2$  une constante absolue.

On va montrer que l'espace  $\tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1$  peut s'injecter isométriquement dans un  $\mathcal{S}_{m_j}^{1, B}$ .

Soit  $f \in \tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1$ . La fonction  $f$  s'écrit  $f = (p - q)_{A_j}$  avec  $p \in \mathcal{S}^1$ ,  $q \equiv \bar{q}$  constante sur  $I$ , et telles que  $\|(p - q)_I\|_2 \leq t$ . En particulier  $p - q$  est également décroissante sur  $I$ . Soit  $i \in L', L-1$ . Il y a deux cas possibles :

- Soit  $|p_l - q_l| \geq |p_i - q_i|$  pour  $0 \leq l \leq i$ .
- Soit  $|p_l - q_l| \geq |p_i - q_i|$  pour  $i \leq l \leq L-1$ .

Le premier cas implique que :

$$t^2 \geq \sum_{l=0}^{L-1} (p_l - q_l)^2 \geq \sum_{l=0}^i (p_l - q_l)^2 \geq (i+1) \times (p_i - q_i)^2$$

et donc que  $|p_i - q_i| \leq \frac{t}{\sqrt{i+1}}$ .

Le second cas implique de même que  $t^2 \geq (L-i) \times (p_i - q_i)^2$ . Comme  $i \geq L'$  on a  $L-i \geq i+1$  et donc également  $|p_i - q_i| \leq \frac{t}{\sqrt{i+1}}$ .

Ainsi pour tout  $i \in A_j$ ,  $|f_i| \leq \frac{t}{\sqrt{i}}$  et donc  $\max_{i \in A_j} |f_i| \leq t/\sqrt{2^{j-1}}$ . La fonction  $f \mapsto f + t/\sqrt{2^{j-1}}$  est donc une injection isométrique de  $(\tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1(t, q), \|\cdot\|_2)$  dans  $(\mathcal{S}_{m_j}^{1,B}, \|\cdot\|_2)$  avec  $B = \frac{2t}{\sqrt{2^{j-1}}}$ . D'où, par (7.78) :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \mathcal{S}_{m_j}^{1,B}, \|\cdot\|_2 \right) \quad (7.79)$$

$$\leq \frac{C_2 \times (2t/\sqrt{2^{j-1}}) \times \sqrt{m_j}}{\varepsilon} = \frac{2C_2 t}{\varepsilon}. \quad (7.80)$$

Et finalement, les équations (7.76), (7.77) et (7.80) donnent :

$$\log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{F}_I^1(t, q), \|\cdot\|_2) \leq 2h \log \frac{\sqrt{2}C_1 t}{\varepsilon} + \frac{4\sqrt{2}hC_2 t}{\varepsilon} \leq \frac{Ct \log(eL)}{\varepsilon} \quad (7.81)$$

avec  $C$  une constante absolue, car  $h \leq 1 + \log_2 L$ . Ainsi pour tout mesure finie  $p^*$ , par l'équation (7.72), l'inégalité suivante est également vérifiée :

$$\log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{F}_I^1(t, q), \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq \frac{Ct \log(eL) \sqrt{\|p^*\|_\infty}}{\varepsilon} \quad (7.82)$$

**Le cas  $k \geq 2$  :** Supposons le théorème vrai à l'ordre  $k-1$  et montrons-le à l'ordre  $k$ . Soit  $q$  une séquence  $k$ -monotone n'admettant pas de  $k$ -nœud sur  $I \setminus \{L-1\}$ . La fonction  $q$  admet une écriture dans la base de splines de la forme suivante :  $q(i) = \sum_{l=0}^{\infty} \pi_l Q_l^k$  avec  $\pi_l = 0$  si  $l \in I \setminus \{L-1\}$ . Alors la propriété de récurrence (4.8) vérifiée par les  $Q_l^k$  donne

$$q'(i) = \sum_{l=1}^{\infty} \pi_l (-Q_l^k(i+1) + Q_l^k(i)) = \sum_{l=1}^{\infty} \pi_l Q_l^{k-1}(i) \quad (7.83)$$

donc  $q'$  est une fonction  $(k-1)$ -monotone ne possédant pas de  $(k-1)$ -nœud sur  $l \in I \setminus \{L-1\}$ .

Soit  $f \in \mathcal{F}_I^k(t, q)$ . La fonction  $f$  admet une écriture de la forme  $f = (p - q)_I$  avec  $p = \sum_{l=0}^{\infty} \pi_l Q_l^k$ . On note également  $p'(i) = -p(i+1) + p(i)$  la dérivée de  $p$ , qui est  $(k-1)$ -monotone. On pose alors  $f' = (p' - q')_{I \setminus \{L-1\}}$ , cette fonction est la forme tronquée d'une fonction  $(k-1)$ -monotone et vérifie :

$$\begin{aligned} \|f'\|_2 &= \left( \sum_{i=0}^{L-2} (p(i) - p(i+1) - q(i) + q(i+1))^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \left( \sum_{i=0}^{L-2} (p(i) - q(i))^2 \right)^{1/2} + \left( \sum_{i=1}^{L-1} (p(i) - q(i))^2 \right)^{1/2} \\ &\leq 2\|(p - q)_I\|_2 \\ &\leq 2t \end{aligned}$$

Ainsi  $f' \in \mathcal{F}_{I \setminus \{L-1\}}^{k-1}(2t, q')$ . De plus  $f$  et  $f'$  sont liées par la relation suivante :

$$\forall i \in I, f(i) = f(L-1) + \sum_{l=i}^{L-2} f'(l).$$

Posons les ensembles suivants :

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \left\{ g(i) = \sum_{l=i}^{L-2} g'(l), g' \in \mathcal{F}_{I \setminus \{L-1\}}^{k-1}(2t, q') \right\} \\ \mathcal{H} &= \{ f(L-1), f \in \mathcal{F}_I^k(t, q) \}. \end{aligned}$$

Comme  $\mathcal{F}_I^k(t, q) \subset \mathcal{G} + \mathcal{H}$  et on obtient l'inégalité suivante :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq \log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{G}, \|\cdot\|_2) + \log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{H}, \|\cdot\|_2) \leq 2 \log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{G}, \|\cdot\|_2) \quad (7.84)$$

Majorons la quantité  $\log N_{[\cdot]} (\varepsilon, \mathcal{G}, \|\cdot\|_2)$ .

1. **Si**  $k = 2$  : Par l'équation (7.81) la majoration suivante est vérifiée :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^1(2t, q'), \|\cdot\|_2 \right) \leq \frac{Ct \log(eL)}{\varepsilon},$$

avec  $C$  une constante absolue. De la même manière que l'on a montré l'inégalité (7.74), on peut montrer l'inégalité suivante pour tout ensemble  $\mathcal{F}$  de fonctions discrètes sur  $0, L - 1$  :

$$N(\varepsilon, \mathcal{F}, \|\cdot\|_1) \leq N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\sqrt{L}}, \mathcal{F}, \|\cdot\|_2 \right) \quad (7.85)$$

On en déduit alors :

$$N \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(2t, q'), \|\cdot\|_1 \right) \leq \frac{Ct\sqrt{L} \log(eL)}{\varepsilon} := \phi(\varepsilon).$$

Ainsi par le Lemme 54 :

$$N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\phi(\varepsilon)}, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,f} \right) \leq \exp(C' \phi(\varepsilon)),$$

pour toute probabilité  $f$  avec  $C'$  une constante absolue. En posant  $\delta = \frac{\varepsilon}{\phi(\varepsilon)} = \frac{\varepsilon^2}{D}$  on obtient :

$$N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,f}) \leq \exp \left( C' \times \frac{D}{\sqrt{\delta D}} \right) = \exp \left( C'' L^{1/4} \log(eL)^{1/2} \left( \frac{t}{\delta} \right)^{1/2} \right), \quad (7.86)$$

avec  $C''$  une constante absolue. L'équation (7.29) est donc montrée pour  $k = 2$ . En prenant  $f$  la densité constante sur  $0, L - 1$  on obtient, par l'équation (7.72) :

$$\log N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{G}, \|\cdot\|_2) \leq C'' L^{1/2} \left( \frac{t \log(eL)}{\delta} \right)^{1/2} \quad (7.87)$$

tandis que l'équation (7.28) se déduit de l'équation (7.72).

2. **Si**  $k > 2$  : Il suffit en fait de montrer l'équation (7.29). L'équation (7.27) se déduit alors de l'équation (7.71) tandis que l'équation (7.28) se déduit de l'équation (7.72).

Montrons l'inégalité (7.29) par récurrence. Le cas  $k = 2$  a été traité. Supposons le résultat vrai à l'ordre  $k - 1$ , c'est-à-dire :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(2t, q'), \|\cdot\|_{2,g} \right) \leq C \left( \frac{t \log(eL)}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{2k-3}{2k}}$$

avec  $C$  une constante absolue ne dépendant que de  $k$ , et  $g$  la probabilité constante sur  $I$ . Par l'inégalité (7.74) :

$$N \left( \varepsilon, \mathcal{F}_I^k(2t, q'), \|\cdot\|_1 \right) \leq C \left( \frac{t \log(eL)}{\varepsilon} \right)^{1/k} \times L^{\frac{2k-1}{2k}} := \phi(\varepsilon) := \frac{D}{\varepsilon^{1/k}}.$$



Ainsi le Lemme 54 donne :

$$N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{\phi(\varepsilon)}, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,g} \right) \leq \exp(C' \phi(\varepsilon))$$

Avec  $C'$  une constante absolue. En posant  $\delta = \frac{\varepsilon}{\phi(\varepsilon)} = \frac{\varepsilon^{(k+1)/k}}{D}$  on obtient :

$$\begin{aligned} N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{G}, \|\cdot\|_{2,g}) &\leq \exp \left( C' \times \frac{D}{((D\delta)^{k/(k+1)})^{1/k}} \right) \\ &\leq \exp \left( C' \times \frac{D^{k/(k+1)}}{\delta^{1/(k+1)}} \right) \\ &\leq \exp \left( C'' \times \frac{(t \log(eL))^{\frac{1}{k} \times \frac{k}{k+1}} \times L^{\frac{2k-1}{2k} \times \frac{k}{k+1}}}{\delta^{1/(k+1)}} \right) \\ &\leq \exp \left( C'' L^{\frac{2(k+1)-3}{2(k+1)}} \times \left( \frac{t \log(eL)}{\delta} \right)^{1/(k+1)} \right) \end{aligned}$$

avec  $C''$  une constante absolue, ce qui clôt la preuve du Lemme.

### Preuve de la Section 7.3.3 : vérification des hypothèses du théorème de grandes déviations

Dans la Section 7.3.3 nous appliquons le Théorème 6.8 de Massart (2007) au cadre suivant :

- $X_1, \dots, X_n$  de même loi
- $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{I_j}^k(p^*, 1)$
- $\sigma = \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}$
- $\varepsilon = b = 1$
- $\delta_j(1, p^*) = \frac{1}{n} \sup_{f \in \mathcal{F}} (S_n(f))$  où  $S_n(f) = \sum_{i=1}^n [f(X_i) - \mathbb{E}[f(X_i)]]$ .

Nous montrons ici qu'il est légitime d'appliquer ce théorème dans notre cas. Il s'agit de montrer les deux points suivants :

1. (Sous-gaussianité) Pour tout  $f \in \mathcal{F}$ , pour tout entier  $h \geq 2$  l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E} \left[ |f(X_i)|^h \right] \leq \frac{h!}{2} \sigma^2 b^{h-2} = \frac{h! \|p_{I_j}^*\|_\infty}{2}$$

2. Pour tout entier  $h \geq 2$  et pour tout réel  $\delta > 0$  il existe un  $\delta$ -crochet de  $\mathcal{F}$  noté  $\mathcal{B}_\delta$  tel que pour tout  $(g_1, g_2) \in \mathcal{B}_\delta$  :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E} \left[ (g_2(X_i) - g_1(X_i))^h \right] \leq \frac{h!}{2} \delta^2 b^{h-2} = \frac{h! \delta^2}{2}$$

*Proof.* Soit  $f \in \mathcal{F}_{I_j}^k(p^*, t)$ . On montre le point 1. pour tout  $h \geq 2$  :

$$\mathbb{E} \left[ |f(X_1)|^h \right] = \sum_{l \in I_j} |f(l)|^h p_{I_j}^*(l) \leq \|p_{I_j}^*\|_\infty \leq \frac{h! \|p_{I_j}^*\|_\infty}{2}$$

ce qui clôt la preuve du point 1. De plus pour montrer le point 2. il suffit de montrer que le  $\delta$ -crochet  $B_\delta$  satisfait :

$$\forall i \in 1, N_\delta, \mathbb{E} \left[ \left( \underline{f}_i(X_1) - \bar{f}_i(X_1) \right)^2 \right] \leq \delta^2. \quad (7.88)$$

Ainsi l'hypothèse 2. du Théorème de Massart est une hypothèse de majoration de l'entropie de  $\mathcal{F}_{I_j}^k(p^*, t)$  pour une norme  $\|\cdot\|_{2, p^*}$ .  $\square$

### Preuve du Théorème 45 : formulation variationnelle du problème

On commence par montrer l'existence et l'unicité du maximum de la fonction  $F_q$ . Soit  $t_c = \inf_{p \in \mathcal{P}^k} \|p - q\|_2$ , la distance entre  $q$  et l'ensemble  $\mathcal{P}^k$  des probabilités  $k$ -monotones. Alors les quantités  $M_q(t)$  et  $F_q(t)$  sont finies si et seulement si  $t_c \leq t$ . De plus  $\lim_{t \rightarrow \infty} F_q(t) = -\infty$ . Si l'on montre la stricte concavité de la fonction  $F_q$ , l'existence et l'unicité de son maximum sera démontrée.

Soient  $s$  et  $t$  deux réels positifs tels que  $t_c \leq s < t$ . Par convexité stricte de la fonction carrée il s'agit de montrer que pour tout  $\lambda \in [0, 1]$  on a  $M_q(\lambda s + (1 - \lambda)t) \geq \lambda M_q(s) + (1 - \lambda)M_q(t)$ .

Soit  $\lambda \in [0, 1]$ . Il existe  $p_s$  et  $p_t$  dans  $\mathcal{P}^k$  telles que  $\|p_s - q\|_2 \leq s$  et  $\|p_t - q\|_2 \leq t$ . Alors si on pose  $p = \lambda p_s + (1 - \lambda)p_t$  par l'inégalité triangulaire on obtient  $\|p - q\|_2 \leq \lambda s + (1 - \lambda)t$ . De plus  $p \in \mathcal{P}^k$  par convexité de  $\mathcal{P}^k$ , on a donc les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned} M_q(\lambda s + (1 - \lambda)t) &= \sup_{\substack{p \in \mathcal{P}^k, \\ \|p - q\|_2 \leq \lambda s + (1 - \lambda)t}} \langle \tilde{p} - q, p - q \rangle \\ &\geq \sup_{\substack{p_t \in \mathcal{P}^k, \|p_t - q\|_2 \leq t \\ p_s \in \mathcal{P}^k, \|p_s - q\|_2 \leq s}} \langle \tilde{p} - q, \lambda p_s + (1 - \lambda)p_t - q \rangle \\ &\geq \lambda M_q(s) + (1 - \lambda)M_q(t) \end{aligned}$$

ce qui prouve la stricte concavité de  $M_q$  et donc l'existence et l'unicité de  $t^* = \underset{t}{\operatorname{argmax}} F_q(t)$ .

Il existe  $p_{t^*} \in \underset{p \in \mathcal{P}^k, \|p - q\|_2 \leq t^*}{\operatorname{argmax}} \langle \tilde{p} - q, p - q \rangle = M_q(t^*)$ . En particulier  $p_{t^*} \in \mathcal{P}^k$  et  $\|p_{t^*} - q\|_2 \leq t^*$ .

On va montrer que :

1.  $\|p_{t^*} - q\|_2 = t^*$ ,
2.  $p_{t^*} = \hat{p}^k$ .

Commençons par montrer le premier point. Soit  $t_0 = \|p_{t^*} - q\|_2$ , montrons que  $t_0 = t^*$ . Par définition de  $p_{t^*}$  on sait déjà que  $t_0 \leq t^*$ . Par l'absurde supposons que  $t_0 < t^*$ . Alors on aurait d'une part :

$$F_q(t^*) = M_q(t^*) - \frac{t^{*2}}{2} < M_q(t^*) - \frac{t_0^2}{2}.$$

D'autre part :

$$\begin{aligned}
F_q(t_0) &= \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t_0} \langle \tilde{p} - q, p - q \rangle - \frac{t_0^2}{2} \\
&\geq \langle \tilde{p} - q, p_{t^*} - q \rangle \\
&\geq \sup_{p \in \mathcal{P}^k, \|p-q\|_2 \leq t^*} \langle \tilde{p} - q, p - q \rangle - \frac{t_0^2}{2} \\
&= M_q(t^*) - \frac{t_0^2}{2}
\end{aligned}$$

Donc  $F_q(t^*) < F_q(t_0)$ . C'est absurde, on obtient donc  $t_0 = t^* = \|p_{t^*} - q\|_2$ .

On va désormais montrer que  $p_{t^*} = \tilde{p}^k$ . Par unicité du projeté orthogonal il s'agit de montrer que pour tout  $p \in \mathcal{P}^k$ , on a  $\|p_{t^*} - \tilde{p}\|_2 \leq \|p - \tilde{p}\|_2$ . Soit  $p \in \mathcal{P}^k$ , on a les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{p} - q, p - q \rangle - \frac{\|p - q\|_2^2}{2} &\leq \sup_{q \in \mathcal{P}^k, \|q-q\|_2 \leq \|p-q\|_2} \langle \tilde{p} - q, q - q \rangle - \frac{\|p - q\|_2^2}{2} \\
&= F_q(\|p - q\|_2) \\
&\leq F_q(t^*) \\
&= \langle \tilde{p} - q, p_{t^*} - q \rangle - \frac{t^{*2}}{2} \\
&= \langle \tilde{p} - q, p_{t^*} - q \rangle - \frac{\|p_{t^*} - q\|_2^2}{2}.
\end{aligned}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned}
\|p - \tilde{p}\|_2^2 &= \|p - q\|_2^2 + \|\tilde{p} - q\|_2^2 + 2 \langle p - q, \tilde{p} - q \rangle \\
&\geq \|p_{t^*} - \tilde{p}\|_2^2 + 2(\langle p - q, \tilde{p} - q \rangle - \langle p_{t^*} - q, \tilde{p} - q \rangle) \\
&\geq \|p_{t^*} - \tilde{p}\|_2^2.
\end{aligned}$$

On en conclut que  $p_{t^*} = \tilde{p}^k$  et en particulier que  $\|\tilde{p}^k - q\|_2 = t^*$ .

### Preuve du Lemme 50

Supposons la conjecture vraie. De même que dans la preuve du Lemme 47, pour  $k = 1$ , découpons l'ensemble  $\mathcal{F}_I^k(t, q)$  en produits de cônes  $\tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^k(t, q)$ . Dans la preuve du Lemme 47, la décroissance des fonctions de  $\mathcal{F}_I^1(t, q)$  était cruciale pour injecter les sous-ensembles  $\tilde{\mathcal{F}}_{A_j}^1(t, q)$  dans des ensembles  $\mathcal{S}_L^{1,B}$ . Pour  $k \geq 2$ , les fonctions de  $\mathcal{F}_I^k(t, q)$  ne sont pas décroissantes en général. En revanche on peut montrer qu'elles sont au maximum  $(k-1)$ -modales.

Posons alors, étant donné un sous-ensemble  $J \subset I$  :

$$\tilde{\mathcal{H}}_J^k(t, q) = \left\{ f_J; f \in \mathcal{F}_I^k(t, q) \text{ et } f \text{ est monotones sur } J \right\}.$$

On peut alors décomposer  $\mathcal{F}_I^k(t, q)$  de la sorte :

$$\mathcal{F}_I^k(t, q) \subset \bigcup_{I=I_1 \cup \dots \cup I_k, I_\ell \text{ disjoints}} \tilde{\mathcal{H}}_{I_1}^k(t, q) + \dots + \tilde{\mathcal{H}}_{I_k}^k(t, q)$$

d'où la majoration :

$$N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \tilde{\mathcal{F}}_I^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq \sum_{I=I_1 \cup \dots \cup I_k, I_\ell \text{ disjoints}} \prod_{\ell=1}^k N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \tilde{\mathcal{H}}_{I_\ell}^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \quad (7.89)$$

Etant donné un sous-ensemble  $J$  de  $I$ , calculons

$$N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \tilde{\mathcal{H}}_J^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right).$$

De même que dans la preuve du Lemme 47, pour  $k = 1$ , on peut supposer sans perdre de généralité que  $J = 0, L_J - 1$  et on pose  $L' = \lfloor L_J/2 \rfloor$ , puis  $A_j = L', L_J - 1 \cap 2^{j-1} - 1, 2^j - 1$  et  $m_j = \text{card}(A_j)$ . Par le Lemme 55 :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \tilde{\mathcal{H}}_{L', L_J-1}^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq h \log \frac{C_1 t}{\varepsilon} + \sum_{j=1}^h \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{H}}_{A_j}^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right)$$

avec  $C_1$  une constante positive. Fixons un entier  $j$ . Soit  $f \in \tilde{\mathcal{H}}_{A_j}^k(t, q)$ . Cette fonction s'écrit  $f = (p - q)_{A_j}$  avec  $p$  et  $q$  deux densités  $k$ -monotones et  $q$  ne possédant pas de  $k$ -nœud sur  $A_j$ . En particulier  $f$  est  $k$ -monotone sur  $2^{j-1}, L_J - 1$  et monotone sur  $0, L_J - 1$ . Par le même raisonnement que lors de la preuve du Lemme 47 l'espace  $\tilde{\mathcal{H}}_{A_j}^k(t, q)$  s'injecte donc isométriquement dans  $\mathcal{S}_{m_j}^{k,B}$  avec  $B = \frac{2t}{\sqrt{2^{j-1}}}$ . Ainsi par la conjecture :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{H}}_{A_j}^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \leq C_2 \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k}$$

avec  $C_2$  une constante positive, d'où :

$$\begin{aligned} \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{H}}_J^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) &\leq 2 \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\varepsilon}{3}, \tilde{\mathcal{H}}_{L', L_J-1}^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) \\ &\leq h \log \frac{2C_1 t}{\varepsilon} + 2hC_2 \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k} \\ &\leq C_3 \log(eL) \times \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k} \end{aligned}$$

avec  $C_3$  une constante positive. Finalement, l'équation (7.89) donne :

$$\begin{aligned} N_{[\cdot]} \left( \varepsilon, \tilde{\mathcal{F}}_I^k(t, q), \|\cdot\|_2 \right) &\leq \sum_{I=I_1 \cup \dots \cup I_k, I_\ell \text{ disjoints}} \exp \left( C_3 \log(eL) \times \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k} \right) \\ &\leq L^k \exp \left( C_4 \log(eL) \times \left( \frac{t}{\varepsilon} \right)^{1/k} \right) \end{aligned}$$

ce qui clôt la preuve du Lemme.

### Preuve du Théorème 51

Remplacer le Lemme 47 par le Lemme 50 modifie seulement le calcul des quantités déterministes  $E_j$  définies à l'équation (7.52) dans la preuve du Théorème principal. Elles vaudraient dans ce cas :

$$\begin{aligned} E_j &\leq \frac{27}{\sqrt{n}} \int_0^{\sigma_j} \left( C_k \log(eL_j) \left( \frac{t \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{u} \right)^{1/k} \right)^{1/2} du + \frac{4C_k \log(eL_j)}{n} \left( \frac{\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}}{\sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty}} \right)^{1/k} \\ &\leq \frac{C'_k \sqrt{\|p_{I_j}^*\|_\infty} \log(eL_j)}{\sqrt{n}} + \frac{C''_k \log(eL_j)}{n} \end{aligned}$$

avec  $C'_k$  et  $C''_k$  des constantes dépendant de  $k$ . L'énoncé du résultat principal est exactement le même, seule les quantités  $K_1(q, p^*)$  et  $K_2(q, p^*)$  sont remplacées par  $K'_1(q, p^*)$  et  $K'_2(q, p^*)$  respectivement.

# Chapter 8

## Quelques extensions

### Sommaire

---

<b>8.1</b>	<b>Le passage au paramétrique</b>	<b>158</b>
8.1.1	Une enveloppe pour la base de spline	158
8.1.2	Passage au paramétrique	159
<b>8.2</b>	<b>Entropies à crochet sur l'espace <math>\mathcal{P}^k</math></b>	<b>159</b>
8.2.1	Entropie en norme $\ \cdot\ _{2,p^*}$	159
8.2.2	Entropie en norme $\ \cdot\ _2$	160
<b>8.3</b>	<b>Lien avec le problème du nombre de points à coordonnées entières dans une boule</b>	<b>161</b>
<b>8.4</b>	<b>Preuve des lemmes</b>	<b>163</b>
8.4.1	Preuve du Lemme 56 : un équivalent pour l'enveloppe de la base de spline	163
8.4.2	Preuve du Lemme 57 : passage au paramétrique	165
8.4.3	Preuve du lemme 59 : un équivalent pour $L_k(\delta)$	166
8.4.4	Preuve du lemme 61 : un équivalent pour $L'_k(\delta)$	166

---

### Introduction

Ce chapitre regroupe des résultats d'entropie développés au cours de cette thèse de manière complémentaire au chapitre 7. Ils sont basés sur un premier résultat développé à la **Section 8.1** : le calcul d'inégalités entropiques sur les espaces de fonctions  $k$ -monotones à support dans  $\mathbb{N}$  peut se ramener à des calculs d'inégalités entropiques sur des espaces de dimension finie. Ce fait n'est pas surprenant, on retrouve l'idée que la contrainte de forme discrète est *quasi-paramétrique*, phénomène déjà évoqué en présence des vitesses en  $1/\sqrt{n}$  trouvées en Partie I. Dans la **Section 8.2** une majoration de l'entropie à crochet des ensembles de probabilités  $k$ -monotones discrètes sur l'ensemble  $\mathbb{N}$  tout entier est donnée, sous la Conjecture 1 définie au Chapitre précédent. Enfin la **Section 8.3** relie le problème d'entropie qui nous intéresse au problème de recherche du nombre de points à coordonnées entières dans une boule, un problème de dénombrement classique et difficile. Toutes les normes évoquées sont rappelées au Chapitre 3.

## Le passage au paramétrique

Le Lemme 57 est le résultat principal de cette section et permet de ramener les calculs d'entropie sur  $\mathbb{N}$  à des calculs en dimension finie. Ces calculs sont basés sur l'existence d'une enveloppe pour l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones discrètes, c'est-à-dire d'une fonction  $F_k$  (dont on connaît un équivalent) qui majore uniformément toutes les densités de  $\mathcal{P}^k$ . L'explicitation de cette enveloppe est donnée ci-dessous. Cette section est indépendante des autres et non-liée à la bibliographie.

### Une enveloppe pour la base de spline

Soit  $k \geq 2$ , soient  $j, l \in \mathbb{N}$ , on rappelle que la base de splines  $(Q_j^k)$  est définie par :

$$Q_j^k(l) = \frac{C_{j-l+k-1}^{k-1}}{C_{j+k}^k}$$

avec  $C_b^a$  le coefficient binomial  $C_b^a = b!/(a!(b-a)!)$ . En particulier  $Q_j^k(0) = \frac{k}{j+k}$ .

**Définition : [Enveloppe pour la base de spline]** On définit une enveloppe  $F_k$  sur cette base de splines en posant :

$$\forall l \in \mathbb{N}, F_k(l) = \sup_{j \in \mathbb{N}} Q_j^k(l) = \sup_{j \geq l} Q_j^k(l). \quad (8.1)$$

On a alors l'équivalent suivant pour cette enveloppe, ainsi qu'un encadrement :

**Lemme 56.** *Pour tout  $k \geq 2$ , soit  $F_k$  l'enveloppe définie par l'équation (8.1). Il existe un coefficient  $\alpha(k)$  défini par :*

$$\alpha(k) = \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1}\right) \quad (8.2)$$

tel que l'équivalent suivant est vérifié lorsque  $l$  tend vers l'infini :

$$F_k(l) = \frac{\alpha(k)}{l} + o\left(\frac{1}{l}\right).$$

Plus précisément pour tout  $l \in \mathbb{N}^*$  l'encadrement suivant est vérifié :

$$\frac{1}{l + l/k + \frac{k+1}{2}} \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1} - \frac{1}{l}\right) \leq F_k(l) \leq \frac{1}{1 + l - \frac{l}{k}} \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1} + \frac{1}{2l}\right).$$

De plus  $F_k(0) = 1$ .

La preuve de ce lemme est donnée dans la Section 8.4. Notons que la décroissance de la borne supérieure est en  $1/l$  quelque soit l'entier  $k$ . De plus, à  $l$  fixé, lorsque  $k$  augmente, cette borne supérieure est équivalente à :

$$\frac{\exp\left(-1 + \frac{1}{2l}\right)}{1 + l} \times \left(1 + \frac{1}{2k-1}\right).$$

La décroissance de l'enveloppe avec  $k$  est donc en  $1 + 1/(2k-1)$ . Plus  $k$  augmente et plus la différence entre la  $k$ -monotonie et la  $(k+1)$ -monotonie est faible. On retrouve la difficulté qui s'était posée au chapitre précédent : au contraire des problèmes non-paramétriques classiques caractérisés par des différences de vitesse de convergence d'ordres différents pour chaque modèle, dans le cas des modèles de  $k$ -monotonie l'ordre de la vitesse est toujours la même (en  $1/\sqrt{n}$ ) et seule la constante diffère, de manière de plus en plus insignifiante lorsque  $k$  augmente.

## Passage au paramétrique

Dans le cas de la  $k$ -monotonie discrète il est possible de ne considérer que des calculs d'entropie sur des espaces paramétriques de dimension connue et dépendante de  $k$ . En effet le lemme suivant est vérifié :

**Lemme 57** (Passage au paramétrique). *Soit  $\mathcal{F}^k$  un sous-espace de l'ensemble des probabilités discrètes  $k$ -monotones  $\mathcal{P}^k$  et soit  $p^*$  une densité discrète quelconque, non nécessairement  $k$ -monotone. Soit  $L_k(\delta)$  le plus petit entier  $L$  tel que :*

$$\sum_{l=L(\delta)}^{+\infty} F_k^2(l)p^*(l) \leq \frac{\delta^2}{2} \quad (8.3)$$

avec  $F_k$  l'enveloppe de l'ensemble  $\mathcal{P}^k$  définie à l'équation (8.1). Soit  $L \geq L_k(\delta)$  et soit  $\mathcal{G}^k = \{g = f\mathbb{I}_{0,L-1}, f \in \mathcal{F}^k\}$ . Supposons que  $\mathcal{B} = \{(\underline{f}_1, \bar{f}_1) \dots (\underline{f}_N, \bar{f}_N)\}$  soit un  $\frac{\delta}{\sqrt{2}}$ -crochet de  $\mathcal{G}^k$  pour la norme  $\|\cdot\|_{2,p^*}$ . Alors

$$\mathcal{B}' = \{(\underline{f}_1, \bar{f}_1 + \mathbb{I}_{L,+\infty}F_k) \dots (\underline{f}_N, \bar{f}_N + \mathbb{I}_{L,+\infty}F_k)\}$$

est un  $\delta$ -crochet de  $\mathcal{P}^k$  pour la norme  $\|\cdot\|_{2,p^*}$ . En conséquence :

$$\log N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq \log N_{[\cdot]}(\frac{\delta}{\sqrt{2}}, \mathcal{G}^k, \|\cdot\|_{2,p^*}) \quad (8.4)$$

La preuve de ce lemme est donnée dans la section 8.4. Ainsi le calcul de l'entropie de  $\mathcal{P}^k$  peut se ramener au calcul de  $\log N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{G}^k, \|\cdot\|_{2,p^*})$  avec  $\varepsilon = \delta/\sqrt{2}$ . Un résultat analogue peut être montré pour la norme  $\|\cdot\|_2$

## Entropies à crochet sur l'espace $\mathcal{P}^k$

### Entropie en norme $\|\cdot\|_{2,p^*}$

Le résultat suivant qui donne une majoration de l'entropie à crochet des espaces  $\mathcal{P}^k$  de fonctions  $k$ -monotones :

**Théorème 58** (Entropie, borne globale). *Soit  $k$  un entier supérieur à 2, soit  $p^*$  une fonction discrète positive de masse inférieure ou égale à 1, non nécessairement  $k$ -monotone. On suppose que la Conjecture 1 page 132 est vérifiée. Alors il existe une constante  $C_k$  telle que :*

$$N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq C_k \left( \frac{\|p^*\|_{\infty}^{1/2}}{\delta^{3/2}} \right)^{1/k}. \quad (8.5)$$

Notons que la vitesse de convergence du Théorème 58 ne présente plus la même vitesse en  $\delta$  que lorsque le support était fini (Lemme 52), le passage à un support infini a entraîné une vitesse en  $1/\delta^{3/2k}$  contre une vitesse en  $1/\delta^{1/k}$  dans le cas où le support était connu. Aucun résultat de cette nature n'a été montré à notre connaissance dans le cas continu lorsque  $k \geq 2$ . Dans le cas où  $k = 1$  rappelons que van de Geer (1993) a montré la borne suivante :

$$\log N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{M}^B(\mathbb{R}^+), \|\cdot\|_{\mathcal{L}_2(f)}) \leq \frac{cB}{\delta}.$$



*Proof.* On commence par ramener le calcul de cette entropie au calcul de l'entropie d'un espace de dimension finie grâce au lemme 57 :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_{2,p^*} \right) \leq \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\delta}{\sqrt{2}}, \mathcal{G}^k, \|\cdot\|_{2,p^*} \right)$$

où  $\mathcal{G}^k = \{g = f\mathbb{I}_{0,L-1}, f \in \mathcal{P}^k\}$  avec un  $L \geq L_k(\delta)$ . . Nous allons majorer cette entropie. On construit un crochet  $\mathcal{B} = \{(\underline{f}_1, \bar{f}_1) \dots (\underline{f}_N, \bar{f}_N)\}$  tel que pour tout  $i \in 1, N$  :

$$\sum_{l=0}^{L-1} \left( \underline{f}_i(l) - \bar{f}_i(l) \right)^2 p^*(l) \leq \varepsilon^2, \quad (8.6)$$

Supposons que l'on choisisse les  $\underline{f}_i, \bar{f}_i$  de sorte que  $\|\underline{f}_i - \bar{f}_i\|_\infty \leq \varepsilon$ , alors (8.6) sera vérifiée. Calculons un majorant pour  $L$ . Il est donné par le lemme suivant :

**Lemme 59.** Soient  $\delta > 0$ , et  $L_k(\delta)$ ,  $\alpha(k)$  définis en (8.3) et (8.2) respectivement. On pose  $\beta_k$  ainsi :

$$\beta_k := \sqrt{2} \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1 - 1/k} \right). \quad (8.7)$$

Alors  $L_k(\delta) \leq \max\left(\frac{\beta_k}{\delta}, 1\right)$ .

La preuve de ce lemme est donnée à la Section 8.4. Ainsi la majoration suivante pour l'entropie est établie :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_{2,p^*} \right) \leq \log N_{[\cdot]} \left( \frac{\delta}{\sqrt{2}}, \mathcal{S}_{L_k(\delta)}^{k,1}, \|\cdot\|_{2,p^*} \right)$$

où  $\mathcal{S}_{L_k(\delta)}^{k,1}$  désigne l'ensemble des fonctions discrètes  $k$ -monotones, à support dans  $0, L_k(\delta)$ , de norme infinie bornée par 1. En appliquant le résultat de la Conjecture :

$$\log(N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{S}_L^{k,1}, \|\cdot\|_{2,p^*}) \leq D_k \left( \frac{\|p^*\|_\infty^{1/2} \sqrt{L}}{\delta} \right)^{1/k}.$$

On trouve finalement :

$$\log N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_{2,p^*} \right) \leq D_k \left( \frac{\|p^*\|_\infty^{1/2} \beta_k}{\delta^{3/2}} \right)^{1/k}$$

□

## Entropie en norme $\|\cdot\|_2$

Le résultat précédent s'adapte à la norme  $\|\cdot\|_2$  plutôt que  $\|\cdot\|_{2,p^*}$  :

**Théorème 60.** Soit  $k$  un entier supérieur à 2. On suppose que la Conjecture 1 page 132 est vérifiée. Alors il existe une constante  $C_k$  telle que :

$$N_{[\cdot]} \left( \delta, \mathcal{P}^k, \|\cdot\|_2 \right) \leq \frac{C_k}{\delta^{2/k}}.$$

*Proof.* De la même manière que dans la preuve du Théorème 58 on commence par se ramener à un calcul d'entropie en dimension finie. Cette dimension que l'on note  $L'_k(\delta)$  est cette fois-ci définie comme le plus petit entier  $L$  qui vérifie :

$$\sum_{l=L}^{+\infty} F_k^2(l) \leq \frac{\delta^2}{2}. \quad (8.8)$$

Le lemme suivant donne un majorant pour  $L'(\delta)$  :

**Lemme 61.** *Soient  $\delta > 0$ , et  $L'$ .def,  $\alpha(k)$  définis en (8.3) et (8.2) respectivement. On pose  $\beta'_k$  ainsi :*

$$\beta'_k := \frac{2\alpha(k)^2 \exp(1)}{(1 - 1/k)^2}.$$

Alors  $L_k(\delta) \leq \max\left(\frac{\beta'_k}{\delta^2}, 1\right)$ .

La preuve de ce lemme est donnée dans la section 8.4. Le reste de la preuve est analogue à celle du Théorème 58.  $\square$

## Lien avec le problème du nombre de points à coordonnées entières dans une boule

Dans la preuve du Théorème 58, le Lemme 57 permet de se ramener au calcul de l'entropie à crochet sur l'ensemble

$$\mathcal{G}_t^k = \{g = f\mathbb{I}_{0,L-1}, \|f\|_2^2 \leq t^2, f \in \mathcal{P}^k\}. \quad (8.9)$$

L'entropie à crochet de l'espace  $\mathcal{G}_t^k$  a été majorée au Chapitre 7 par récurrence. L'initialisation est basée sur un résultat complexe de Van de Geer (1993) ne donnant pas d'indication sur la valeur de la constante multiplicative impliquée dans l'entropie à crochet. Nous détaillons ici une seconde heuristique de ce calcul, basée sur des considérations combinatoires.

Calculer l'entropie à crochet de l'espace  $\mathcal{G}_t^1$  revient à quadriller  $\mathcal{G}_t^1$  par des hypercubes de rayon  $\varepsilon$ . Or  $\mathcal{G}_t^1$  est inclus dans la boule  $\mathcal{L}_2$  de dimension  $L$  et de rayon  $t$ . L'entropie de  $\mathcal{G}_t^1$  est donc majorée par le logarithme du nombre d'hypercubes de rayon  $\varepsilon$  nécessaires pour quadriller une boule  $\mathcal{L}_2$  de dimension  $L$  et de rayon  $t$ . Notre problème est donc équivalent à majorer le nombre de points à coordonnées entières positives et décroissantes dans une boule  $\mathcal{L}_2$  de dimension  $L := L$  et de rayon  $R := t/\varepsilon = t\sqrt{2}/\delta$ . Notons  $V_{\searrow}(L, R)$  cette quantité et  $V(L, R)$  le nombre de points à coordonnées entières dans la boule euclidienne de dimension  $L$  et de rayon  $R$ . Une majoration naturelle consiste à faire intervenir le volume de la boule euclidienne :

$$V_{\searrow}(L, R) \leq \frac{1}{4^L} \times V(L, R) \leq \frac{1}{4^L} \times \text{vol}\left(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^L}(R + \sqrt{L}/2)\right). \quad (8.10)$$

Le coefficient  $1/4^L$  est dû au fait qu'on ne prend pas toute la boule mais seulement les points à coordonnées positives et décroissantes. En dimension 2 cette inégalité peut être illustrée par le dessin ci-dessous :

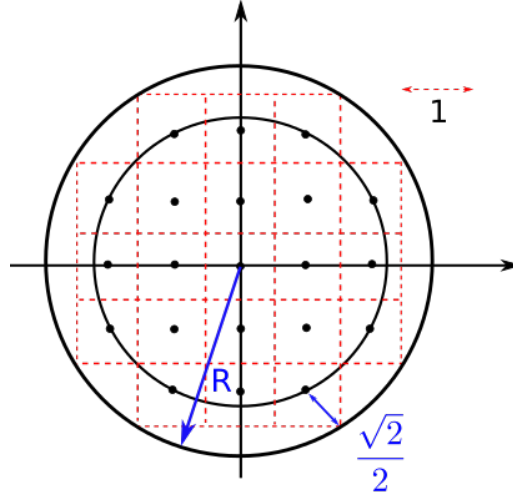


Figure 8.1: Majoration du nombre de points à coordonnées entières dans une boule  $\mathcal{L}_2$  de rayon  $R$  en dimension 2

Ce volume est égal à :

$$\text{vol}\left(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^L}(R + \sqrt{L}/2)\right) = \frac{\sqrt{\pi}^L (R + \sqrt{L}/2)^L}{4^L \Gamma(L/2 + 1)}$$

où  $\Gamma$  est la fonction Gamma d'Euler :  $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$ . Ainsi l'entropie de  $\mathcal{F}_t^1(p^*)$  peut se majorer grâce aux équivalents de la fonction  $\Gamma$ .

Une question légitime est alors de savoir si la seconde partie de l'inégalité (8.10) est une majoration fine du nombre de points à coordonnées entières dans une boule euclidienne de dimension  $R$ . Il s'agit d'une question de dénombrement, classique et délicate, qui constitue un sous-cas de la Loi de Weyl. Cette dernière lie le nombre de points à coordonnées entières avec le comportement du nombre de valeurs propres inférieures à  $R$  d'un opérateur pseudo-différentiel lié à un ensemble  $\Omega$ , ce nombre sera noté  $N(R, \Omega)$ . Pour plus de précisions le lecteur pourra consulter Frank et al. (2007). Ce problème a été initié par Debye puis partiellement résolu par Weyl, qui montra en 1911 que le nombre de points à coordonnées entières admettait la limite suivante :

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \frac{V(L, R)}{R^{L/2}} = \text{vol}\left(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^L}(1)\right)$$

ou de façon générale :

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} N(R, \Omega) = \frac{R|\Omega|}{4\pi} (1 + o(1)).$$

Cependant dans notre cadre le rayon  $R$  ne tend pas vers l'infini, nous avons donc besoin d'une majoration non-asymptotique. Pólya conjectura en 1961 que la majoration suivante issue des précédentes limites est vraie :

$$N(R, \Omega) \leq CR|\Omega|$$

pour la constante  $C = 1/4\pi$ , et donc en particulier que :

$$V(L, R) \leq 4\pi C \text{vol}\left(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^L}(1)\right) R^{L/2} = \text{vol}\left(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^L}(1)\right) R^{L/2}.$$

Ce résultat difficile resta longtemps sans réponse. La preuve d'une version affaiblie de la Conjecture de Pólya pour des constantes  $C$  supérieures à  $1/4\pi$  fut apportée successivement par Rozenblyum (1972), Lieb (1976) puis Metivier (1977). La meilleure borne connue

actuellement a été montrée par Li et Yau (1983), elle est inférieure à  $1/2\pi$ . La conjecture de Pólya est toujours ouverte, y compris pour la boule euclidienne. Hejhal (1976) estimait que cette conjecture était peut-être plus difficile encore que l'hypothèse de Riemann.

Sous la borne la plus forte montrée par Li et Yau (1983) nous trouvons finalement la borne suivante pour l'entropie à crochet :

$$N_{[\cdot]}(\delta, \mathcal{G}_t^1, \|\cdot\|_2) \leq \frac{1}{4^L} \times 2 \operatorname{vol} \left( \mathbb{B}_{\mathbb{R}^L} \left( \frac{t\sqrt{2}}{\delta} \right) \right).$$

## Preuve des lemmes

### Preuve du Lemme 56 : un équivalent pour l'enveloppe de la base de spline

On a les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} Q_j^k(l) &= \frac{(j-l+k-1)!}{(j-l)!(k-1)!} \times \frac{k!j!}{(j+k)!} \\ &= \frac{(j-l+k-1)!}{(j-l-1)!} \times \frac{j!}{(j+k)!} \times \frac{k}{j-l} \\ &= \frac{k}{j+k} \times \underbrace{\frac{j}{j+k-1} \times \frac{j-1}{j+k-2} \times \dots \times \frac{j-l+1}{j+k-l}}_{l \text{ termes}} \end{aligned}$$

d'où la majoration :

$$Q_j^k(l) \leq \frac{k}{j+k} \times \left( \frac{j}{j+k-1} \right)^l. \quad (8.11)$$

Posons pour tout  $x > 0$ , pour tout  $l \in \mathbb{N}$ ,  $\frac{k}{x+k} \times \left( \frac{x}{x+k} \right)^l = \exp(\psi_l(x))$ . Alors par l'inégalité 8.11 on a l'inégalité :

$$F_k(l) = \sup_{j \geq l} Q_j^k(l) \leq \sup_{x \geq l} \exp(\psi_l(x)).$$

Or pour tout  $l \in \mathbb{N}$ ,  $\psi_l$  est dérivable et :

$$\psi_l'(x) = -\frac{1}{x+k} + \frac{l}{1+\frac{k-1}{x}} \times \frac{k-1}{x^2} = -\frac{1}{x+k} + \frac{l(k-1)}{x^2+x(k-1)}.$$

On a alors les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned} \psi_l'(x) \leq 0 &\iff \frac{l(k-1)}{x^2+x(k-1)} \leq \frac{1}{x+k} \\ &\iff 0 \leq x^2 - (k-1)(l-1)x - k(k-1). \end{aligned}$$

Le déterminant  $\Delta = (k-1)^2(l-1)^2 + 4k(k-1)l$  de ce trinôme est toujours positif, il admet donc deux racines  $x_1$  et  $x_2$  :

$$\begin{cases} x_1 = \left( (k-1)(l-1) - \sqrt{(k-1)^2(l-1)^2 + 4k(k-1)l} \right) / 2 \\ x_2 = \left( (k-1)(l-1) + \sqrt{(k-1)^2(l-1)^2 + 4k(k-1)l} \right) / 2. \end{cases}$$

La première racine est négative, en effet :

$$x_1 \leq \frac{(k-1)(l-1) - (k-1)\sqrt{(l-1)^2 + 4l}}{2} = \frac{(k-1)(l-1) - (k-1)(l+1)}{2} = -(k-1).$$

Ainsi sur  $]0, +\infty[$  la fonction  $\psi_l$  admet un maximum en  $x_2$ . Or  $x_2$  admet l'encadrement suivant. D'une part :

$$x_2 \leq \frac{(k-1)(l-1) + k\sqrt{(l-1)^2 + 4l}}{2} = \frac{(k-1)(l-1) + k(l+1)}{2} = kl - \frac{l}{2} + \frac{l}{2}$$

d'où  $x_2 \leq (k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2}$ . D'autre part :

$$x_2 \geq \frac{(k-1)(l-1) + (k-1)\sqrt{(l-1)^2 + 4l}}{2} = \frac{(k-1)(l-1) + (k-1)(l+1)}{2} = (k-1)l.$$

On obtient alors de la majoration 8.11 et du fait que les fonctions  $(x \mapsto 1/(x+k))$  et  $(x \mapsto (x/(x+k-1))^l)$  sont respectivement décroissante et croissante :

$$\begin{aligned} F_k(l) &= \sup_{j \in \mathbb{N}} Q_j^k(l) \leq \exp(\psi_l(x_2)) \\ &\leq \frac{k}{x_2 + k} \times \left( \frac{x_2}{x_2 + k - 1} \right)^l \\ &\leq \frac{k}{(k-1)l + k} \times \left( \frac{(k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2}}{(k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2} + k - 1} \right)^l \\ &\leq \frac{1}{1 + l - \frac{l}{k}} \times \exp \left( -l \log \left( 1 + \frac{k-1}{(k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2}} \right) \right) \\ &\leq \frac{1}{1 + l - \frac{l}{k}} \exp \left( -l \left( \frac{k-1}{(k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \frac{(k-1)^2}{((k - \frac{1}{2})l + \frac{1}{2})^2} \right) \right) \\ &\leq \frac{1}{1 + l - \frac{l}{k}} \exp \left( -1 + \frac{1}{2k-1} + \frac{1}{2l} \right). \end{aligned}$$

De la même manière on peut minorer  $Q_j^k$  pour tout  $j \in \mathbb{N}$ :

$$Q_j^k(l) \geq \frac{k}{j+k} \times \left( \frac{j-l+1}{j+k-l} \right)^l := \exp(\phi_l(j))$$

d'où:

$$F_k(l) = \sup_{j \in \mathbb{N}} Q_j^k(l) \geq \sup_{j \in \mathbb{N}} \exp(\phi_l(j)). \quad (8.12)$$

L'étude de la fonction  $\phi_l$  est analogue à celle de  $\psi_l$  et on trouve après calcul qu'elle atteint son maximum en  $x_3$  défini par :

$$x_3 = l - 1 + \left( (k-1)(l-1) + \sqrt{(k-1)^2(l-1)^2 + 4(l+k-1)(k-1)l} \right) / 2.$$

On calcule l'encadrement suivant pour  $x_3$  :

$$\begin{aligned} x_3 &\leq l - 1 + \frac{1}{2} \left( (k-1)(l-1) + (l+k-1)\sqrt{(k-1)^2 + 4(k-1)} \right) \\ &\leq l - 1 + \frac{1}{2} \left( (k-1)(l-1) + (l+k-1)(k+1) \right) \\ &\leq l - 1 + (l-1) \times k + \frac{k(k+1)}{2} \\ &\leq (l-1)(k+1) + \frac{k(k+1)}{2}, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 x_3 &\geq l - 1 + \frac{1}{2} \left( (k-1)(l-1) + (l-1)\sqrt{(k-1)^2 + 4(k-1)} \right) \\
 &\geq l - 1 + \frac{1}{2} \left( (k-1)(l-1) + (l-1)k \right) \\
 &\geq (l-1)\left(k + \frac{1}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Et finalement on a la minoration suivante à partir de l'inégalité 8.12 :

$$\begin{aligned}
 F_k(l) &\geq \exp(\phi_l(x_3)) \\
 &\geq \frac{k}{x_3 + k} \times \left( \frac{x_3 - l + 1}{x_3 + k - l} \right)^l \\
 &\geq \frac{k}{x_3 + k} \times \exp\left(1 + \frac{k-1}{x_3 - l + 1}\right) \\
 &\geq \frac{k}{(l-1)(k+1) + \frac{k(k+1)}{2} + k} \times \exp\left(-l \log\left(1 + \frac{k-1}{(l-1)(k + \frac{1}{2}) - l + 1}\right)\right) \\
 &\geq \frac{k}{(l-1)(k + \frac{k(k+1)}{2}) + k} \times \exp\left(-l \log\left(1 + \frac{k-1}{(l-1)(k + \frac{1}{2}) - l + 1}\right)\right) \\
 &\geq \frac{1}{l + l/k + \frac{k+1}{2}} \exp\left(-l \times \frac{k-1}{(l-1)(k - \frac{1}{2})}\right) \\
 &\geq \frac{1}{l + l/k + \frac{k+1}{2}} \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1} - \frac{1}{l}\right).
 \end{aligned}$$

On obtient l'encadrement final suivant :

$$\frac{1}{l + l/k + \frac{k+1}{2}} \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1} - \frac{1}{l}\right) \leq F_k(l) \leq \frac{1}{1 + l - \frac{l}{k}} \exp\left(-1 + \frac{1}{2k-1} + \frac{1}{2l}\right).$$

En passant à la limite on obtient l'équivalent souhaité.

### Preuve du Lemme 57 : passage au paramétrique

Soit  $f \in \mathcal{F}_t^k$ . la fonction  $f$  se décompose de manière unique ainsi

$$f = \underbrace{f \mathbb{I}_{0, L_k(\delta)-1}}_{=g} + \underbrace{f \mathbb{I}_{L_k(\delta), +\infty}}_{=h}$$

Il existe  $i \leq N$  tel que  $\underline{f}_i \leq g \leq \bar{f}_i$  et donc que :

$$\underline{f}_i \leq f \leq \bar{f}_i + \mathbb{I}_{L_k(\delta), +\infty} F_k(\delta).$$

L'ensemble  $\mathcal{B}'$  est donc bien un crochet de  $\mathcal{F}$ . De plus on a les égalités suivantes :

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}\left[\left(\underline{f}_i - \bar{f}_i - \mathbb{I}_{L_k(\delta), +\infty} F_k(\delta)\right)^2 (X_1)\right] &= \sum_{l=0}^{+\infty} (\underline{f}_i - \bar{f}_i - \mathbb{I}_{L_k(\delta), +\infty} F_k(\delta)) p^*(l) \\
 &= \underbrace{\sum_{l=0}^{L_k(\delta)-1} \left(\underline{f}_i(l) - \bar{f}_i(l)\right)^2 p^*(l)}_{= \|\underline{f}_i - \bar{f}_i\|_{\mathcal{L}^2(p^*)}^2} + \underbrace{\sum_{l=L_k(\delta)}^{+\infty} F_k^2(l) p^*(l)}_{\leq \frac{\delta^2}{8} \text{ par le Lemme 59}} \\
 &\leq \frac{\delta^2}{2} + \frac{\delta^2}{2} \\
 &\leq \delta^2
 \end{aligned}$$

L'ensemble  $\mathcal{B}'$  est donc bien un  $\delta$ -crochet de  $\mathcal{F}_t^k$ .

**Preuve du lemme 59 : un équivalent pour  $L_k(\delta)$**

On doit montrer l'inégalité suivante :

$$\sum_{l=\beta_k/\delta}^{+\infty} F_k^2(l)p^*(l) \leq \frac{\delta^2}{2}. \quad (8.13)$$

Or par le Lemme 8.3 on a les inégalités suivantes pour tout  $L \geq 1$ :

$$\begin{aligned} \sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l)p^*(l) &\leq \sum_{l=L}^{\infty} \left( \frac{\alpha(k)}{1+l-\frac{l}{k}} \exp\left(\frac{1}{2L}\right) \right)^2 p^*(l) \\ &\leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1+L-L/k} \right)^2 \times \sum_{l=L}^{\infty} p^*(l) \\ &\leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{L-L/k} \right)^2 \times 1 \end{aligned}$$

Prenons un entier  $L$  de la forme  $L = \frac{\beta}{\delta}$  avec  $\delta < \beta$  on obtient l'inégalité suivante :

$$\sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l)p^*(l) \leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1-1/k} \right)^2 \times \frac{\delta^2}{\beta^2}.$$

D'où, si  $\beta = \beta_k := \sqrt{2} \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1-1/k} \right)$ ,  $L = \beta_k/\delta$  vérifie  $\sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l)p^*(l) \leq \delta^2/2$  et ainsi  $L_k(\delta) \leq L$ .

**Preuve du lemme 61 : un équivalent pour  $L'_k(\delta)$**

On doit montrer l'inégalité suivante :

$$\sum_{l=\beta'_k/\delta^2}^{+\infty} F_k^2(l) \leq \frac{\delta^2}{2}. \quad (8.14)$$

Or par le Lemme 8.3 on a les inégalités suivantes pour tout  $L \geq 1$ :

$$\begin{aligned} \sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l) &\leq \sum_{l=L}^{\infty} \left( \frac{\alpha(k)}{1+l-\frac{l}{k}} \exp\left(\frac{1}{2L}\right) \right)^2 \\ &\leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1-1/k} \right)^2 \int_L^{+\infty} \frac{1}{t^2} \\ &\leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1-1/k} \right)^2 \times \frac{1}{L} \end{aligned}$$

Prenons un entier  $L$  de la forme  $L = \frac{\beta'}{\delta^2}$  avec  $\delta < \beta'$  on obtient l'inégalité suivante :

$$\sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l) \leq \left( \frac{\alpha(k) \exp\left(\frac{1}{2}\right)}{1-1/k} \right)^2 \times \frac{\delta^2}{\beta'}.$$

D'où, si  $\beta' = \beta'_k := \frac{2\alpha(k)^2 e}{(1-1/k)^2}$ ,  $L = \beta'_k/\delta^2$  vérifie  $\sum_{l=L}^{\infty} F_k^2(l) \leq \delta^2/2$  et ainsi  $L_k(\delta) \leq L$ .





## Part III

# Tests de $k$ –monotonie et application à l'estimation du nombre d'espèces dans une population

---

## Avant-propos

Cette partie propose une application de la Partie I en écologie pour l'estimation du nombre d'espèces dans une population. Cette dernière est effectuée conjointement à la distribution d'abondance de la population. La méthode proposée consiste à estimer la distribution d'abondance sous contrainte de  $k$ -monotonie, l'entier  $k$  étant inféré à partir des données par une procédure de tests emboîtés. La partie est structurée en deux chapitres. Le Chapitre 9 considère le problème de l'estimation du nombre d'espèces dans une population et présente la méthode d'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie. Le travail effectué par Durot et al. (2015) dans le cas convexe est généralisé à la  $k$ -monotonie. Le Chapitre 10 propose plusieurs tests de  $k$ -monotonie pour valider l'hypothèse de  $k$ -monotonie et inférer l'entier  $k$ , généralisant ainsi un travail commun réalisé avec Cécile Durot, Sylvie Huet, François Koladjo et Stéphane Robin dans le cas de la convexité que l'on peut trouver au chapitre *Convex Estimation* du livre *Capture and Recapture* Durot et al. (2017). Les deux chapitres mêlent résultats théoriques et simulations et sont illustrés par des jeux de données de la littérature.

# Chapter 9

## Estimation du nombre d'espèces dans une population

### Sommaire

---

<b>9.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>171</b>
9.1.1	Rappel de la Partie I	171
9.1.2	Problématique	172
	Modélisation du problème statistique	172
	A propos des autres méthodes pour estimer le nombre d'espèces	174
9.1.3	Quelques méthodes pour l'estimation de la distribution d'abondance	176
<b>9.2</b>	<b>Estimation du nombre d'espèces sous contrainte de <math>k</math>-monotonie</b>	<b>179</b>
9.2.1	Première méthode : avec l'estimateur des moindres carrés	180
	Estimation de $p$ et $p^+$ sous contrainte de $k$ -monotonie	180
	Estimation du nombre d'espèces	181
9.2.2	Seconde méthode : avec l'estimateur empirique	181
	Définition des estimateurs	181
	Résultats statistiques	181
9.2.3	A propos du choix de $k$	183
<b>9.3</b>	<b>Illustration sur jeux de données simulés</b>	<b>184</b>
9.3.1	Plan de simulation	184
9.3.2	Estimation de $p_0$	184
9.3.3	Estimation de $N$	189
9.3.4	Conclusion des simulations	193
<b>9.4</b>	<b>Illustration sur jeux de données réels</b>	<b>194</b>
<b>9.5</b>	<b>Preuves</b>	<b>197</b>
9.5.1	Preuve du Lemme 63 : propriétés statistiques	197
9.5.2	Preuve de la Propriété 65 : loi asymptotique	198

---

## Introduction

### Rappel de la Partie I

Pour faciliter la lecture de ce chapitre un bref rappel sur l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie développée en Partie I est donné ci-dessous. Une fonction discrète  $p$  est dite  $k$ -monotone,  $k$  étant un entier supérieur à 1 fixé, si son  $k$ -ième Laplacien  $(-1)^k \Delta^k p(i)$  est positif pour tout  $i \in \mathbb{N}$  avec les opérateurs laplaciens définis par la relation de récurrence suivante :

$$\begin{aligned}\Delta^1 p(i) &= p(i+1) - p(i) \\ \Delta^k p(i) &= \Delta^{k-1} p(i+1) - \Delta^{k-1} p(i).\end{aligned}$$

La  $k$ -monotonie est donc une généralisation de la décroissance ( $k = 1$ ) et de la convexité ( $k = 2$ ). L'entier  $k$  mesure le degré de creux de la fonction discrète  $p$  : plus  $k$  est élevé et plus la fonction est creuse. Les principales propriétés et définitions intéressantes pour cette partie sont rappelées ci-dessous :

- On définit l'opérateur suivant :

$$\nabla^k p_j = (-1)^k \Delta^k p_j \geq 0, \text{ for all } j \in \mathbb{N}.$$

également égal à :

$$\nabla^k p_j = \sum_{h=0}^k (-1)^h C_k^h p_{j+h}. \quad (9.1)$$

- Soit  $p$  une fonction discrète  $k$ -monotone. Les entiers  $i$  tels que  $\nabla^k p(i) > 0$  sont appelés les  $k$ -noeuds de  $p$ .
- Pour tout entier  $k$ , soit la base de splines  $(Q_j^k)_{j \in \mathbb{N}}$  définie par :

$$\forall i \in \mathbb{N}, Q_j^k(i) = \binom{j-i+k-1}{k-1} \mathbb{I}_{\{j \geq i\}} = \frac{(j-i+k-1) \dots (j-i+1)}{(k-1)!} \mathbb{I}_{\{j \geq i\}}. \quad (9.2)$$

Alors la fonction discrète  $p$  est  $k$ -monotone si et seulement si il existe une mesure positive  $\pi$  sur  $\mathbb{N}$  telle que pour tout  $i \in \mathbb{N}$ ,  $p(i)$  satisfait :

$$p(i) = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k(i) = \sum_{j \geq i} \pi(j) Q_j^k(i). \quad (9.3)$$

De plus l'ensemble des  $k$ -noeuds de  $p$  est exactement le support de  $\pi$ .

- Dans le cas particulier où  $k = 2$  les splines  $Q_j^2$  sont les distributions triangulaires  $T_{j+1}$  évoquées dans Durot et al. (2013), ainsi nommées en raison de leur forme triangulaire.

Soit un entier  $k \geq 1$  fixé. Nous nous intéressons à l'estimation non-paramétrique d'une densité discrète  $p^*$  sur la base de  $n$  observations i.i.d  $X_1 \dots X_n$  de loi  $p^*$ . L'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie  $\hat{p}^k$  est défini ainsi :

$$\hat{p}^k = \operatorname{argmin} \{ \|f - \tilde{p}\|_2^2, f \text{ probabilité } k\text{-monotone} \} \quad (9.4)$$

où  $\tilde{p}$  est l'estimateur empirique de  $p^*$ . L'existence et l'unicité de cet estimateur ont été montrées en Partie I.

## Problématique

La biodiversité d'un écosystème, ou variabilité des organismes vivants dans une zone géographique pendant une même période, est un indicateur de la bien-portance d'un milieu, et constitue un enjeu majeur en écologie. De nombreux critères sont proposés pour qualifier la biodiversité, l'un des plus anciens étant l'étude du nombre d'espèces dans une population, ou *species richness* en anglais.

La connaissance de cette quantité présente de nombreuses applications dans des domaines variés, la population considérée pouvant être une population d'espèces au sens classique ou une population de gènes. Cette dernière application est particulièrement actuelle, motivée par l'essor des bases des données d'expression de gènes. A titre d'exemple Le Chatelier et al. (2013) présentent une application en écologie microbienne : la diversité de la flore microbienne intestinale (ou nombre de gènes bactériens dans l'intestin) est directement impliquée dans les causes possibles d'obésité. D'autres travaux ont montré la corrélation entre une perte de diversité microbienne et diverses pathologies, parmi lesquelles la maladie de Crohn Matsuoka and Kanai (2015), le diabète de type I Kostic et al. (2015), le cancer colorectal Ahn et al. (2013) ou de façon plus surprenante, l'autisme Kang et al. (2013). D'autres applications de l'estimation du nombre d'espèces en métagénomique ont été récemment abordées par Allen et al. (2013), Wang (2010) ou encore Li-Thiao-Té et al. (2012).

En écologie classique la problématique est généralement tournée vers la conservation de la diversité des espèces, un enjeu très actuel dans un contexte de prise de conscience face au réchauffement climatique et à la déforestation. Les travaux de Margules et al. (2002), par exemple, alertent quant à la nécessité d'estimer le nombre d'espèces dans une population pour identifier les mesures prioritaires dans une politique de préservation. Récemment Koladjo (2013) présente une application concrète aux données de pêche : l'estimation du nombre d'espèces lui sert d'outil pour la gestion des pêches et ainsi pour la préservation des ressources *ichtyennes* (relatives aux poissons).

Que ce soit pour aider à la conservation des espèces ou pour inférer un lien entre la diversité génétique et certaines pathologies, il est nécessaire de développer des méthodes statistiques pour estimer la biodiversité d'un écosystème, et en particulier l'estimation du nombre d'espèces ou de gènes. Il s'agit d'un cas particulier d'un problème statistique plus général, celui d'estimer le nombre de classes dans une population hétérogène. Ce problème possède de nombreuses autres applications, comme celui d'estimer l'étendue du vocabulaire d'un écrivain (Efron et Thisted, 1976), ou le nombre de composantes connexes d'un graphe (Franck, 1978).

## Modélisation du problème statistique

Le problème statistique de l'estimation du nombre d'espèces dans une population est ancien et a été introduit par Fisher, Steven-Corbet et Williams en 1943. Le nombre d'espèces dans une population est estimé à partir de l'observation de la distribution d'abondance des espèces tronquée en 0 : seules les espèces observées au moins une fois contribuent à la distribution d'abondance.

Plus formellement le problème peut être décrit en ces termes : on observe une population comprenant  $N$  espèces et on note, pour  $i \in \{1, \dots, N\}$ ,  $A_i$  l'abondance de l'espèce  $i$  c'est-à-dire le nombre d'individus de l'espèce  $i$  observés. Deux modélisations équivalentes co-existent :

- Les abondances  $A_i$  peuvent être modélisées par des variables aléatoires indépendantes

possédant chacune une loi propre, dépendant des caractéristiques de l'espèce  $i$  (par exemple dans le cas de l'étude de pêche la taille des poissons de l'espèce  $i$ , leur rapidité, la profondeur à laquelle ils vivent, et naturellement le nombre de spécimens habitant le fleuve), des caractéristiques du milieu, ainsi que de la technique d'observation utilisée.

- Les abondances  $A_i$  peuvent également être décrites par un modèle de mélange. Les  $A_i$  sont alors des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées de loi  $p$  commune définie comme un mélange :

$$p = \sum_{j=0}^{\infty} \pi(j)Q_j$$

où  $\pi$  est une probabilité discrète et les  $Q_j$  sont également des distributions. Une telle écriture revient à considérer que parmi les  $N$  variables indépendantes  $A_i$ , une proportion  $\pi_0$  est distribuée selon la loi  $Q_0$ , une proportion  $\pi_1$  selon la loi  $Q_1$  et ainsi de suite. La loi  $p$  est appelée *distribution d'abondance* et dépend des caractéristiques de chaque espèce  $i$  et du milieu, ainsi que de la technique d'observation utilisée.

Dans les deux cas la distribution d'abondance d'un milieu donné est différente en fonction de la technique d'observation choisie. En effet chacune des techniques a une influence sur la distribution du nombre d'individus observés pour chaque espèce. A fin d'illustration si la population est une population de poissons (voir la thèse de Koladjo (2013) pour une telle population située dans le fleuve Ouémé au Bénin) les techniques de pêche au filet vont privilégier la prise d'espèces de taille importante vivant en profondeur moyenne tandis que la pêche à la nasse impliquera la prise d'une plus grande proportion d'espèces de poisson de taille plus réduite vivant en surface.

Nous choisissons ici de nous placer dans le cadre d'un modèle de mélange. L'abondance de l'espèce  $i$  s'écrit :

$$A_i = \sum_{j=1}^n \mathbb{I}_{X_j=i}. \quad (9.5)$$

Soit  $S_j$  la variable aléatoire du nombre d'espèces ayant l'abondance  $j$  :

$$S_j = \sum_{i=1}^N \mathbb{I}_{\{A_i=j\}}. \quad (9.6)$$

Ce cadre revient à tirer le vecteur  $(S_0, \dots, S_n)$  selon une loi multinomiale.

En réalité on n'observe pas toutes les abondances  $A_i$  mais seulement celles qui sont strictement positifs (On n'observe en effet seulement les espèces ... dont on a observé au moins un spécimen !). On note  $D$  la variable aléatoire du nombre d'espèces observées :

$$D = \sum_{j \geq 1} S_j. \quad (9.7)$$

Les variables  $D$  et  $N$  sont liées par la relation :

$$N = S_0 + D. \quad (9.8)$$

Le problème consiste à estimer le nombre  $N$  d'espèces dans la population ou de façon équivalente le nombre  $S_0$  d'espèces qui n'ont pas été observées. On note également  $p^+$  la distribution d'abondance  $p$  tronquée en 0 :

$$\forall j \geq 1, p_j^+ = \frac{p_j}{1 - p_0}. \quad (9.9)$$

Cette distribution tronquée est liée à la variable aléatoire  $D$  via le résultat suivant dont la preuve figure dans l'article de Durot et al. (2015) :

**Théorème 62** (Durot et al., 2015). *Soit  $D$  la variable aléatoire du nombre d'espèces observées. Alors  $D$  suit une loi binomiale de paramètre  $(N, 1 - p_0)$  et conditionnellement à  $D$  on observe des variables aléatoires  $X_1, \dots, X_D$  i.i.d de loi  $p^+$  où  $p^+$  est la distribution d'abondance  $p$  tronquée en 0.*

*De plus si  $p_0$  est connu, un estimateur consistant de  $N$  est donné par :*

$$\hat{N} = \left\lfloor \frac{D}{1 - p_0} \right\rfloor$$

où  $\lfloor x \rfloor$  désigne la partie entière de  $x$ .

Une approche naturelle consiste à estimer  $p_0$  à partir de l'estimation de la distribution tronquée  $\hat{p}^+$  et en déduire une estimation  $\hat{p}$  de la distribution d'abondance, et donc également de sa valeur en 0,  $p_0$ . Un estimateur de  $N$  couramment utilisé lorsque l'on dispose d'un estimateur  $\hat{p}_0$  de  $p_0$  est alors :

$$\hat{N} = \left\lfloor \frac{D}{1 - \hat{p}_0} \right\rfloor \quad (9.10)$$

L'obtention d'un estimateur  $\hat{p}_0$  de  $p_0$  à partir de l'estimation de  $p^+$  n'est malheureusement pas un problème identifiable : quelle que soit la forme de l'estimateur de  $p^+$ , toute valeur de  $p_0$  comprise strictement entre 0 et 1 convient. L'estimation de  $p$  passe donc nécessairement par la définition d'hypothèses pertinentes sur la distribution d'abondance pour rendre le problème de l'estimation de  $p_0$  identifiable. La condition d'identifiabilité choisie dans notre cas est de supposer que  $p$  est une *distribution  $k$ -monotone d'abondance*, cette condition est détaillée dans la Section 9.2.

## A propos des autres méthodes pour estimer le nombre d'espèces

Le problème de l'estimation du nombre d'espèces dans une population, et plus généralement du nombre de classes dans une population, a été très largement étudié. Parmi les nombreuses façons d'envisager ce problème, nous avons fait les choix de modélisation statistique suivants :

- La population considérée est infinie ce qui permet de faire l'hypothèse que l'observation des individus est assimilable à un tirage indépendant avec remise. Ce choix de modélisation est pertinent seulement dans le cadre où l'on observe un nombre  $n$  d'individus négligeable devant le nombre total d'individu de la population.
- Les abondances  $A_i$  sont indépendantes et identiquement distribuées selon une loi de mélange.

D'autres modélisations de ce problème sont possibles parmi lesquelles des modélisations à population finie ou basées uniquement sur de l'analyse de données. Nous ne rentrerons pas dans les détails de ces méthodes ici, de nombreuses références peuvent être trouvées dans l'état de l'art de Bunge et Fitzpatrick (1993). En particulier le graphique suivant tiré de leur article situe notre travail au sein de cette littérature :

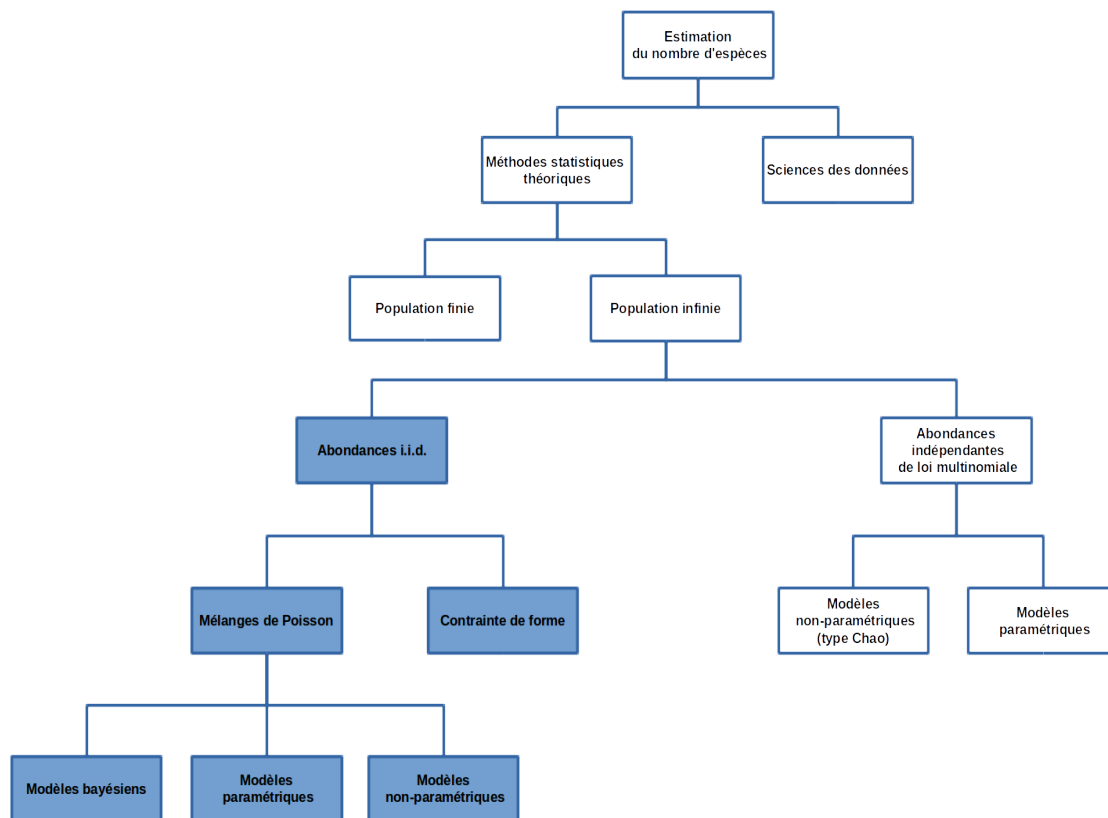


Figure 9.1: Littérature pour le problème de l'estimation du nombre d'espèce dans une population. Modifié à partir de Bunge et Fitzpatrick (1993). En bleu : le cadre choisi dans ce chapitre.

Considérons le cas d'une modélisation statistique à population infinie. Diverses méthodes ont été développées pour l'estimation de  $p_0$ , dans le cas d'une distribution de mélange commune aux  $A_i$  (en bleu sur la figure) parmi lesquelles les mélanges de Poisson et la contrainte de forme que nous développons à la Section 9.1.3.

La seconde alternative, qui consiste à modéliser une population infinie composée de  $N$  espèces en proportion  $\beta_1, \dots, \beta_N$ , revient à effectuer le tirage d'un vecteur  $(A_1, \dots, A_N)$  selon une loi multinomiale  $\mathcal{M}(N, \beta_1, \dots, \beta_N)$ . L'utilisation la plus fréquente est une déclinaison non-paramétrique de ce modèle. Cette approche a été initiée par Harris (1959) puis grandement popularisée par Chao (1984). L'estimateur de  $N$  proposé par Chao est non-paramétrique et uniquement basé sur la distribution empirique. Une première version fortement biaisée de l'estimateur :

$$\hat{N}_{\text{Chao}}^{(1)} = D + \frac{\tilde{p}_1^2}{2}.$$

a ensuite été remplacée par l'estimateur suivant :

$$\hat{N}_{\text{Chao}}^{(2)} = D + \frac{\tilde{p}_1(\tilde{p}_1 - 1)}{2}$$

où  $\tilde{p} = (\tilde{p}_0 = 0, \tilde{p}_1, \dots)$  désigne l'estimateur empirique. De nombreux estimateurs ont été proposés dans ce cadre parmi lesquels ceux de Chao et Lee (1992) et de Chao et Lin (2012). Les premiers considèrent le cas d'un tirage avec remise tandis que les seconds supposent



une situation sans remise.

Ces estimateurs sont performants dans de nombreuses situations. Leur implémentation, très efficace, est disponible au package `CatchAll` (Bunge, 2010). En revanche ils sont peu adaptés aux jeux de données de l'écologie microbienne. Ces derniers, en effet, ont été recueillis dans des situations de très grande biodiversité et leur taille est trop importante pour l'utilisation des estimateurs de type Chao (voir Hong et al., 2005). De plus leur sensibilité aux outliers et la difficulté à obtenir des intervalles de confiance pour le nombre  $N$  d'espèces, ainsi que des tests statistiques validant leur utilisation, ont justifié l'essor, en parallèle, des modèles basés sur l'hypothèse d'équidistribution des abondances  $A_i$ . Ces modèles représentent une alternative complémentaire à l'approche de Chao, ils sont détaillés dans la Section suivante.

## Quelques méthodes pour l'estimation de la distribution d'abondance

Nous revenons désormais au cadre spécifique où la population est infinie et les abondances  $A_i$  sont i.i.d selon une loi  $p$  décrite comme un mélange (cas bleu de la figure 9.1). Plusieurs méthodes ont été adoptées pour l'estimation de  $p$ , les plus fréquentes sont les modèles de mélange poissonnien, en anglais *Poisson mixture setting*, paramétrique ou non-paramétrique, éventuellement dans le cadre d'un modèle bayésien. Plus récemment une approche alternative par contrainte de forme a été proposée par Durot et al. (2015).

### Modèles de mélange poissonnien

Dans ce modèle, introduit par Fisher et al. (1943), les abondances  $A_i$  sont identiquement distribuées selon une loi  $p$  qui s'écrit comme une loi de Poisson  $\mathcal{P}(\lambda)$ , dont le paramètre  $\lambda$  est lui-même une variable aléatoire, de loi  $\omega$ . En d'autres termes, conditionnellement à  $(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ , la variable  $A_i$  suit une loi  $\mathcal{P}(\lambda_i)$  et  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  sont des variables aléatoires i.i.d de loi  $\omega$ . Ainsi pour tout  $j \in \mathbb{N}$  :

$$\mathbb{P}(A_i = j) = p_j(\omega) = \int_0^{+\infty} \frac{\lambda^j \exp -\lambda}{j!} d\omega(\lambda). \quad (9.11)$$

Les modèles de mélange sont en particulier utiles pour tenir compte d'une forte hétérogénéité dans les données, au contraire des modèles paramétriques classiques.

Lorsque la loi  $\omega$  est estimée via un modèle paramétrique ce cadre est appelé *Parametric Poisson mixture setting*. C'est le cas dans les papiers de Chao et Bunge (2002) qui choisissent pour  $\omega$  une distribution Gamma ou de Bunge et Barger (2008) qui ont estimé  $\omega$  par un mélange de deux ou trois lois exponentielles pour modéliser la forte hétérogénéité de données concernant des micro-organismes marins.

Lorsqu'à l'inverse la loi  $\omega$  est estimée à l'aide d'un modèle non-paramétrique, on parle de *Non-parametric Poisson mixture setting*. Le principe est généralement le suivant : étant donnée une collection de modèles de mélange paramétriques pour l'estimation de  $p$ , un critère de type pénalité est trouvé pour choisir le meilleur modèle. Böhning et Schön (2005) choisissent pour leurs pénalisations un critère BIC ou AIC, tandis que Wang et Lindsay (2005), remarquant une instabilité numérique dans l'implémentation de leur estimateur, lui ajoutent une pénalisation fonction de la log-vraisemblance.

L'étude des propriétés des estimateurs du maximum de vraisemblance dans les modèles de mélange poissonniens a été favorisée par les développements théoriques sur les modèles de mélange généraux, et entre autres les travaux de Laird (1978) et Lindsay (1995). Leur

implémentation a été rendue possible grâce au développement de l'Algorithme EM (Esperance Minimization) proposé par Dempster et al. (1977) et adapté au cadre du mélange poissonnien pour l'estimation du nombre d'espèces par Norris et Pollock (1996, 1998).

Dans le cas des modèles de mélange poissonnien la loi tronquée  $p^+$  et la valeur en 0,  $p_0$ , sont estimées simultanément. L'estimation de  $p_0$  constitue donc un problème identifiable. Ces modèles ont en outre l'avantage d'être peu sensibles aux outliers et de donner des estimations satisfaisantes en présence de populations à forte diversité, comme c'est le cas dans les données microbiennes. De plus la pertinence de ce modèle peut être discutée au moyen de tests statistiques, ce cadre étant propice aux calculs d'intervalles de confiance. En revanche l'implémentation par des algorithmes EM est coûteuse et peut présenter des instabilités numériques dues à l'étape d'inversion de la matrice de Fisher associée à la vraisemblance. De plus la modélisation peut être moins satisfaisante en présence de distributions à queues lourdes.

### Apport du bayésien

Un cadre bayésien peut également être choisi pour remplacer les modèles paramétriques classiques. Le principe est de choisir une loi a priori sur le nombre d'espèces et le paramètre de la distribution  $\omega$ . Les lois a posteriori obtenues selon cette méthode ont alors l'avantage d'être discrètes et de présenter des intervalles de confiance asymétriques, ce qui est conforme à l'intuition. De plus l'implémentation des estimateurs et de leurs intervalles de confiance est grandement facilitée par l'utilisation d'une approche variationnelle. De nombreux papiers (voir Barger et Bunge, 2010) suggèrent des lois a priori possibles, mais en définitive le choix d'une loi a priori, informative ou non-informative, est une délicate question laissée à l'utilisateur. Les papiers de Barger and Bunge (2008, 2010) et Li-Thiao-Té et al. (2012) explicitent ces différents points.

### Contrainte de convexité

Une autre approche non-paramétrique, basée sur l'hypothèse de convexité de la distribution d'abondance a été proposée par Durot et al (2015). Cette approche a été introduite en partant du constat que les densités empiriques tronquées étaient d'allure convexe et que les estimateurs de  $p$  issus des différents modèles de mélange proposés dans la littérature étaient souvent convexes.

La figure 9.2 présente un exemple d'estimation d'abondance par ces différentes méthodes, elle est issue de l'article de Durot et al. (2015). Chaque figure représente une densité d'abondance empirique issue d'un jeu de données réelles. Elles sont issues respectivement des articles Wang et Lindsay, 2005 (Butterfly, Microbial) et de Norris et Pollock, 1998 (Bird, Tomato). Elles sont disponibles via les librairies MASS<sup>1</sup> et SPECIES<sup>2</sup>. Les courbes rouges, bleues et violettes représentent chacune un estimateur issu d'un modèle de mélange non-paramétrique (respectivement des mélanges de lois de Poisson et un mélange de lois Poisson-Gamma générés à partir des méthodes de Chao et Bunge (2002)) et sont souvent convexes. La courbe verte représente l'estimateur sous contrainte de convexité issu de Durot et al. (2013). Les observations, représentées par le symbole \* sont d'allure convexe motivant le choix de la définition d'un estimateur sous contrainte de convexité.

---

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/MASS/index.html>

<sup>2</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/SPECIES/index.html>

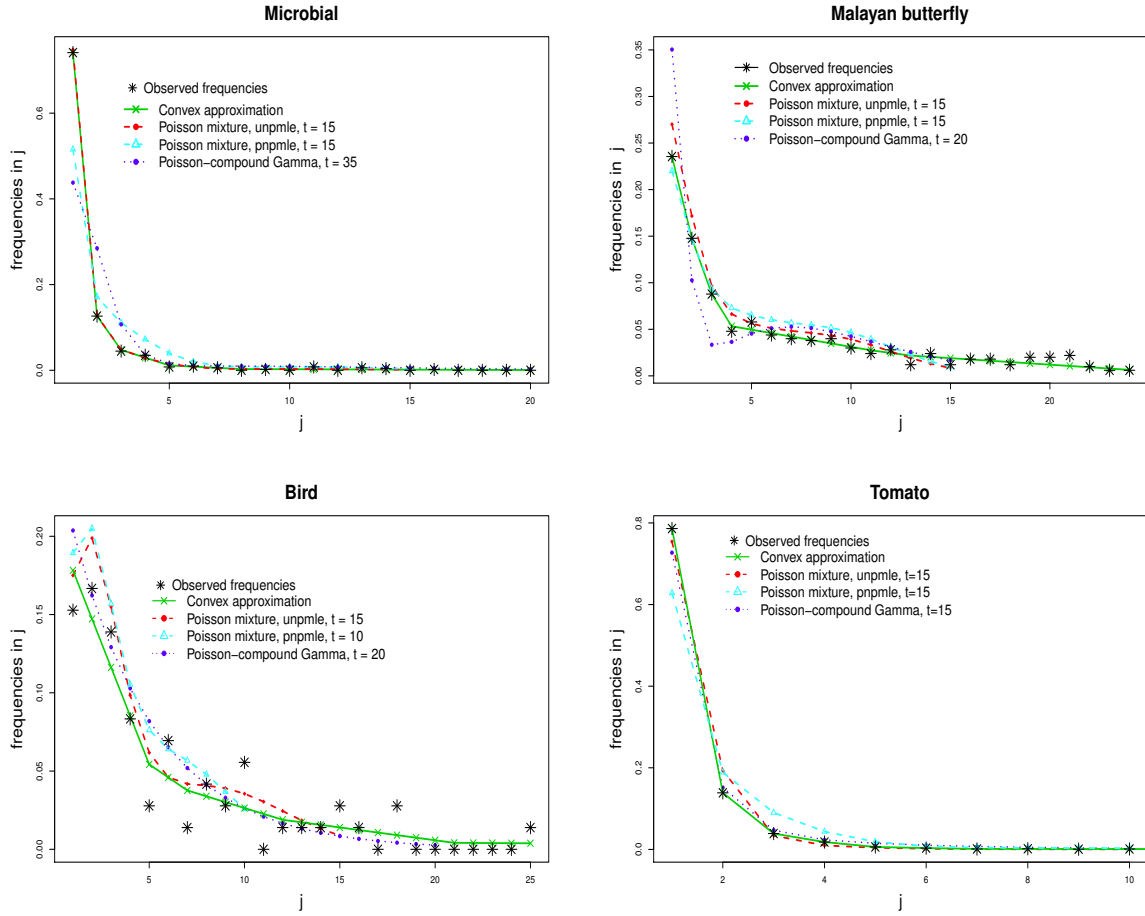


Figure 9.2: Estimation de distributions d'abondance tronquées par méthode de mélange de Poisson ou de Gamma et par méthode d'approximation convexe.

**La question de l'identifiabilité** Les modèles de mélange paramétriques ou non paramétriques sont identifiables puisque l'estimation de la distribution d'abondance n'est pas basée sur un prolongement de l'estimateur de la distribution d'abondance tronquée. L'estimation des paramètres de la loi entraîne donc naturellement un estimateur de  $p(0)$ . En revanche dans le cas de la contrainte de forme, le problème n'est pas identifiable si l'on suppose seulement que  $p$  est convexe : supposons que l'on ait obtenu une estimation consistante  $\hat{p}^+$  de  $p^+$ , on peut prolonger cette dernière en une fonction convexe en choisissant pour  $\hat{p}(0)$  n'importe quelle valeur située au dessus de la droite reliant  $\hat{p}^+(1)$  à  $\hat{p}^+(2)$ . Une hypothèse supplémentaire est donc nécessaire pour rendre le problème identifiable. L'hypothèse proposée par Durot et al. (2015) sera détaillée dans la Section 9.2 et généralisée à la  $k$ -monotonie pour un  $k$  quelconque.

### Apport de la contrainte de convexité par rapport aux modèles de mélange classiques.

Dans la littérature, le choix du modèle est une question difficile laissée à l'utilisateur bien qu'il soit d'une grande importance en pratique : deux modèles différents peuvent amener à trouver un facteur 10 entre deux estimateurs de  $N$  (voir Durot et al., 2015). Passé le problème de l'identifiabilité qu'il faut rigoureusement discuter, l'estimation de la distribution tronquée sous contrainte de forme présente de multiples avantages.

Pour commencer elle est simple d'utilisation, ne demandant à l'utilisateur aucun choix de modèle paramétrique, de paramètres (tels le nombre de composante du mélange dans le cas des mélanges paramétriques) ou de loi a priori. De fait, elle est basée sur l'unique hypothèse de convexité, une hypothèse naturelle au vu de l'allure des distributions d'abondance et que l'on peut justifier au moyen d'un test de convexité (voir Section 10). De surcroît cette hypothèse est peu restrictive puisqu'elle englobe une grande partie des modèles paramétriques et non-paramétriques usuellement choisis dans ce cadre. Elle est plus riche qu'une modélisation paramétrique et contient notamment les distributions à queues lourdes habituellement mal approchées.

D'un point de vue algorithmique l'estimateur sous contrainte de convexité est calculé par l'Algorithme de Réduction de Support (voir Groeneboom et al., 2008) qui renvoie l'estimateur exact en un temps faible et présente l'avantage d'être très stable, notamment en présence de queues de distribution lourdes ou de grande dispersion. La modélisation sous contrainte de forme déjoue ainsi un inconvénient fréquent des modèles non-paramétriques où l'implémentation repose sur des algorithmes EM coûteux en temps de calcul et présentant quelques instabilités numériques. Pour finir elle présente des résultats numériques performants (voir Durot et al., 2015) et un cadre propice au calcul de la loi limite et à la justification théorique des résultats (Durot et al., 2015).

## Estimation du nombre d'espèces sous contrainte de $k$ -monotonie

Deux méthodes d'estimation du nombre d'espèces de façon conjointe à l'estimation de la distribution d'abondance  $p$  sont présentées ici. Dans les deux cas l'estimation de  $p$  est basée sur une hypothèse de  $k$ -monotonie,  $k$  étant un entier supérieur à 2 fixé.

Dans la première méthode l'estimation de  $p$  est effectuée en deux étapes, la première consiste à estimer la distribution d'abondance tronquée  $p^+$  sous contrainte de  $k$ -monotonie grâce à l'estimateur développé en Partie I, la seconde à en déduire une estimation de  $p_0$  grâce à une hypothèse d'identifiabilité naturelle dans ce cadre, celle de la  $k$ -monotonie d'abondance. Cette dernière entraîne la définition d'une condition nécessaire et suffisante de prolongement de  $p^+$ .

La seconde méthode est basée uniquement sur l'estimateur empirique. Le prolongement issu de l'hypothèse de  $k$ -monotonie d'abondance est appliqué à la distribution empirique  $\tilde{p}$  plutôt qu'à son estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie,  $\hat{p}^+$ .

Se pose ensuite la question du choix du degré de monotonie  $k$ . Toute cette section est développée à  $k$  fixé, le Chapitre 10 propose ensuite une procédure de tests emboîtés afin d'inférer l'entier  $k$  à partir des observations.

Notons qu'une troisième approche par contrainte de  $k$ -monotonie a été développée par Chee et Wang (2016), parallèlement au travail effectué ici. Leur point de vue diffère du notre. La méthode que nous développons ici, en effet, est non-paramétrique, basée sur une estimation de  $p^+$  sous contrainte de forme. L'approche de Chee et Wang en revanche est fondée sur un modèle de mélange. La plupart des modèles de mélange développés pour l'estimation du nombre d'espèces sont des mélanges poissonniens (voir section 9.1.3). Remarquant que les lois  $k$ -monotones continues sont caractérisées par une écriture dans une base de splines (voir le Théorème de Williamson, page 56), les auteurs choisissent plutôt d'opter pour un mélange de distribution mélangeante Beta discrète. Les estimateurs du

maximum de vraisemblance calculés sous ce modèle sont alors  $k$ -monotones.

## Première méthode : avec l'estimateur des moindres carrés

### Estimation de $p$ et $p^+$ sous contrainte de $k$ -monotonie

Les distributions d'abondance des jeux de données de la littérature (voir Figure 9.2) présentent une décroissance rapide, leur allure est celle de fonctions  $k$ -monotone, pour un  $k$  élevé. De plus de nombreux estimateurs usuels pour ces jeux de données sont également  $k$ -monotones. Ces deux points motivent la définition d'une méthode d'estimation de  $p$  sous contrainte de  $k$ -monotonie, pour  $k \geq 2$  fixé. L'estimation de la distribution d'abondance tronquée  $p^+$  définie en (9.9) ainsi que l'hypothèse de la  $k$ -monotonie de  $p$  ne suffisent pas à rendre le problème de l'estimation de  $p$  identifiable.

Afin de rendre le problème identifiable nous supposons que  $p$  est une *distribution  $k$ -monotone d'abondance* dont la définition est donnée ci-dessous :

**Définition [Distribution  $k$ -monotone d'abondance]** Soit  $p$  une distribution discrète. On dit que  $p$  est une distribution d'abondance  $k$ -monotone si  $p$  est  $k$ -monotone et si  $p$  se décompose dans la base de splines  $(Q_j^k)$  de la manière suivante :

$$p(i) = \sum_{j \geq 1} \pi(j) Q_j^k(i)$$

où la définition des splines  $(Q_j^k)$  est rappelée en Section 9.1.1 à l'Equation (9.2) et  $\pi$  désigne une probabilité discrète.

En d'autres termes puisqu'une distribution  $p$  est  $k$ -monotone si et seulement si elle admet une décomposition de la forme suivante :

$$p(i) = \sum_{j \geq 0} \pi(j) Q_j^k(i),$$

cela signifie que  $p$  est une distribution  $k$ -monotone d'abondance si et seulement si elle est  $k$ -monotone et que sa décomposition en base de splines est telle que  $\pi_0 = 0$ . Cette assertion se justifie dans l'étude de la biodiversité par l'interprétation suivante : l'hypothèse de  $k$ -monotonie pour  $p$  revient à considérer une population à  $N$  espèces indépendantes dont une proportion  $\pi_i$  est distribuée selon la loi  $Q_i^k$  pour tout  $i$ . L'hypothèse " $\pi_0 = 0$ " revient donc à supposer qu'aucune espèce n'est distribuée selon  $Q_0^k$  dans la population. Or  $Q_0^k$  est la loi de Dirac en 0. Les espèces distribuées selon  $Q_0^k$  sont donc celles dont la probabilité de ne pas être vues vaut 1. En d'autres termes ce sont les espèces qu'on est certain de ne pas détecter avec le protocole d'observation choisi. Faire l'hypothèse que  $p$  est une distribution  $k$ -monotone d'abondance revient donc à ne considérer dans la population que les espèces que les techniques permettent de détecter : les poissons que les moyens de pêche choisis permettent d'attraper pour l'exemple du fleuve Ouémé, ou les bactéries que la technologie permet d'identifier pour l'exemple de l'écologie microbienne.

Cette hypothèse permet de rendre le problème de l'estimation de  $p_0$  identifiable. En effet, puisque  $p$  est une distribution  $k$ -monotone d'abondance, en particulier  $\Delta^k p(0) = \pi_0 = 0$ . Par définition de l'opérateur  $\Delta^k$  on obtient la contrainte suivante sur la distribution  $p$  :

$$\frac{1}{1 - p_0} = 1 - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h^+, \quad (9.12)$$

### Estimation du nombre d'espèces

On se place dorénavant dans un modèle où la distribution  $p$  est une distribution  $k$ -monotone d'abondance. La procédure d'estimation de  $N$  par addition d'une contrainte de  $k$ -monotonie est la suivante. La première étape consiste à estimer  $p^+$  sous contrainte de  $k$ -monotonie, grâce à l'estimateur des moindres carrés, d'en déduire un estimateur pour tous les  $p_i$  pour  $i \geq 1$  puis un estimateur  $\hat{p}_0^{k,LSE}$  de  $p_0$  par la définition suivante issue de (9.12) :

$$\hat{p}_0^{k,LSE} = 1 - \frac{1}{1 - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h \hat{p}_h^+}. \quad (9.13)$$

où  $\hat{p}^+$  désigne l'estimateur des moindres carrés de  $p^+$  sous contrainte de  $k$ -monotonie. L'estimation de  $N$  est ensuite effectuée à partir de l'estimateur suivant :

$$\hat{N}^{k,LSE} = \left\lfloor \frac{D}{1 - \hat{p}_0^{k,LSE}} \right\rfloor \quad (9.14)$$

Le degré  $k$  peut être imposé par l'utilisateur ou inféré, par exemple à l'aide de la procédure de tests multiples présentée au Chapitre 10. L'hypothèse de  $k$ -monotonie de ce modèle peut être justifiée au moyen du test de  $k$ -monotonie proposé dans ce même chapitre.

L'étude statistique de l'estimateur  $\hat{N}^{k,LSE}$ , et notamment le développement d'intervalles de confiance, nécessiterait une caractérisation de sa loi limite. Dans le cas où  $k = 2$  cela a été fait au chapitre *Convex Estimation* du livre *Capture and Recapture* (Durot et al., 2017) que l'on peut trouver en Annexe. Dans la Section 9.3 des intervalles de confiance, calculés sur la base de simulation, sont donnés, dans le cas où  $p$  est une distribution de Poisson dont le paramètre est choisi pour que  $p$  soit  $k$ -monotone d'abondance, pour différents  $k$ .

### Seconde méthode : avec l'estimateur empirique

#### Définition des estimateurs

Il est également possible de définir une procédure d'estimation de  $N$  basée uniquement sur l'estimateur empirique. En ce cas la contrainte de  $k$ -monotonie porte uniquement sur la condition d'identifiabilité (9.12), il s'agit donc d'une façon de prolonger la distribution empirique, et non pas d'une contrainte de forme à proprement parler. En particulier, notons que si la distribution empirique n'est pas  $k$ -monotone, l'estimateur de  $p$  ne le sera pas non plus.

De même que pour la première méthode, la condition d'identifiabilité (9.12) permet de déduire un estimateur de  $p_0$ , puis de  $N$ , à partir de l'estimateur empirique de  $p^+$ , c'est-à-dire  $\tilde{p}$  où  $\tilde{p}_j = S_j/D$ . Plus formellement l'estimateur de  $p_0$  choisi est :

$$\hat{p}_0^{k,emp} = 1 - \frac{D}{D - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h S_h}. \quad (9.15)$$

L'estimateur de  $N$  est :

$$\hat{N}^{k,emp} = \left\lfloor \frac{D}{1 - \hat{p}_0^{k,emp}} \right\rfloor. \quad (9.16)$$

#### Résultats statistiques

L'estimateur  $\hat{N}^{k,emp}$  du nombre d'espèces  $N$  défini à l'équation (9.16) s'écrit également :

$$\hat{N}^{k,emp} = D - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h S_h. \quad (9.17)$$

En effet par les équations (9.16) et (9.13), on a les égalités suivantes :

$$\widehat{N}^{k,emp} = \left[ \frac{D}{1 - \widehat{p}_0^{k,emp}} \right] = \left[ D \left( 1 - \sum_{j=1}^k (-1)^j C_k^j \frac{S_j}{D} \right) \right] = D - \sum_{j=1}^k (-1)^j C_k^j S_j$$

Dans cette Section nous adopterons les notations suivantes :  $\widehat{N}^k$  désignera  $\widehat{N}^{k,emp}$  et  $\widehat{p}_0^k$  désignera  $\widehat{p}_0^{k,emp}$ . L'estimateur  $\widehat{N}^k$  présente les propriétés suivantes :

**Lemme 63.** 1. *Biais* :

$$\mathbb{E} \left( \widehat{N}^k \right) = N - N \nabla^k p_0$$

En particulier si  $p$  est  $k$ -monotone d'abondance l'estimateur  $\widehat{N}^k$  est non-biaisé.

2. *Variance* :

$$\mathbb{V} \left( \widehat{N}^k / \sqrt{N} \right) = p_0 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h - \left( \nabla^k p_0 \right)^2$$

En particulier si  $p$  est  $k$ -monotone d'abondance ceci se réécrit :

$$\mathbb{V} \left( \widehat{N}^k / \sqrt{N} \right) = p_0 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h = \sum_{h=0}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h$$

3. *Erreur de prédiction* :

$$\frac{P(k)}{N} = (N-1) \left( \sum_{h=0}^k (-1)^h C_k^h p_h \right)^2 + \left( \sum_{h=0}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h \right)^2$$

La preuve de ce Lemme figure à la Section 9.5. On énonce également un résultat conditionnel au nombre  $D$  d'espèces observées :

**Lemme 64.** Conditionnellement à l'évènement  $D = d$ , l'estimateur  $\widehat{N}^k$  vérifie les propriétés suivantes :

1. *Biais* :

$$\mathbb{E} \left( \widehat{N}_k / D = d \right) = d - d \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h^+$$

2. *Variance* :

$$\mathbb{V} \left( \widehat{N}_k / D = d \right) = d \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h^+ - \frac{1}{d} \left\{ d - \mathbb{E} \left( \widehat{N}_k / D = d \right) \right\}^2$$

3. *Erreur de prédiction* :

$$\frac{P_d(k)}{d} = (d-1) \left( \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h^+ \right)^2 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h^+$$

Le Théorème 65 est un résultat asymptotique pour l'estimateur du nombre d'espèces  $\widehat{N}^k$  :

**Théorème 65.** Soit la variable aléatoire  $\widehat{s}^k$  définie par l'équation suivante :

$$\widehat{s}^k = \sqrt{\sum_{h=1}^k ((-1)^{h+1} + C_k^h) C_k^h S_h}. \quad (9.18)$$

Alors  $\widehat{s}^k/\sqrt{N}$  est un estimateur consistant de l'écart type de  $\widehat{N}^k$ . De plus si  $\widehat{s}^k \neq 0$ , la convergence en loi suivante est réalisée :

$$\frac{\widehat{N}^k - N}{\widehat{s}^k} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Un intervalle de confiance de niveau  $\alpha$  associé à l'estimation de  $N$  est donc :

$$I^k(\alpha) = \left[ \widehat{N}^k - q_{1-\alpha/2} \widehat{s}^k, \widehat{N}^k + q_{1-\alpha/2} \widehat{s}^k \right] \quad (9.19)$$

où  $q_u$  désigne le quantile d'ordre  $u$  de la gaussienne centrée réduite standard.

Notons que les estimateurs de l'écart-type sont ordonnés :

$$\widehat{s}^{k-1} \leq \widehat{s}^k.$$

Les intervalles de confiance sont alors d'autant plus précis que  $k$  est faible. Pour les premières valeurs de  $k$  on trouve :

- $\widehat{s}^1 = \sqrt{2S_1}$
- $\widehat{s}^2 = \sqrt{6S_1}$
- $\widehat{s}^3 = \sqrt{12S_1 + 6S_2 + 2S_3}$

### A propos du choix de $k$

Plus l'on choisit un degré élevé pour  $k$ , plus la contrainte d'identifiabilité sur  $p_0$  va amener à prendre un  $p_0$  élevé. En effet la définition de la  $k$ -monotonie d'abondance entraîne la propriété  $\nabla^k p_0 = 0$  qui est équivalente à :

$$\begin{aligned} p_0 &= - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \\ &= - \sum_{h=1}^{k-1} (-1)^h C_{k-1}^h p_h - \nabla^k p_0 + \nabla^{k-1} p_0 \\ &= - \sum_{h=1}^{k-1} (-1)^h C_{k-1}^h p_h + \nabla^{k-1} p_1, \end{aligned}$$

où la définition des opérateurs  $\nabla^k$  est donnée à l'équation (9.1). Ainsi si l'on note  $p_0^k$  la valeur de  $p_0$  sous l'hypothèse de  $k$ -monotonie d'abondance pour  $p$ , l'équation suivante est vérifiée :

$$p_0^k = p_0^{k-1} + \nabla^{k-1} p_1 > p_0^{k-1},$$

puisque  $p$  est strictement  $(k-1)$ -monotone. Voir figure 9.7 pour une illustration de cette propriété.



## Illustration sur jeux de données simulés

### Plan de simulation

Afin d'évaluer les performances des estimateurs de la distribution d'abondance et du nombre d'espèces, une étude sur jeux de données simulées a été effectuée. Les estimateurs étudiés sont  $\hat{p}^k$  et  $\tilde{p}$ , pour  $k = \{2, 3, 4\}$ , concernant l'estimation de la distribution d'abondance tronquée, et les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$ ,  $\hat{p}_0^{k,lse}$ ,  $\hat{p}_0^{k,emp}$  et  $\hat{N}^{k,emp}$  qui s'en déduisent, concernant l'estimation de  $p_0$  et  $N$ . Les distributions d'abondance ont été choisies pour être exactement  $\ell$ -monotones d'abondance pour  $\ell \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Ce sont des lois de Poisson de paramètres  $\lambda_\ell$  avec

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 1 \\ \lambda_2 &= 0.5857468 \\ \lambda_3 &= 0.4157371 \\ \lambda_4 &= 0.3225085 \\ \lambda_5 &= 0.2635344\end{aligned}$$

Notons que pour toute valeur de paramètre  $\lambda$  telle que  $\lambda_{\ell+1} \leq \lambda \leq \lambda_\ell$ , la loi de Poisson  $\mathcal{P}(\lambda)$  est  $\ell$ -monotone et non  $(\ell + 1)$ -monotone.

Pour chaque distribution  $p$  les valeurs suivantes du nombre d'espèces ont été considérées :

$$N \in \{30, 100, 500, 1000, 5000, 30000\}. \quad (9.20)$$

A chaque simulation une variable  $D$  de loi  $\mathcal{B}(1 - p_0, N)$  a été tirée puis un  $D$ -échantillon  $X_1, \dots, X_D$  de loi  $p^+$  (voir Théorème 62). Pour chaque configuration 1000 réalisations ont été générées. L'estimation de la distribution d'abondance tronquée est redondante avec les simulations de la Partie I (voir Section 5.5), les simulations effectuées ne sont donc pas illustrées de nouveau dans ce chapitre.

### Estimation de $p_0$

Les tableaux 9.1 et 9.2 représentent l'estimation de  $p_0$  et son écart-type pour  $N = 100, 1000$  et chaque valeur de  $\ell$  décrite dans le plan de simulation. Les trois premières lignes des tableaux représentent les résultats concernant l'estimateur des moindres carrés tandis que les trois dernières lignes représentent les résultats concernant l'estimateur basé sur l'estimateur empirique.

La figure 9.3 représente l'erreur quadratique d'estimation, estimée sur la base de 1000 simulations, et la figure 9.4 représente la variance de l'estimateur  $\hat{p}_0^{k,lse}$ . Les graphes de variance variant peu avec  $\ell$ , seuls ceux pour  $k = 3$  et  $k = 5$  sont représentés.

Les simulations concernant les erreurs quadratiques et les variances des estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$  et  $\hat{p}_0^{k,emp}$  n'ont pas révélé de différences de comportement, mais seulement d'ordre de grandeur, nous avons donc choisi de les représenter seulement pour  $\hat{p}_0^{k,lse}$ . Par ailleurs on retrouve la différence de variance entre ces deux estimateurs dans les tableaux 9.1 et 9.2.

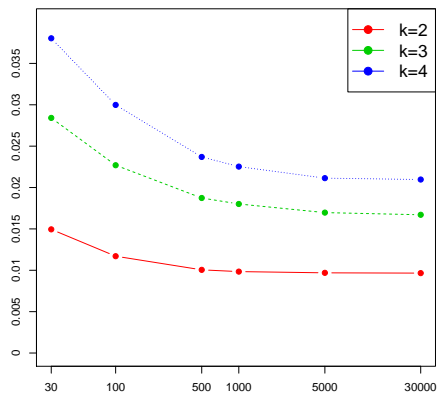
Table 9.1:  $N = 100$  : Estimation de  $p_0$  par les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,emp}$  et  $\hat{p}_0^{k,lse}$ , pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour des densités d'abondances  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  avec  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ . Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $p_0$  et de son écart-type (entre parenthèse), la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95%.

	$\ell = 1 :$ $p_0 = 0.368$	$\ell = 2$ $p_0 = 0.557$	$\ell = 3$ $p_0 = 0.66$	$\ell = 4$ $p_0 = 0.724$	$\ell = 5$ $p_0 = 0.768$
$\hat{p}_0^{2,lse}$	<b>0.47</b> 0.041 [0.39,0.55]	<b>0.55</b> 0.038 [0.47,0.61]	<b>0.59</b> 0.033 [0.52,0.64]	<b>0.63</b> 0.017 [0.6,0.65]	<b>0.62</b> 0.032 [0.54,0.67]
$\hat{p}_0^{3,lse}$	<b>0.51</b> 0.053 [0.42,0.62]	<b>0.61</b> 0.049 [0.51,0.69]	<b>0.65</b> 0.043 [0.56,0.72]	<b>0.71</b> 0.02 [0.67,0.73]	<b>0.69</b> 0.042 [0.59,0.75]
$\hat{p}_0^{4,lse}$	<b>0.53</b> 0.061 [0.43,0.67]	<b>0.64</b> 0.058 [0.53,0.74]	<b>0.69</b> 0.051 [0.58,0.77]	<b>0.76</b> 0.023 [0.71,0.78]	<b>0.73</b> 0.049 [0.62,0.8]
$\hat{p}_0^{2,emp}$	<b>0.46</b> 0.05 [0.35,0.55]	<b>0.55</b> 0.04 [0.46,0.62]	<b>0.59</b> 0.035 [0.5,0.64]	<b>0.61</b> 0.033 [0.53,0.66]	<b>0.62</b> 0.032 [0.54,0.67]
$\hat{p}_0^{3,emp}$	<b>0.48</b> 0.096 [0.24,0.62]	<b>0.6</b> 0.065 [0.44,0.7]	<b>0.65</b> 0.051 [0.52,0.72]	<b>0.68</b> 0.046 [0.56,0.74]	<b>0.69</b> 0.044 [0.58,0.75]
$\hat{p}_0^{4,emp}$	<b>0.43</b> 0.24 [0.18,0.67]	<b>0.62</b> 0.12 [0.34,0.75]	<b>0.68</b> 0.079 [0.47,0.78]	<b>0.71</b> 0.069 [0.53,0.79]	<b>0.73</b> 0.061 [0.57,0.8]

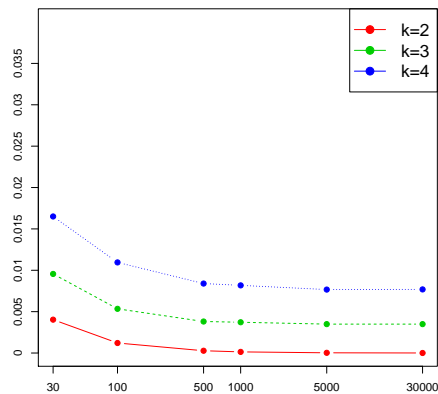
Table 9.2:  $N = 1000$  : Estimation de  $p_0$  par les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,emp}$  et  $\hat{p}_0^{k,lse}$ , pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour des densités d'abondances  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  avec  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ . Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $p_0$  et de son écart-type (entre parenthèse), la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95%.

	$\ell = 1$ $p_0 = 0.368$	$\ell = 2$ $p_0 = 0.557$	$\ell = 3$ $p_0 = 0.66$	$\ell = 4$ $p_0 = 0.724$	$\ell = 5$ $p_0 = 0.768$
$\hat{p}_0^{2,lse}$	<b>0.47</b> 0.015 [0.44,0.5]	<b>0.56</b> 0.012 [0.53,0.58]	<b>0.59</b> 0.01 [0.57,0.61]	<b>0.61</b> 0.011 [0.59,0.62]	<b>0.62</b> 0.0095 [0.6,0.64]
$\hat{p}_0^{3,lse}$	<b>0.5</b> 0.019 [0.47,0.54]	<b>0.61</b> 0.018 [0.58,0.65]	<b>0.66</b> 0.014 [0.63,0.69]	<b>0.68</b> 0.015 [0.66,0.7]	<b>0.69</b> 0.012 [0.67,0.72]
$\hat{p}_0^{4,lse}$	<b>0.52</b> 0.02 [0.49,0.57]	<b>0.64</b> 0.023 [0.6,0.69]	<b>0.7</b> 0.019 [0.66,0.73]	<b>0.72</b> 0.02 [0.69,0.74]	<b>0.74</b> 0.015 [0.71,0.76]
$\hat{p}_0^{2,emp}$	<b>0.47</b> 0.016 [0.43,0.49]	<b>0.56</b> 0.012 [0.53,0.58]	<b>0.59</b> 0.01 [0.57,0.61]	<b>0.61</b> 0.0096 [0.59,0.63]	<b>0.62</b> 0.0097 [0.6,0.64]
$\hat{p}_0^{3,emp}$	<b>0.49</b> 0.028 [0.43,0.54]	<b>0.61</b> 0.018 [0.58,0.65]	<b>0.66</b> 0.014 [0.63,0.68]	<b>0.68</b> 0.013 [0.66,0.7]	<b>0.7</b> 0.012 [0.67,0.72]
$\hat{p}_0^{4,emp}$	<b>0.48</b> 0.051 [0.37,0.56]	<b>0.64</b> 0.026 [0.58,0.69]	<b>0.7</b> 0.019 [0.65,0.73]	<b>0.72</b> 0.016 [0.69,0.75]	<b>0.74</b> 0.015 [0.7,0.77]

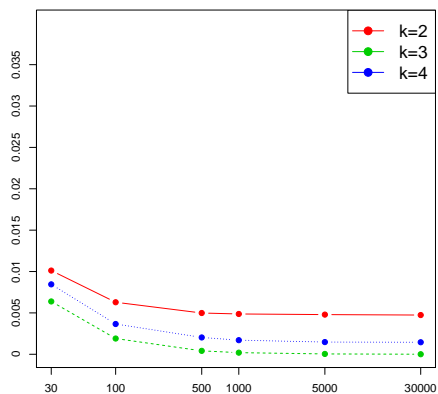
Figure 9.3: Estimation de l'erreur quadratique de l'estimateur  $\hat{p}_0^{k,lse}$  en fonction du nombre d'espèces  $N$  pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  pour  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ .



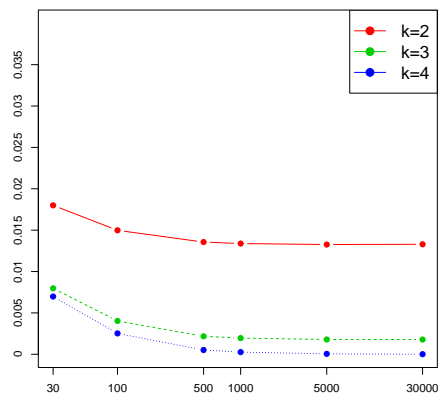
(a)  $\ell = 1$ .



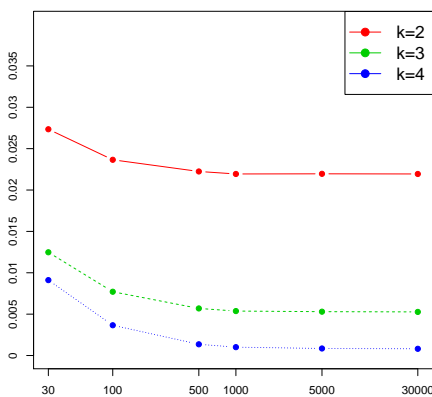
(b)  $\ell = 2$ .



(c)  $\ell = 3$ .

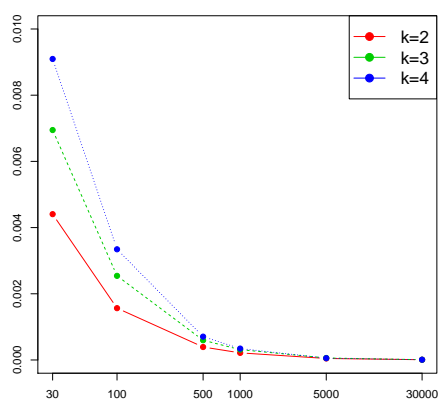
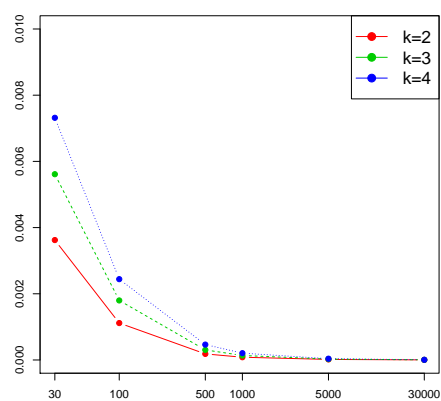


(d)  $\ell = 4$ .



(e)  $\ell = 5$ .

Figure 9.4: Estimation de la variance de l'estimateur  $\hat{p}_0^{k,lse}$  en fonction du nombre d'espèces  $N$  pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  pour  $\ell \in \{1, 5\}$ .

(a)  $\ell = 1$ .(b)  $\ell = 5$ .

La figure 9.3 ainsi que les tableaux 9.1 et 9.2 montrent que l'estimation est meilleure lorsque  $k \leq \ell$ , et d'autant meilleure que  $k$  est proche de  $\ell$ . En effet les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$  et  $\hat{p}_0^{k,emp}$  sont alors en moyenne plus proche de  $p_0$ , en d'autres termes leur erreur quadratique est plus faible.

La figure 9.4 en revanche illustre le fait que plus  $k$  est faible et plus la variance des estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$  et  $\hat{p}_0^{k,emp}$  est faible. Lorsque  $k > \ell$  et que  $N$  est élevé ( $N \geq 500$ ), l'erreur quadratique est essentiellement due au terme de biais.

Les tableaux 9.1 et 9.2 illustrent le fait que les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$  sont d'autant plus élevés que  $k$  est grand, ce qui est aussi le cas en moyenne des estimateurs  $\hat{p}_0^{k,emp}$  lorsque  $N$  est suffisamment grand ( $N > 100$ ). Il existe alors un intérêt à se placer sous le *bon modèle*, c'est-à-dire tel que  $p$  est  $k$ -monotone et non  $(k+1)$ -monotone, -ou en d'autres termes que  $k = \ell$ - afin de ne pas sous-estimer ou surestimer  $p_0$ .

Concernant la comparaison entre les estimateurs  $\hat{p}_0^{k,lse}$  et  $\hat{p}_0^{k,emp}$  notons que les deux présentent des comportements très proches : ils ont le même type de décroissance pour l'erreur quadratique et pour la variance, la même tendance à augmenter avec le paramètre  $\ell$  et à estimer de façon plus précise lorsque l'on se place sous le *meilleur modèle*. Les écart-types sont faibles devant l'estimation à partir de  $N = 1000$  (Tableau 9.2). Par ailleurs lorsque  $k \leq \ell$ , les estimations moyennes sont significativement les mêmes. En revanche dans le cas où  $k > \ell$ , l'estimateur des moindres carrés a tendance à surestimer  $p_0$  plus que l'estimateur basé sur l'estimateur empirique. Pour finir, l'étude des écart-types et des intervalles de confiance révèlent une plus forte variabilité de l'estimateur  $\hat{p}_0^{k,emp}$  par rapport à  $\hat{p}_0^{k,lse}$ . Les intervalles de confiance de ce dernier sont en effet plus resserrés, ce qui est un atout dans les cas où l'estimateur est consistant. Notons que ces différences sont particulièrement marquées quand  $N$  est faible ( $N = 100$ ) et s'estompent quand  $N$  tend vers l'infini.

### Estimation de $N$

Les tableaux 9.3, 9.4 et 9.5 représentent l'estimation de  $N$  et son écart-type pour différentes valeurs de  $N$  et chaque valeur de  $\ell$  décrite dans le plan de simulation. De même que pour l'estimation de  $p_0$ , les trois premières lignes des tableaux représentent les résultats concernant l'estimateur des moindres carrés tandis que les trois dernières lignes représentent les résultats concernant l'estimateur basé sur l'estimateur empirique. En particulier les intervalles de confiance sont raisonnable à partir de  $N = 1000$ .

La figure 9.5 représente l'erreur quadratique d'estimation, estimée sur la base de 1000 simulations, et la figure 9.6 représente la variance de l'estimateur  $\hat{N}^{k,lse}$ . Les graphes de variance variant peu avec  $\ell$ , seuls ceux pour  $k = 3$  et  $k = 5$  sont représentés. Pour ces deux figures, afin d'obtenir une échelle comparable entre les différents estimateurs de  $N$ , les quantités ont été renormalisées par  $N$ . Les simulations concernant les erreurs quadratiques et les variances des estimateurs  $\hat{N}^{k,lse}$  et  $\hat{N}^{k,emp}$  n'ont pas révélé de différences notables de comportement, seulement d'ordre de grandeur, nous avons donc choisi de les représenter seulement pour  $\hat{N}^{k,lse}$ . Par ailleurs les différences de variance entre ces deux estimateurs sont disponibles aux tableaux 9.3, 9.4 et 9.5.

Table 9.3:  $N = 30$  : Estimation de  $N$  par les estimateurs  $\widehat{N}^{k,emp}$  et  $\widehat{N}^{k,lse}$ , pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour des densités d'abondances  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  avec  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ . Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $N$  (en gras) et de son écart-type, la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95%.

	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$
$\widehat{N}^{2,lse}$	<b>36</b> 6.7 [24,50]	<b>30</b> 7.4 [17,45]	<b>25</b> 6.9 [12,39]	<b>21</b> 6.8 [9,36]	<b>18</b> 6.4 [6,30]
$\widehat{N}^{3,lse}$	<b>40</b> 9 [25,59]	<b>35</b> 10 [19,58]	<b>30</b> 9.5 [13,49]	<b>26</b> 9.2 [10,45]	<b>23</b> 8.5 [8,40]
$\widehat{N}^{4,lse}$	<b>42</b> 11 [25,68]	<b>40</b> 13 [19,70]	<b>35</b> 12 [14,60]	<b>31</b> 12 [10,55]	<b>27</b> 11 [8,50]
$\widehat{N}^{2,emp}$	<b>35</b> 7.7 [21,50]	<b>30</b> 7.8 [16,45]	<b>25</b> 7.1 [12,39]	<b>21</b> 6.8 [9,36]	<b>18</b> 6.4 [6,30]
$\widehat{N}^{3,emp}$	<b>36</b> 13 [12,60]	<b>35</b> 12 [14,59]	<b>30</b> 10 [9,50]	<b>26</b> 9.6 [7,45]	<b>23</b> 8.8 [6,40]
$\widehat{N}^{4,emp}$	<b>36</b> 20 [5,74]	<b>38</b> 17 [5,74]	<b>34</b> 15 [4,64]	<b>30</b> 13 [4,55]	<b>27</b> 12 [4,50]

Table 9.4:  $N = 100$  : Estimation de  $N$  par les estimateurs  $\widehat{N}^{k,emp}$  et  $\widehat{N}^{k,lse}$ , pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour des densités d'abondances  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  avec  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ . Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $N$  et de son écart-type (entre parenthèse), la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95%.

	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$
$\widehat{N}^{2,lse}$	<b>120</b> 13 [96,148]	<b>100</b> 13 [75,127]	<b>83</b> 13 [58,110]	<b>64</b> 15 [42,86]	<b>61</b> 12 [39,87]
$\widehat{N}^{3,lse}$	<b>130</b> 18 [100,174]	<b>116</b> 19 [82,157]	<b>100</b> 18 [66,138]	<b>82</b> 20 [55,111]	<b>77</b> 17 [46,112]
$\widehat{N}^{4,lse}$	<b>137</b> 23 [103,195]	<b>127</b> 25 [85,183]	<b>114</b> 24 [70,165]	<b>98</b> 25 [65,135]	<b>90</b> 22 [52,135]
$\widehat{N}^{2,emp}$	<b>118</b> 14 [90,144]	<b>99</b> 14 [73,128]	<b>83</b> 14 [39,111]	<b>70</b> 13 [47,96]	<b>61</b> 12 [39,84]
$\widehat{N}^{3,emp}$	<b>124</b> 23 [78,168]	<b>114</b> 21 [73,154]	<b>100</b> 20 [44,140]	<b>86</b> 18 [53,123]	<b>76</b> 16 [47,108]
$\widehat{N}^{4,emp}$	<b>123</b> 37 [50,191]	<b>122</b> 31 [64,184]	<b>113</b> 28 [45,165]	<b>99</b> 25 [54,149]	<b>89</b> 22 [49,130]

Table 9.5:  $N = 1000$  : Estimation de  $N$  par les estimateurs  $\widehat{N}^{k,emp}$  et  $\widehat{N}^{k,lse}$ , pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour des densités d'abondances  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  avec  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ . Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $N$  et de son écart-type (entre parenthèse), la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95%.

	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$
$\widehat{N}^{2,lse}$	<b>1186</b> 46 [1095,1276]	<b>1000</b> 44 [915,1086]	<b>832</b> 43 [745,921]	<b>708</b> 30 [662,741]	<b>609</b> 39 [535,688]
$\widehat{N}^{3,lse}$	<b>1270</b> 59 [1163,1397]	<b>1151</b> 66 [1027,1289]	<b>1000</b> 62 [876,1126]	<b>867</b> 49 [794,920]	<b>759</b> 53 [656,868]
$\widehat{N}^{4,lse}$	<b>1313</b> 66 [1203,1461]	<b>1246</b> 91 [1085,1439]	<b>1126</b> 86 [955,1300]	<b>993</b> 75 [887,1077]	<b>887</b> 71 [750,1030]
$\widehat{N}^{2,emp}$	<b>1183</b> 45 [1097,1273]	<b>1000</b> 44 [913,1084]	<b>830</b> 41 [537,907]	<b>705</b> 38 [630,777]	<b>610</b> 37 [538,680]
$\widehat{N}^{3,emp}$	<b>1244</b> 74 [1100,1395]	<b>1154</b> 66 [1021,1276]	<b>997</b> 59 [663,1107]	<b>868</b> 53 [762,966]	<b>761</b> 51 [662,859]
$\widehat{N}^{4,emp}$	<b>1227</b> 120 [994,1468]	<b>1246</b> 97 [1045,1436]	<b>1122</b> 84 [760,1276]	<b>1001</b> 73 [850,1135]	<b>891</b> 69 [755,1025]



Figure 9.5: Estimation de l'erreur quadratique de l'estimateur  $\widehat{N}^{k,lse}$  renormalisée par  $N$  en fonction du nombre d'espèces  $N$  pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  pour  $\ell \in \{1, \dots, 5\}$ .

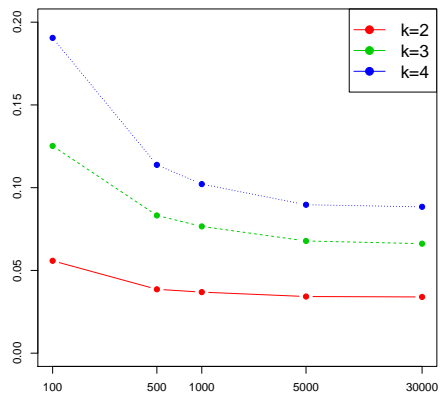
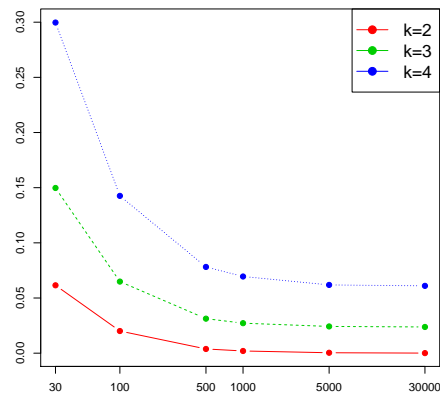
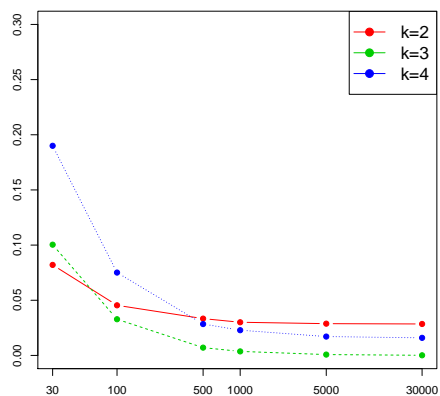
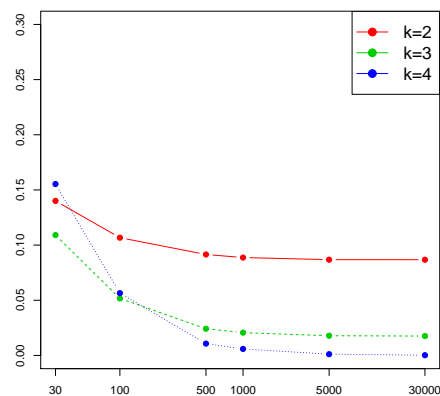
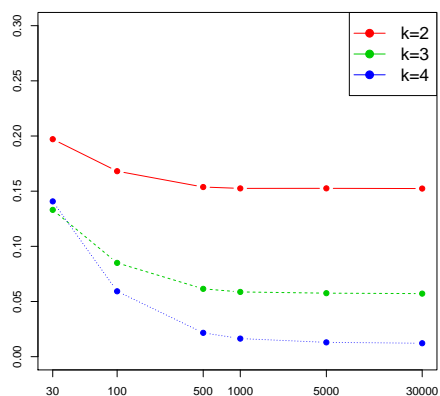
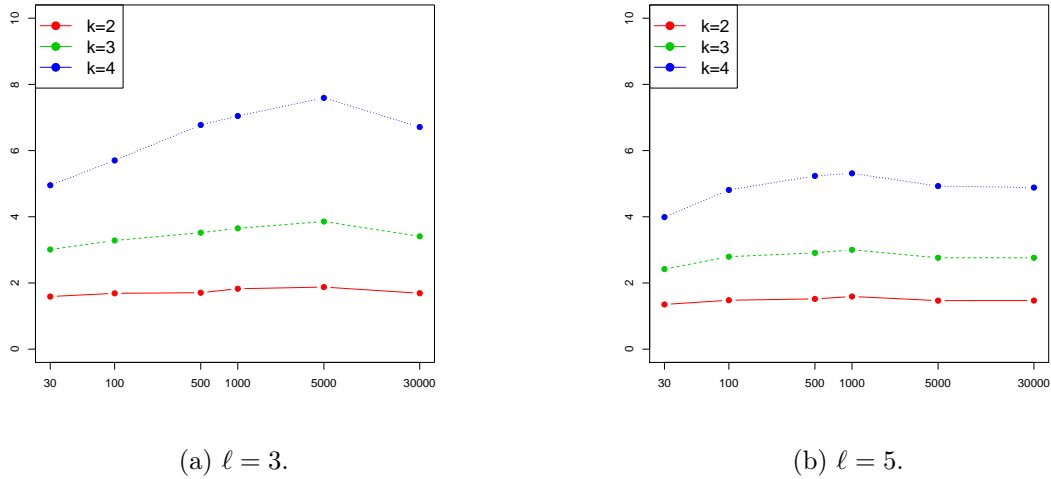
(a)  $\ell = 1$ .(b)  $\ell = 2$ .(c)  $\ell = 3$ .(d)  $\ell = 4$ .(e)  $\ell = 5$ .

Figure 9.6: Estimation de la variance de l'estimateur  $\widehat{N}^{k,lse}$  renormalisée par  $N$  en fonction du nombre d'espèces  $N$  pour  $k \in \{2, 3, 4\}$  et pour  $p$  de loi de Poisson de paramètre  $\lambda_\ell$  pour  $\ell \in \{3, 5\}$ .



De même que pour l'estimation de  $p_0$ , les estimateurs de  $N$  sont d'autant plus élevés que  $k$  est grand. Ceci entraîne un phénomène de sous-estimation de  $N$  lorsque l'on n'est pas sous le *bon modèle* (soit  $k = \ell$ ) et justifie le fait de sélectionner le bon degré  $k$  de monotonie (voir Chapitre 10).

La figure 9.5 illustre le fait que, contrairement à l'estimation de  $p_0$ , les estimateurs de  $N$  sont biaisés dès lors que l'on ne se place pas sous le *bon modèle*, soit celui pour lequel  $p$  est  $\ell$ -monotone d'abondance. L'erreur quadratique des estimateurs renormalisée par  $N$  atteint son asymptotique au voisinage de  $N = 500$  (Figure 9.5). La variance quant à elle est constante par rapport à  $N$  (Figure 9.6).

Concernant la comparaison entre les estimateurs  $\widehat{N}^{k,lse}$  et  $\widehat{N}^{k,emp}$  les mêmes conclusions peuvent être faites que pour l'estimation de  $p_0$ . L'estimateur  $\widehat{N}^{k,lse}$  présente moins de variabilité que  $\widehat{N}^{k,emp}$  (les intervalles de confiance sont plus précis) et ce de façon d'autant plus marquée lorsque  $k > \ell$ . En revanche il a plus tendance à surestimer le nombre d'espèces  $N$  que l'estimateur  $\widehat{N}^{k,emp}$ , en présence d'un modèle mal spécifié. Ces différences s'atténuent lorsque  $N$  tend vers l'infini.

## Conclusion des simulations

Les simulations ont mis en lumière l'intérêt à se placer sous le *bon modèle*, c'est-à-dire de choisir un  $k$  pour lequel la vraie distribution est exactement  $k$ -monotone d'abondance. Le fait de mal spécifier le modèle conduit à une sous-estimation ou une surestimation de l'estimation du nombre d'espèces. Ce point motive la proposition d'une procédure de tests emboîtés, afin d'inférer la valeur du degré  $k$  de monotonie.

Par ailleurs les simulations montrent l'efficacité de la méthode d'estimation lorsque le modèle est choisi de manière adéquate. Les résultats asymptotiques sont en effet atteints autour de  $N = 500$  et les intervalles de confiance sont de longueur satisfaisante pour  $N = 1000$ .

## Illustration sur jeux de données réels

Revenons désormais sur les jeux de données Microbial, Butterfly, Bird et Tomato décrits à la Section 9.1.3. Les Figures 9.7 et 9.8 illustrent les différents estimateurs de  $p_0$  pour  $k \in \{2, 3, 4, 5\}$  définis par l'équation (9.15) et (9.13) respectivement. La valeur estimée du nombre d'espèces  $N$  et les intervalles de confiance associés sont donnés dans le tableau 9.7.

Les figures 9.7 et 9.8 illustrent le fait que, plus  $k$  augmente et plus l'estimateur de  $p_0$  est élevé. De même le choix d'un degré élevé pour  $k$  entraîne une estimation du nombre d'espèces plus élevée. Dans le cas particulier du jeu de données Bird, l'estimateur empirique n'étant pas monotone au voisinage de 0, les estimateurs de  $p_0$  ne sont pas non plus monotones, l'estimation de  $p(0)$  étant alors inférieure à la valeur  $\tilde{p}(1)$ . Les intervalles de confiance de l'estimateur de  $N$  basé sur l'estimateur empirique, quant à eux, sont d'autant plus resserrés que  $k$  est faible, ce qui est cohérent avec le Théorème 65.

Table 9.6: Estimation de  $N$  par l'estimateur  $\hat{N}^{k,emp}$  défini en (9.16). Pour chaque valeur de  $k$ , la première ligne donne l'estimation de  $N$  et de son écart-type (entre parenthèse), la seconde ligne donne l'intervalle de confiance estimé à 95% défini en (9.19).

	Microbial	Butterfly	Bird	Tomato
$k = 2$	<b>1211</b> (47.8) [1117, 1305]	<b>782</b> (26.6) [730, 834]	<b>82</b> (8.1) [66, 98]	<b>4439</b> (92.7) [4257, 4621]
$k = 3$	<b>1485</b> (70.1) [1346, 1624]	<b>796</b> (44.1) [709, 882]	<b>79</b> (14.9) [50, 108]	<b>5438</b> (137) [5169, 5707]
$k = 4$	<b>1722</b> (100) [1526, 1918]	<b>800</b> (73.9) [655, 944]	<b>78</b> (27.9) [23, 133]	<b>6293</b> (194) [5912, 6673]
$k = 5$	<b>1913</b> (142) [1635, 2191]	<b>819</b> (125) [574, 1064]	<b>79</b> (51) [-22, 180]	<b>7020</b> (273) [6486, 7554]

Table 9.7: Estimation de  $N$  par l'estimateur  $\hat{N}^{k,lse}$  défini en (9.14).

	Microbial	Butterfly	Bird	Tomato
$k = 2$	1211	663	87	4297
$k = 3$	1486	677	87	5274
$k = 4$	1729	692	87	6138

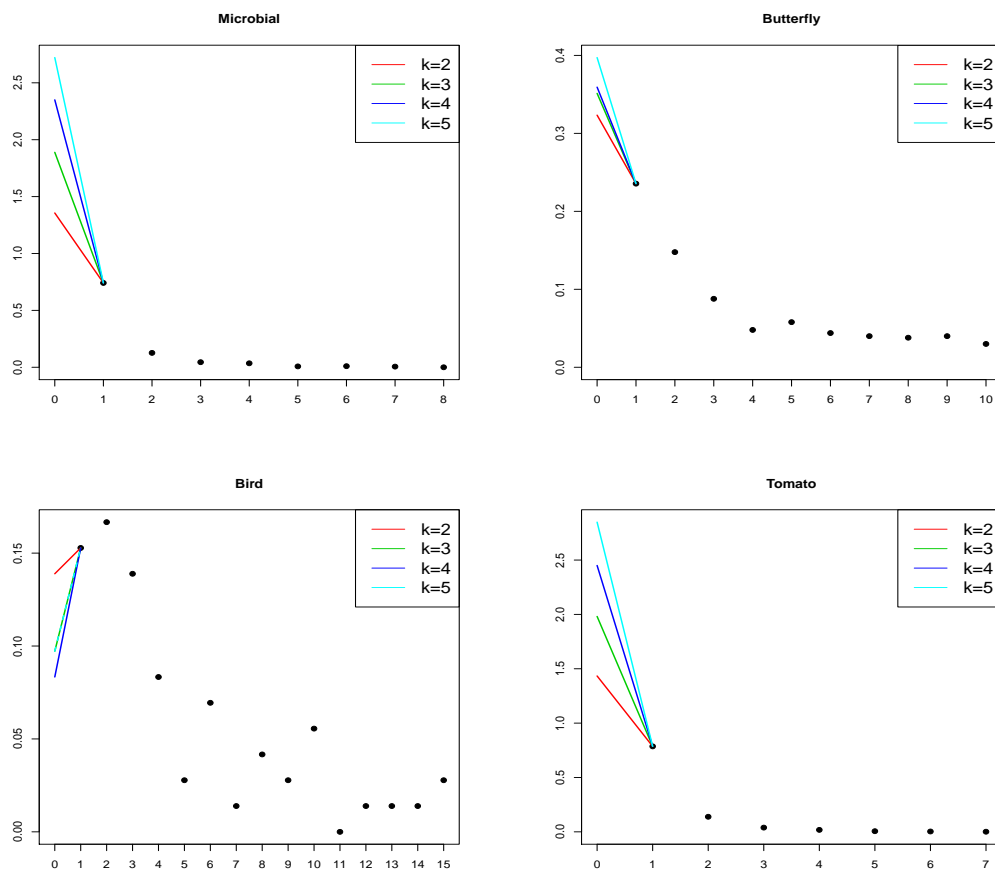


Figure 9.7: Estimation de la distribution d'abondance en  $p_0$  par prolongement de la distribution empirique avec l'hypothèse de  $k$ -monotonie d'abondance.

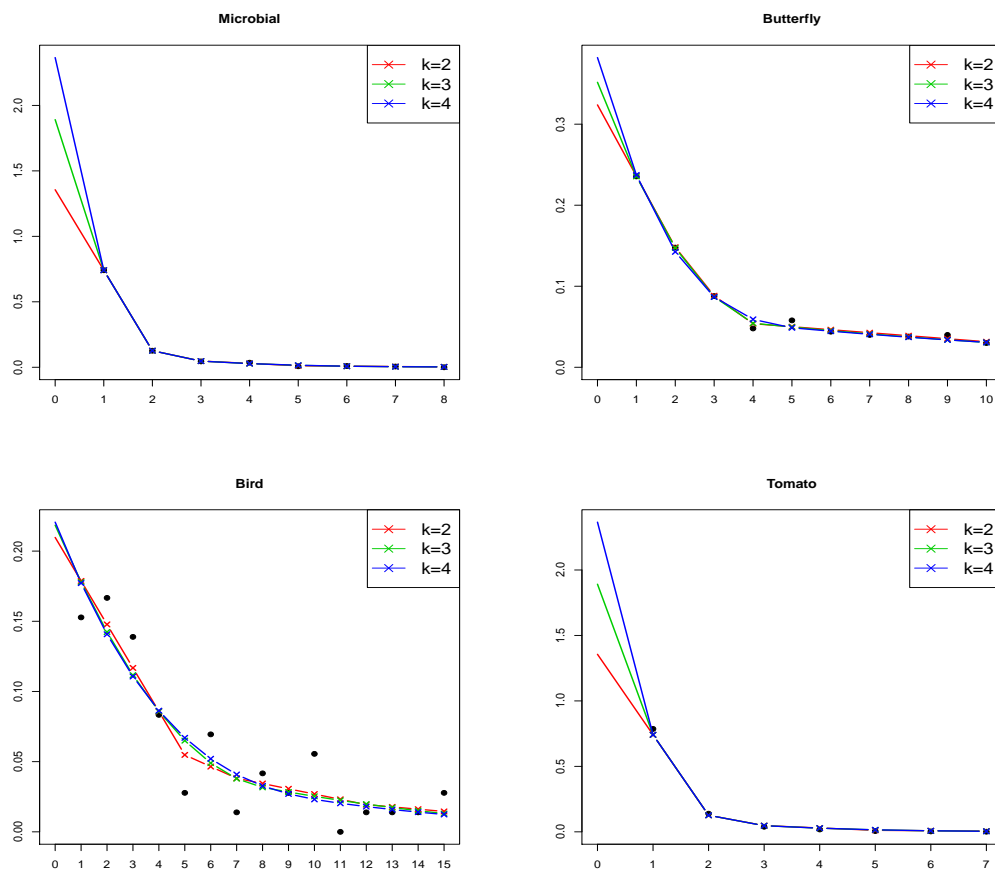


Figure 9.8: Estimation de la distribution d'abondance en  $p_0$  par prolongement de l'estimateur de la distribution d'abondance tronquée sous contrainte de  $k$ -monotonie.

## Preuves

### Preuve du Lemme 63 : propriétés statistiques

On rappelle que la variable aléatoire  $\widehat{N}^k$  s'écrit ainsi :

$$\widehat{N}^k = D - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h S_h = D + S_0 - \nabla^k S_0,$$

la dernière égalité étant due à la définition des opérateurs  $\nabla$  à l'équation (9.1). Or par le Théorème 62,  $\mathbb{E}[D] = N(1 - p_0)$  tandis que l'équation (9.8) permet d'écrire  $S_0 = N - D$  et donc  $\mathbb{E}[S_0] = Np_0$ . L'espérance vaut donc :

$$\mathbb{E}(\widehat{N}^k) = N(1 - p_0) + Np_0 - N\nabla^k p_0 = N - N\nabla^k p_0$$

De plus si  $p$  est  $k$ -monotone d'abondance, alors  $\nabla^k p_0 = 0$ . Le premier point du théorème est donc vérifié.

Montrons le second point. On pose  $\alpha_{k,h} = 1 - (-1)^h C_k^h$ . Alors la variance de  $\widehat{N}^k$  renormalisée se calcule ainsi :

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(\widehat{N}^k / \sqrt{N}) &= \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h}^2 p_h (1 - p_h) - \sum_{h_1 \neq h_2} \alpha_{k,h_1} \alpha_{k,h_2} p_{h_1} p_{h_2} - 2 \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h} p_h p_{\geq k+1} + p_{\geq k+1} (1 - p_{\geq k+1}) \\ &= \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h}^2 p_h - \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h}^2 p_h^2 - \left( \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h} p_h \right)^2 + \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h}^2 p_h^2 \\ &\quad - 2 \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h} p_h p_{\geq k+1} + p_{\geq k+1}^2 - p_{\geq k+1}^2 \\ &= \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h}^2 p_h - \left( \sum_{h=1}^k \alpha_{k,h} p_h + p_{\geq k+1} \right)^2 + p_{\geq k+1} \\ &= \sum_{h=1}^k \left( 1 - (-1)^h C_k^h \right)^2 p_h - \left( \sum_{h=1}^k \left( 1 - (-1)^h C_k^h \right) p_h + p_{\geq k+1} \right)^2 + p_{\geq k+1} \\ &= \sum_{h=1}^k \left( 1 - 2(-1)^h C_k^h + \left( C_k^h \right)^2 \right) p_h - \left( \sum_{h=1}^k p_h + p_{\geq k+1} - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \right)^2 + p_{\geq k+1} \\ &= 1 - p_0 - 2 \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h - \left( 1 - p_0 - \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \right)^2 \end{aligned}$$

Soit :

$$\begin{aligned}
\mathbb{V} \left( \widehat{N}^k / \sqrt{N} \right) &= p_0(1 - p_0) - 2 \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h + 2(1 - p_0) \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \\
&\quad - \left( \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \right)^2 \\
&= p_0(1 - p_0) - 2p_0 \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h - \left( \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h \right)^2 \\
&= p_0 - \left( \sum_{h=1}^k (-1)^h C_k^h p_h + p_0 \right)^2 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h \\
&= p_0 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h - \left( \nabla^k p_0 \right)^2 .
\end{aligned}$$

Le second point du théorème est donc également vérifié. Enfin le dernier point s'obtient en remarquant simplement que :

$$\begin{aligned}
\frac{P(k)}{N} &= (N - 1) \left( \nabla^k p_0 \right)^2 + \left( \sum_{h=0}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h \right)^2 \\
&= (N - 1) \left( \sum_{h=0}^k (-1)^k C_k^h p_h \right)^2 + \left( \sum_{h=0}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h \right)^2
\end{aligned}$$

### Preuve de la Propriété 65 : loi asymptotique

La variance de  $\widehat{N}^k / \sqrt{N}$  s'écrit :

$$\mathbb{V} \left( \widehat{N}^k / \sqrt{N} \right) = p_0 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 p_h - \left( \nabla^k p_0 \right)^2$$

par le Lemme 63. Or la variable aléatoire  $(\widehat{s}^k)^2$  s'écrit :

$$\begin{aligned}
(\widehat{s}^k)^2 &= \sum_{h=1}^k \left( (-1)^{h+1} + C_k^h \right) C_k^h S_h \\
&= \widehat{p}_0 + \sum_{h=1}^k \left( C_k^h \right)^2 \frac{S_h}{N} - \left( \nabla^k \widehat{p}_0 \right)^2
\end{aligned}$$

c'est donc un estimateur consistant de la variance de  $\widehat{N}^k / \sqrt{N}$ . Par continuité,  $\widehat{s}^k$  est donc un estimateur consistant de l'écart-type. La convergence en loi est une application directe du Théorème Central Limite.





# Chapter 10

## Tests de $k$ -monotonie

### Sommaire

---

<b>10.1 Introduction</b>	<b>201</b>
<b>10.2 Testing the <math>k</math>-monotonicity of <math>p^+</math></b>	<b>201</b>
10.2.1 Poisson distributions	204
Simulation study	204
Comparison with parametric testing procedures	205
10.2.2 Spline distributions	211
Simulation study for the Spline distributions	211
10.2.3 Comparison with the bootstrap procedure	215
<b>10.3 Estimating the degree of monotonicity of <math>p^+</math></b>	<b>215</b>
10.3.1 Estimator and asymptotic properties	215
10.3.2 Simulation study	216
<b>10.4 Application to real data sets</b>	<b>218</b>
<b>10.5 Conclusion</b>	<b>221</b>
<b>10.6 Proofs</b>	<b>222</b>
10.6.1 Proof of Theorem 66	222
10.6.2 Proof of Theorem 67	223
10.6.3 Proof of Theorem 68	224

---

## Introduction

**Rappel du cadre statistique** Afin d'estimer le nombre d'espèces dans une population sous contrainte de  $k$ -monotonie d'abondance pour la distribution d'abondance  $p$  nous proposons un test de  $k$ -monotonie pour la loi tronquée  $p^+ = p/(1 - p_0)$ . Les variables observées, notées  $X_1, \dots, X_D$ , sont indépendantes et identiquement distribuées, de loi  $p^+$ . La variable aléatoire  $D$  du nombre d'espèces observées est définie à l'équation (9.7), tous les résultats développés ici seront conditionnels à  $D$ .

Les tests de  $k$ -monotonie peuvent avoir deux fonctions. Les espaces  $\mathcal{P}^k$  de probabilités  $k$ -monotones étant emboîtés ces tests peuvent être liés en une procédure de tests multiples afin d'inférer la valeur de l'entier  $k$  sur la base des observations. Le principe est le suivant : on teste l'hypothèse :

$$\mathbb{H}_0^k : "p^+ \text{ est } k\text{-monotone}"$$

contre l'alternative

$$\mathbb{H}_1^k : "p^+ \text{ est } (k - 1)\text{-monotone mais pas } k\text{-monotone}"$$

pour tous les entiers  $k \geq 1$  dans l'ordre croissant, avec la convention suivante :

$$\mathbb{H}_1^1 : "p^+ \text{ n'est pas décroissante}"$$

On choisit d'estimer  $k$  par  $\hat{k}$  défini comme le plus haut degré de monotonie non-rejeté par le test.

Les tests de  $k$ -monotonie permettent également de valider la légitimité de l'hypothèse de  $k$ -monotonie lors de l'utilisation de l'estimateur des moindres carrés défini en Partie I. En ce cas le degré  $k$  du test est fixé par l'utilisateur.

Dans ce chapitre nous proposons deux procédures de tests basées sur l'estimateur empirique de la distribution d'abondance tronquée ainsi que deux variantes utilisant une méthode Bootstrap.

Ce chapitre est rédigé en anglais.

## Testing the $k$ -monotonicity of $p^+$

Because the observations  $X_1, \dots, X_D$  are distributed according to  $p^+ = p/(1 - p_0)$ , the problem is to propose a procedure for testing whether the  $k$ -monotony of the truncated distribution  $p^+$  is a reasonable assumption. Recall that  $p^+$  is  $k$ -monotone if  $\nabla^k p_j^+ \geq 0$  for all  $j \geq 1$ .

In order to propose a procedure that does not depend on any estimator of  $p_0$ , we will restrict ourselves to the space of probability conditional to  $D$ : our result is valid under the event  $D = d$ .

For the sake of simplicity, we present in this section,  $k$ -monotonicity testing procedures for any discrete distribution  $p$  defined on a finite support included in  $\{0, \dots, \tau\}$ . The procedure will be easily applied to  $p^+$  whose support is included in  $\{1, \dots, \tau\}$ .

Let  $X_1, \dots, X_d$  be a  $d$ -sample with distribution  $p$  and  $f$  the empirical frequencies. Let  $\tilde{\tau}$  be the maximum of the support of the empirical distribution  $\tilde{p}$ ,  $\tilde{\tau} = \max_{i=1, \dots, d} X_i$ .

Let us introduce the following notations.

- $\Gamma$  the matrix with components  $\Gamma_{jj'} = -p_j p_{j'}$  if  $j \neq j'$  and  $\Gamma_{jj} = p_j(1 - p_j)$  for  $0 \leq j, j' \leq \tau$ , and  $\Gamma^{1/2}$  its square-root such that  $\Gamma^{1/2} \Gamma^{1/2} = \Gamma$ .
- $A^k$  the matrix whose lines  $A_j^{kT}$  satisfy  $\nabla^k p_j = A_j^{kT} p$  for  $j = 0, \dots, \tau - 1$ .
- $M^k$  the square-root of the matrix  $A^k \Gamma A^{kT}$ :  $M^k M^k = A^k \Gamma A^{kT}$
- $(Z_{j'}, j' = 0, \dots, \tau - 1)$  are i.i.d.  $\mathcal{N}(0, 1)$  variables, and  $\mathcal{Z}$  is the random vector with components  $Z_{j'}, j' = 0, \dots, \tau - 1$ .
- For  $0 < \alpha < 0.5$ ,

$$q_\alpha^k = \inf_q \left\{ \mathbb{P} \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'}^k Z_{j'} \leq q \right) = \alpha \right\}, \quad (10.1)$$

$$u_\alpha^k = \max_{0 \leq u \leq 1} \left\{ \mathbb{P} \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \left\{ A_j^{kT} \Gamma^{1/2} \mathcal{Z} - \nu_u \sqrt{A_j^{kT} \Gamma A_j^k} \right\} \leq 0 \right) = \alpha \right\},$$

where  $\nu_u$  is the  $u$ -quantile of a  $\mathcal{N}(0, 1)$  variable.

- $\tilde{\Gamma}$ ,  $\tilde{M}^k$ ,  $\tilde{\mathcal{Z}}$ ,  $\tilde{q}_\alpha^k$ ,  $\tilde{u}_\alpha^k$  are defined as above with  $\tilde{p}$  instead of  $p$  and  $\tilde{\tau}$  instead of  $\tau$ .

We propose two testing procedures that will reject the null hypothesis that  $p$  is  $k$ -monotone. The first one, denoted **P1**, rejects the null hypothesis if the minimum of the  $\nabla^k \tilde{p}_j$ 's is smaller than some negative threshold, while the second one, denoted **P2**, rejects the null hypothesis if one of the hypothesis " $\nabla^k p_j \geq 0$ " is rejected. Procedure **P2** is a standardized version of Procedure **P1**.

**P1** The rejection region for testing that  $p$  is  $k$ -monotone is defined as

$$\left\{ \tilde{\mathcal{T}}^k \leq \tilde{q}_\alpha^k \right\} \text{ where } \tilde{\mathcal{T}}^k = \sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tilde{\tau}-1} \nabla^k \tilde{p}_j.$$

Let us note that the threshold  $\tilde{q}_\alpha^k$  defined above, is the  $\alpha$ -quantile of the conditional distribution given  $X_1, \dots, X_d$  of

$$\tilde{\mathcal{U}}^k = \min_{0 \leq j \leq \tilde{\tau}-1} \sum_{j'=0}^{\tilde{\tau}-1} \tilde{M}_{jj'}^k \tilde{Z}_{j'}. \quad (10.2)$$

It is calculated via simulation.

**P2** The second procedure will reject the null hypothesis if there exists  $j$  such that the minimum of  $\nabla^k \tilde{p}_j$  minus some threshold depending on  $j$  is negative. Precisely the rejection region for testing that  $p$  is  $k$ -monotone is defined as

$$\left\{ \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 \right\} \text{ where } \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k = \min_{0 \leq j \leq \tilde{\tau}-1} \left\{ \sqrt{d} \nabla^k \tilde{p}_j - \nu_{\tilde{u}_\alpha^k} \sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k} \right\}.$$

The quantity  $\tilde{u}_\alpha^k$  is calculated by simulation.

We also propose a bootstrap procedure for calculating either the quantiles  $\tilde{q}_\alpha^k$  or the  $\nu_u$  for  $u$  in a grid of values. These procedures called **P1boot** and **P2boot** are described in Section 10.2.3

The two following theorems give the asymptotic properties of the testing procedure.

**Théorème 66. Level of the test.**

Let  $p$  be a  $k$ -monotone distribution with finite support. The testing procedures have asymptotic level  $\alpha$ :

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{T}}^k \leq \tilde{q}_\alpha^k | D = d \right) \leq \alpha, \quad \lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 | D = d \right) \leq \alpha$$

If  $p$  is a strictly  $k$ -monotone distribution with finite support, then we have the following result

**P1** Let  $\sigma^k = \max_{1 \leq j \leq \tau-1} \sqrt{\sum_{j'=1}^{\tau-1} (M_{jj'}^k)^2}$  and  $\beta > 0$ . If the distribution  $p$  satisfies the following property

$$\min_{1 \leq j \leq \tau-1} \nabla^k p_j \geq \sqrt{\frac{2}{d}} \sigma^k \sqrt{\log \frac{\tau}{\beta}}, \quad \text{then } \lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{T}}^k \leq \tilde{q}_\alpha^k | D = d \right) \leq \beta$$

**P2** Let  $\zeta_j^k = \sqrt{A_j^{kT} \Gamma A_j^k}$ , and  $\zeta^k = \max_j \zeta_j^k$ , and let  $\beta > 0$  If the distribution  $p$  satisfies the following property

$$\min_{1 \leq j \leq \tau} \nabla^k p_j \geq \sqrt{\frac{2}{d}} \zeta^k \sqrt{\log \frac{\tau}{\beta}}, \quad \text{then } \lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 | D = d \right) \leq \beta$$

In particular, if the distribution  $p$  is strictly  $k$ -monotone and satisfies the above condition for  $\beta$  that tends to 0, for example  $\beta = 1/\sqrt{d}$ , then the level of the test tends to 0.

**Théorème 67. Power of the test.**

Let  $p$  be a  $k$ -monotone distribution, but not a  $(k+1)$ -monotone distribution and  $\beta > 0$ .

**P1** Let  $\sigma^k = \max_{1 \leq j \leq \tau-1} \sqrt{\sum_{j'=1}^{\tau-1} (M_{jj'}^k)^2}$ . If  $p$  satisfies the following condition:

$$\exists j_0, \nabla^{k+1} p_{j_0} + \frac{1}{\sqrt{d}} \left( \sigma^k \sqrt{2 \log \frac{\tau}{\alpha}} + \zeta_{j_0}^k \sqrt{-2 \log \beta} \right) \leq 0,$$

then we have the following result:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{T}}^{k+1} \geq \tilde{q}_\alpha^{k+1} | D = d \right) \leq \beta.$$

**P2** Let  $\zeta_j^k = \sqrt{A_j^{kT} \Gamma A_j^k}$ . If  $p$  satisfies the following condition:

$$\exists j_0, \nabla^{k+1} p_{j_0} + \frac{\zeta_{j_0}^{k+1}}{\sqrt{d}} \left( -\nu_{\alpha/\tau} + \sqrt{-2 \log \beta} \right) \leq 0$$

then we have the following result:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \geq 0 | D = d \right) \leq \beta.$$

In order to evaluate the performances of the three testing procedures we carry out a simulation study. In Section 10.2.1 we consider Poisson distribution with parameter chosen to ensure  $k$ -monotonicity, and in Section 10.2.2 we consider mixtures of Splines distributions.

## Poisson distributions

### Simulation study

We carry out a simulation study, considering empirical distributions simulated according to Poisson distributions with parameters  $\lambda_h$  chosen as follows: for all  $\lambda \leq \lambda_h$  then  $p \sim \mathcal{P}(\lambda)$  is at least  $h$ -monotone, and for all  $\lambda \in ]\lambda_h, \lambda_{h-1}]$ , then  $p \sim \mathcal{P}(\lambda)$  is  $(h-1)$ -monotone but not  $h$  monotone. For  $h \in \{1, \dots, 10\}$  the values of  $\lambda_h$  are given at Table 10.1. Note that by choosing these values of  $\lambda$  for our simulation study, we are in the best scenario to reject  $H_k$  when  $k = h + 1$ , since the Poisson distribution with parameter  $\lambda_h$  is the most distant from the set of  $k$ -monotone Poisson distributions.

$h$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\lambda_h$	2	1	0.5857	0.4157	0.3225	0.2635	0.2228	0.193	0.1703	0.1523	0.1377

Table 10.1: For  $h \geq 1$ , values of  $\lambda_h$  such that  $\mathcal{P}(\lambda_h)$  is  $h$ -monotone, and for all  $\lambda \in ]\lambda_h, \lambda_{h-1}]$ ,  $\mathcal{P}(\lambda)$  is  $(h-1)$ -monotone but not  $h$ -monotone. For  $\lambda_0 = 2$ , the distribution is unimodal.

When  $\lambda < 1$ , the Poisson distribution  $\mathcal{P}(\lambda)$  is unimodal. In the simulation study, we choose  $\lambda_0 = 2$ , to represent non monotone distributions. For  $h \geq 1$ , the values of  $\lambda_h$  and the differences  $\lambda_h - \lambda_{h+1}$  decrease with  $h$ , see Figure 10.1. Some numerical calculation show that  $\lambda_h$  decreases approximatively as  $1.13/h^{0.9}$ ,  $\lambda_{h+1}/\lambda_h$  decreases as  $1 - 0.84/(h+1)$ , while  $\sqrt{\lambda_h} - \sqrt{\lambda_{h+1}}$  decreases as  $0.64/(h+1)^{1.52}$  (this last calculation will be useful later on). This suggests that testing  $H^{h+1}$  when  $p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$  will be difficult for large  $h$ .

For each value of  $h$ , we estimate the rejection probabilities of hypotheses  $H^k$ , for  $k \in \{1, \dots, 9\}$  on the basis of 500 runs. The results for procedure P1 are given in Table 10.2.

It appears that the level is close to  $\alpha$  when  $k = h$  and equals 0 as soon as  $k$  is smaller than  $h + 1$ . This result confirms Theorem 66 that states that the level of the test of the hypothesis  $H^k$  tends to 0 if the distribution is strictly  $k$ -monotone.

As expected, the power of the test of the hypothesis  $H^{k+1}$  when  $h = k$  decreases with  $k$ . Moreover, for a fixed value of  $h$ , and for  $k \geq h + 1$ , the power of the test of the hypothesis  $H^k$  first increases with  $k$ , then decreases with  $k$ . In fact, that the power is decreasing for large values of  $k$  may be explained as follows: when  $k$  increases, the variances of the components of  $\tilde{\mathcal{T}}^k$  increase, and the 5%-quantiles of the variable  $\tilde{\mathcal{U}}^k$  given at Equation (10.2) becomes strongly negative.

This simulation leads to the following remarks:

- It confirms that the procedure **P1** for testing  $H^k$ , when the true distribution is  $(k-1)$ -monotone, lacks of power when  $k$  is large. For example if the true distribution is 4-monotone, the hypothesis  $H^5$  will not be rejected with probability greater than 0.76 (respectively 0.23) if  $D = 1000$  (respectively  $D = 5000$ ).
- It shows that the power of the test of hypothesis  $H^k$  when the true distribution is  $h$ -monotone (and not  $(h+1)$ -monotone), can be small when  $k - h$  is large. For example if the true distribution is convex ( $h = 2$ ), the hypothesis  $H^7$  will not be rejected with probability greater than 0.72 if  $d = 1000$ . Nevertheless, let us note that the power for testing  $H^3$  is large (it equals 0.76 for  $d = 1000$ ).

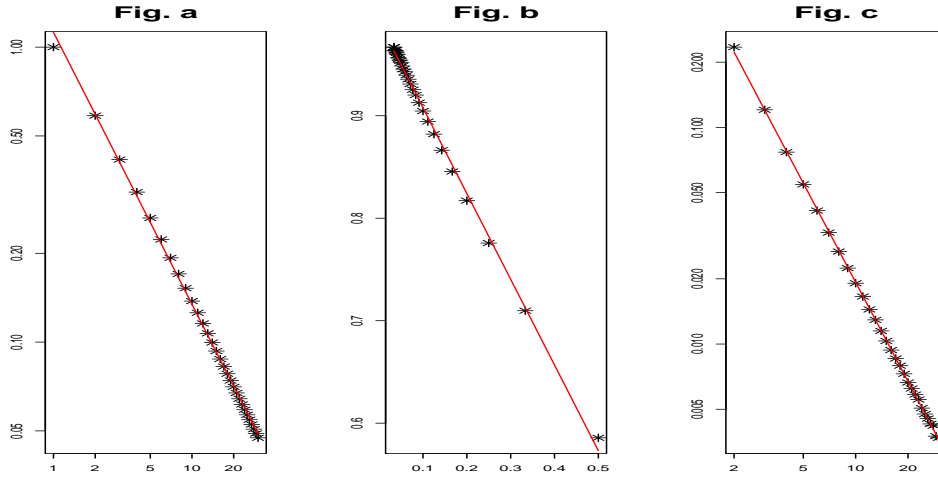


Figure 10.1: Variation of  $\lambda_h$  versus  $h$  and fitted line in red. **Fig. a:**  $\log(\lambda_h)$  versus  $\log(h)$ , fitted =  $0.12 - 0.92 \log(h)$ . **Fig. b:**  $\lambda_{h+1}/\lambda_h$  versus  $1/(h+1)$ , fitted =  $0.99 - 0.84/(h+1)$ . **Fig. c:**  $\log(\sqrt{\lambda_h} - \sqrt{\lambda_{h+1}})$  versus  $\log(h+1)$ , fitted =  $-0.45 - 1.52 \log(h+1)$ .

Finally, let us note that testing the hypothesis  $H^{k+j}$  for  $j \geq 1$ , when we rejected  $H^k$  is without interest, because we know that a  $(k+j)$ -monotone distribution is necessarily  $k$ -monotone. Therefore a natural idea is to modify the procedure in order to test the hypothesis  $H^k$  if  $H^{k-1}$  is not rejected. In other words, if  $H^{k-1}$  is rejected, we decide that  $H^\ell$  is rejected for all  $\ell \geq k$ . The probabilities of not rejecting the hypotheses  $H^k$  are estimated on the basis of 500 runs and reported in Table 10.3.

**Comparison with procedures P2** The results using procedures **P2** are slightly worse or equivalent to those of procedure **P1**, see Table 10.4. This is easily understandable in the case of Poisson distribution because some numerical calculation shows that for  $k \geq h+1$ ,  $\min\{0, \nabla^k p_j^h\}$  increases with  $j$ , as well as  $\min\{0, \nabla^k p_j^h / \sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k}\}$ , see Table 10.5. Therefore the rejection of the null hypothesis lies essentially on  $\nabla^k p_0^h$ , whatever the procedure.

### Comparison with parametric testing procedures

Our simulation study showed that the testing procedure lacks of power both when  $k$  and  $h$  increase. We would like to understand if this difficulty is inherent to the testing problem, or comes from a bad choice of the testing procedure. For the sake of simplicity we focus on the power when testing  $H^k$  with  $k = h+1$ .

To answer our question, we will consider a parametric framework where the distribution is known to be a Poisson distribution. It is then possible to propose a parametric testing procedure for testing the  $k$ -monotonicity, where the null hypothesis is a simple hypothesis. This parametric framework will constitute a kind of benchmark for the performances of the test.

We propose the following parametric testing procedure: for  $h \geq 1$ , we test the null hypothesis that  $p$  is at least  $(h+1)$ -monotone against the alternative that  $p$  is  $h$ -monotone but not  $(h+1)$ -monotone. In other words, we test

$$p \sim \mathcal{P}(\lambda_{h+1}) \text{ against } p \sim \mathcal{P}(\lambda) \text{ with } \lambda \in ]\lambda_{h+1}, \lambda_h],$$

Table 10.2: Procedure **P1**: Estimated probabilities of rejecting the hypothesis  $H^k$ , for Poisson distributions with parameters  $\lambda_h$  given at Table 10.1.

For $D = 1000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = 1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.036	<b>1</b>
$k = 2$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.058	<b>0.990</b>	<i>1</i>
$k = 3$	0	0	0	0	0	0	0	0.060	<b>0.760</b>	<i>0.958</i>	0.370
$k = 4$	0	0	0	0	0	0.002	0.030	<b>0.422</b>	<i>0.814</i>	<i>0.646</i>	0.074
$k = 5$	0	0	0	0	0	0.064	<b>0.236</b>	<i>0.560</i>	<i>0.678</i>	0.268	0.042
$k = 6$	0	0	0	0.010	0.060	<b>0.216</b>	0.378	<i>0.524</i>	0.470	0.108	0.042
$k = 7$	0	0	0.014	0.062	<b>0.148</b>	0.300	0.362	0.410	0.272	0.056	0.058
$k = 8$	0.010	0.018	0.050	<b>0.126</b>	0.224	0.326	0.320	0.256	0.160	0.042	0.062
$k = 9$	0.030	0.044	<b>0.102</b>	0.178	0.244	0.296	0.252	0.206	0.112	0.036	0.058
$k = 10$	0.080	<b>0.080</b>	0.142	0.206	0.240	0.268	0.192	0.158	0.090	0.042	0.060

For $D = 5000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = 1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.034	<b>1</b>
$k = 2$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.056	<b>1</b>	<i>1</i>
$k = 3$	0	0	0	0	0	0	0	0.062	<b>1</b>	<i>1</i>	<i>0.992</i>
$k = 4$	0	0	0	0	0	0	0.052	<b>0.960</b>	<i>1</i>	<i>1</i>	0.198
$k = 5$	0	0	0	0	0	0.062	<b>0.766</b>	<i>0.994</i>	<i>1</i>	<i>0.762</i>	0.036
$k = 6$	0	0	0	0	0.040	<b>0.494</b>	<i>0.904</i>	<i>0.986</i>	<i>0.962</i>	0.260	0.018
$k = 7$	0	0	0.002	0.056	<b>0.370</b>	<i>0.748</i>	<i>0.910</i>	<i>0.948</i>	<i>0.694</i>	0.092	0.036
$k = 8$	0	0.004	0.060	<b>0.256</b>	0.580	<i>0.776</i>	<i>0.852</i>	<i>0.788</i>	0.360	0.044	0.050
$k = 9$	0.006	0.070	<b>0.156</b>	0.434	<i>0.650</i>	<i>0.738</i>	<i>0.746</i>	<i>0.564</i>	0.166	0.040	0.050
$k = 10$	0.042	<b>0.170</b>	0.306	0.490	<i>0.628</i>	<i>0.636</i>	<i>0.584</i>	0.368	0.090	0.042	0.048

assuming that  $X_1, \dots, X_d$  are i.i.d. with distribution  $\mathcal{P}(\lambda)$ .

For this testing procedure, as well as for procedure **P1** (see Theorem 67), the rate of testing is the parametric rate  $1/\sqrt{d}$ . Nevertheless the power depends also strongly on  $k$ . Instead of studying the decreasing monotonicity of the power versus  $k$ , that depends also on  $d$ , we calculate the minimal number of observations such that the power of the test is greater than some fixed value, and study for each procedure how this number increases with  $k$ . Let us describe how these quantities are calculated according to the testing procedure.

We denote  $p = p^h$  the density of a Poisson distribution with parameter  $\lambda_h$ .

**Procedure P1** Let  $q_\alpha^{h+1}$  be defined at Equation (10.1) calculated for  $p = p^{h+1}$  and  $\tau$  chosen large enough to get  $\sum_{j=0}^{\tau} p_j \approx 1$ .

Let  $M^{h+1,h}$  be the square-root of the matrix  $A^{h+1}\Gamma^h(A^{h+1})^T$ , where  $\Gamma^h$  is calculated for  $p = p^h$ .

For a sample size  $d$ , let  $\pi_{\alpha,d}^h$  be defined as follows:

$$\pi_{\alpha,d}^h = \mathbb{P} \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \left\{ \sqrt{d}(A_j^{h+1})^T p^h + \sum_{j'=1}^{\tau-1} M_{jj'}^{h+1,h} Z_{j'} \right\} \leq q_\alpha^{h+1} \right).$$

Following the proof of Theorem 67, it is easy to show that when  $d$  is large enough,  $\pi_{\alpha,d}^h$

Table 10.3: Procedure **P1**: Estimated probabilities of rejecting the hypothesis  $H^k$  knowing that  $H_{k-1}$  is not rejected, for Poisson distributions with parameters  $\lambda_h$  given at Table 10.1. In bold character, the probabilities of rejecting  $H^k$  with  $k = h + 1$ , for  $h \geq 0$ . In italic character, the probabilities of rejecting greater than 0.5.

For $D = 1000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = 1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.036	1
$k = 2$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.058	0.990	1
$k = 3$	0	0	0	0	0	0	0	0.060	0.760	0.994	1
$k = 4$	0	0	0	0	0	0.002	0.030	0.422	0.826	0.994	1
$k = 5$	0	0	0	0	0	0.064	0.236	0.560	0.826	0.994	1
$k = 6$	0	0	0	0.010	0.060	0.216	0.378	0.566	0.826	0.994	1
$k = 7$	0	0	0.014	0.062	0.148	0.300	0.396	0.568	0.826	0.994	1
$k = 8$	0.010	0.018	0.050	0.126	0.224	0.330	0.398	0.568	0.826	0.994	1
$k = 9$	0.030	0.044	0.102	0.180	0.248	0.338	0.398	0.568	0.826	0.994	1
$k = 10$	0.080	0.080	0.142	0.212	0.258	0.346	0.398	0.568	0.826	0.994	1

For $D = 5000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = 1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.034	1
$k = 2$	0	0	0	0	0	0	0	0	0.056	1	1
$k = 3$	0	0	0	0	0	0	0	0.062	1	1	1
$k = 4$	0	0	0	0	0	0	0.052	0.960	1	1	1
$k = 5$	0	0	0	0	0	0.062	0.766	0.994	1	1	1
$k = 6$	0	0	0	0	0.040	0.494	0.904	0.994	1	1	1
$k = 7$	0	0	0.002	0.056	0.370	0.748	0.918	0.994	1	1	1
$k = 8$	0	0.004	0.060	0.256	0.580	0.780	0.922	0.994	1	1	1
$k = 9$	0.006	0.070	0.156	0.434	0.652	0.782	0.922	0.994	1	1	1
$k = 10$	0.042	0.170	0.306	0.494	0.664	0.782	0.922	0.994	1	1	1

approximates the power of the test of the hypothesis  $H^k$  in  $\lambda = \lambda_h$ , with  $k = h + 1$ :

$$\mathbb{P}_{p=p^h} \left( \tilde{\mathcal{T}}^{h+1} \leq \tilde{q}_\alpha^{h+1} / D = d \right) = \pi_{\alpha,d}^h + o_p(1).$$

Let  $\beta > 0$ , for each  $h$ , we determine the value of  $d$  for which the power of the test is greater than  $1 - \beta$ :

$$d_{P1}^h = \inf \left\{ \pi_{\alpha,d}^h \geq 1 - \beta \right\}.$$

The values of  $\pi_{\alpha,d}^h$  and  $d_{P1}^h$  are calculated via simulation.

**Parametric procedure** The parametric testing procedure is based on  $\bar{X}$ , the mean of the observations. If  $p = p^{h+1}$ ,  $d\bar{X}$  is distributed as a Poisson variable with parameter  $d\lambda_{h+1}$ . In what follows, this distribution will be approximated by a Gaussian distribution with mean and variance equal to  $d\lambda_{h+1}$ .

The null hypothesis will be rejected for large values of  $\bar{X}$ . More precisely, under the Gaussian approximation, we get the following results:

$$\mathbb{P}_{p=p^{h+1}} \left( \bar{X} > \lambda_{h+1} + \sqrt{\frac{\lambda_{h+1}}{d}} \nu_{1-\alpha} \right) = \alpha$$

$$\mathbb{P}_{p=p^h} \left( \bar{X} > \lambda_{h+1} + \sqrt{\frac{\lambda_{h+1}}{d}} \nu_{1-\alpha} \right) = 1 - \Phi \left( \sqrt{\frac{d}{\lambda_h}} (\lambda_{h+1} - \lambda_h) + \sqrt{\frac{\lambda_{h+1}}{\lambda_h}} \nu_{1-\alpha} \right)$$



For $D = 1000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
Procedure <b>P2</b>											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = h$	0.024	0.024	0.016	0.022	0.016	0.016	0.010	0.024	0.014	0.006	
$k = h + 1$		0.044	0.036	0.064	0.072	0.094	0.126	0.228	0.518	0.956	1

For $D = 5000, p \sim \mathcal{P}(\lambda_h)$											
Procedure <b>P2</b>											
	$h = 10$	$h = 9$	$h = 8$	$h = 7$	$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	$h = 0$
$k = h$	0.032	0.022	0.018	0.014	0.004	0.016	0.008	0.008	0.016	0.010	
$k = h + 1$		0.086	0.094	0.136	0.180	0.312	0.540	0.860	1	1	1

Table 10.4: Procedure P2 : Estimated probabilities of rejecting  $H^h$  and  $H^{h+1}$  for Poisson distribution with parameters  $\lambda_h$ .

Table 10.5.a								
	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$
$j = 0$	-0.154	-0.246	-0.292	-0.301	-0.284	-0.248	-0.200	-0.145
$j = 1$	> 0	> 0	> 0	-0.017	-0.036	-0.048	-0.055	-0.058
$j = 2$	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	-0.0005

Table 10.5.b								
	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$	$k = 6$	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$
$j = 0$	-0.074	-0.08	-0.065	-0.047	-0.031	-0.019	-0.011	-0.006
$j = 1$	> 0	> 0	> 0	-0.006	-0.009	-0.008	-0.007	-0.006
$j = 2$	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	> 0	-0.0001

Table 10.5: Values of  $\nabla^k p_j^h$  (10.5.a) and  $\nabla^k p_j^h / \sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k}$  (10.5.b) for  $j \geq 0$  and  $h = 2$ .

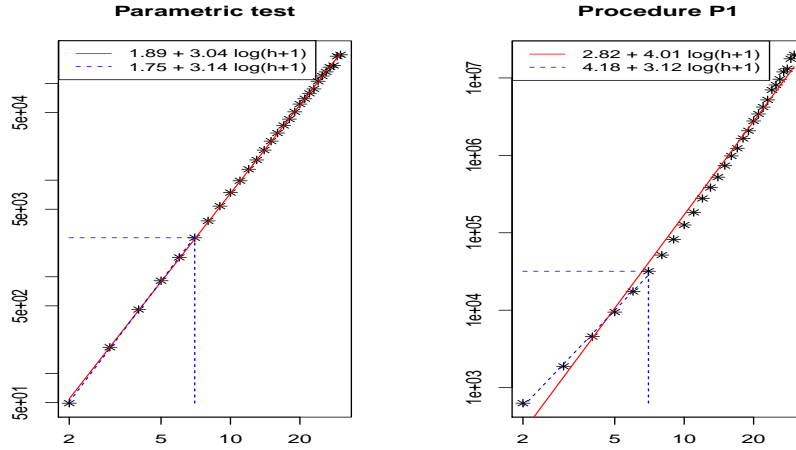


Figure 10.2: Variation of  $d_P^h$  (left hand side) and  $d_{P1}^h$  (right hand side) versus  $h + 1$ , in log-scale. The red line (respectively the dashed blue line) corresponds to a linear fit in the log-scale for  $h \in 1, \dots, 29$  (respectively  $h \in 1, \dots, 6$ ).

and

$$d_P^h = \left( \frac{\sqrt{\lambda_h} \nu_\beta - \sqrt{\lambda_{h+1}} \nu_{1-\alpha}}{\lambda_h - \lambda_{h+1}} \right)^2. \quad (10.3)$$

**Comparison of the two procedures** Taking  $\beta = \alpha$ , we compare  $d_P^h$  and  $d_{P1}^h$ .

For the parametric test we get that  $d_P^h$  is of order  $(h + 1)^3$ , see Figure 10.2. This corresponds to the order of magnitude given by Equation (10.3). Indeed when  $\alpha = \beta$

$$d_P^h = \frac{\nu_{1-\alpha}^2}{(\sqrt{\lambda_h} - \sqrt{\lambda_{h+1}})^2},$$

which varies as  $(h + 1)^3$  as it was shown in Figure 10.2.

For procedure P1, the increase of  $d_{P1}^h$  is faster and of order  $(h + 1)^4$ . This may be the price to pay when we do not know the underlying distribution.

One of the main conclusions of this study is that the use of procedure P1 needs huge values of  $d$  when  $h$  is large. For example, when  $h = 6$ , around 30000 observations are needed to get a power equals to 95%. This result should be taken into account when one applies the method to real data sets.

If one restricts the test to values of  $h$  smaller than 6, then Figure 10.2 shows that the growths of  $d_{P1}^h$  and  $d_P^h$  are of the same order,  $(h + 1)^{3.12}$ .

This section highlights the difficulty of testing  $k$ -monotony when  $k$  increases in a non-parametric setting. Indeed, our conclusions are limited to the comparison with parametric testing under Poisson distributions. Moreover, other non parametric procedures could be used. For example, we could consider the least-square estimator of  $p$  under the constraint of  $k$ -monotonicity (Giguelay, 2017) and reject  $H^k$  if the distance between this estimator and the empirical distribution is large, similarly to the tests proposed by Akakpo et al. (2014) for the discrete monotonicity constraint and Balabdaoui et al. (2017b) for the discrete convex constraint.



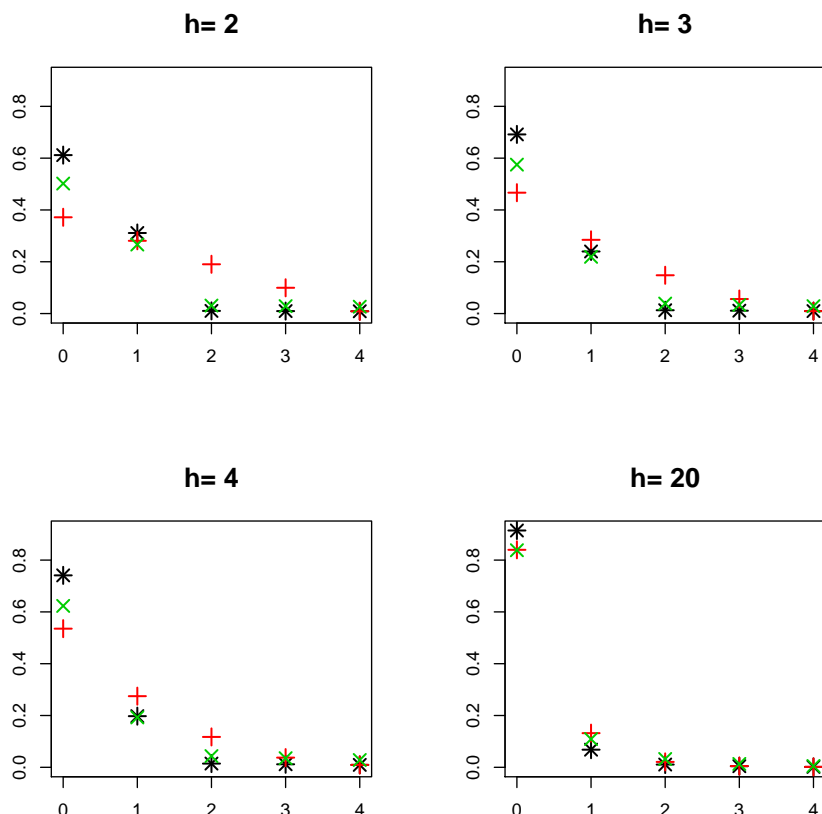


Figure 10.3: Spline Distributions: \* for  $0.9Q_1^h + 0.1Q_{15}^h$ , + for  $0.9Q_3^h + 0.1Q_{15}^h$ , x for  $0.7Q_1^h + 0.2Q_{15}^h$ .

$k$ -monotonicity.

## Spline distributions

### Simulation study for the Spline distributions

As explained in Chapter 4, any  $h$ -monotone discrete distribution  $p$  can be decomposed into a mixture of Spline distributions.

We first consider Spline distributions of degree  $h \in \{1, \dots, 6, 10, 20\}$ , with one knot in  $\tau$ , for  $\tau = 15$ , say  $Q_{15}^h$ . Next we consider Splines of degree  $h$  with two knots, precisely the distributions

$$\begin{aligned} &0.9Q_1^h + 0.1Q_{15}^h \\ &0.9Q_3^h + 0.1Q_{15}^h \\ &0.7Q_1^h + 0.3Q_{15}^h \end{aligned}$$

represented at Figure 10.3.

### Spline distribution with only one knot

The results for distributions  $Q_{15}^h$  (not reported) show that it is quite impossible to reject the null hypothesis  $H^k$  when considering Spline distribution with one knot in  $\tau = 15$ , at

$h = 1$	$h = 2$	$h = 3$	$h = 4$	$h = 5$	$h = 6$
200	4000	42000	304000	1720000	8080000

Table 10.7: Minimum value of  $d$  satisfying Equation (10.4) for  $\tau = 15$  and  $\alpha = 0.05$ .

least for reasonable values of  $D$ . Some simple calculation may help to understand this poor performance. Let us consider the test of the hypothesis  $H^k$  for  $k = h + 1$ . Indeed, if  $p = Q_\tau^h$ , then  $\nabla^{h+1}p_j < 0$  for  $j = \tau - 1$  only, and

$$\nabla^{h+1}p_{\tau-1} = p_{\tau-1} - (h+1)p_\tau = -p_\tau.$$

The standard-error of its empirical estimator,  $\nabla^{h+1}f_{\tau-1}$ , may be approximated by

$$\sqrt{p_{\tau-1} + (h+1)^2p_\tau}/\sqrt{D}.$$

Let us consider the test of the single hypothesis “ $\nabla^{h+1}p_{\tau-1} \geq 0$ ”: using the Gaussian approximation, the null hypothesis will be rejected if

$$\sqrt{D}\nabla^{h+1}f_{\tau-1} < \nu_\alpha\sqrt{p_{\tau-1} - (h+1)p_\tau}.$$

Replacing  $\nabla^{h+1}f_{\tau-1}$  by  $\nabla^{h+1}p_{\tau-1}$ , it appears that  $D$  should satisfy

$$D > \frac{\nu_\alpha^2(p_{\tau-1} + (h+1)^2p_\tau)}{p_\tau^2} = \nu_\alpha^2 C_{h+\tau}^h (h + (h+1)^2), \quad (10.4)$$

in order to reject “ $\nabla^{h+1}p_{\tau-1} \geq 0$ ”. Clearly  $D$  increases with  $h$ , and  $\tau$  (see Table 10.7).

In practical situations, the distribution  $p$  is unknown, and the test of  $H^{h+1}$  lies on a multiple testing procedure, making even more difficult to reject  $H^{h+1}$ .

### Spline distributions with 2 knots

The results for distributions of the form  $\pi Q_\ell^h + (1-\pi)Q_\tau^h$  are given in Tables 10.8 to 10.10. We report the estimated probabilities of rejection for the test of the hypothesis  $H^k$  for  $k = h$  in order to estimate the level of the test, and  $k = h + 1$  to estimate the power.

The level of the tests are nearly equal to 5%. The power decreases with  $h$  for all models and procedures and is greater for a mixture of spline distributions such that the first knot is close to 0, and such that the mass in the first knot is large. Nevertheless, procedure **P1** gives the best results for the first and third models where the first knot appears in  $j = 1$ , while procedure **P2** performs better for the second model.

When  $h$  equals 1 or 2, the power of the test is close to one for the first and third models for  $D = 1000$ . For the second model,  $D = 5000$  is needed to get such a power. When  $h$  increases, for example  $h = 5$ , the difficulty for testing  $H^{h+1}$  for the second model is confirmed: for  $D = 30000$ , the power remains smaller than 10%.

Table 10.8: Estimated probabilities of rejecting the hypothesis  $H^k$ , for Spline distribution  $p^h = 0.9Q_1^h + 0.1Q_{15}^h$ .

		$D = 1000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.042	0.050	0.044	0.062	0.052	0.064	
	$k = h + 1$	0.124	0.278	0.630	0.936	1.000	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.014	0.036	0.032	0.018	0.014	0.040	
	$k = h + 1$	0.034	0.106	0.252	0.712	0.996	1.000	

		$D = 5000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.034	0.040	0.060	0.052	0.050	0.060	
	$k = h + 1$	0.360	0.816	0.990	1	1	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.028	0.046	0.032	0.032	0.020	0.038	
	$k = h + 1$	0.126	0.566	0.952	1	1	1	

		$D = 30000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.040	0.048	0.046	0.040	0.044	0.052	
	$k = h + 1$	0.964	1	1	1	1	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.032	0.030	0.018	0.030	0.056	0.038	
	$k = h + 1$	0.818	1	1	1	1	1	

Table 10.9: Estimated probabilities of rejecting the hypothesis  $H^k$ , for Spline distribution  $p^h = 0.9Q_3^h + 0.1Q_{15}^h$ .

		$D = 1000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.052	0.060	0.038	0.058	0.046	0.038	
	$k = h + 1$	0.044	0.056	0.050	0.048	0.212	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.034	0.018	0.010	0.026	0.004	0.030	
	$k = h + 1$	0.030	0.022	0.058	0.100	0.508	1	

		$D = 5000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.056	0.058	0.040	0.054	0.058	0.054	
	$k = h + 1$	0.060	0.048	0.038	0.070	0.998	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.028	0.034	0.036	0.018	0.022	0.050	
	$k = h + 1$	0.042	0.050	0.080	0.496	1	1	

		$D = 30000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.040	0.046	0.052	0.044	0.034	0.046	
	$k = h + 1$	0.040	0.046	0.060	0.964	1	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.036	0.044	0.044	0.034	0.046	0.058	
	$k = h + 1$	0.042	0.088	0.518	1	1	1	

Table 10.10: Estimated probabilities of rejecting the hypothesis  $H^k$ , for Spline distribution  $p^h = 0.7Q_1^h + 0.3Q_{15}^h$ .

		$D = 1000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.048	0.040	0.048	0.052	0.068	0.050	
	$k = h + 1$	0.072	0.106	0.298	0.716	0.998	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.028	0.022	0.046	0.024	0.030	0.052	
	$k = h + 1$	0.028	0.034	0.126	0.354	0.938	1	

		$D = 5000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.036	0.040	0.048	0.052	0.054	0.030	
	$k = h + 1$	0.132	0.312	0.802	1	1	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.022	0.042	0.036	0.034	0.036	0.026	
	$k = h + 1$	0.042	0.134	0.492	0.990	1	1	

		$D = 30000$						
		$h = 6$	$h = 5$	$h = 4$	$h = 3$	$h = 2$	$h = 1$	
<b>P1</b>	$k = h$	0.036	0.026	0.052	0.032	0.046	0.054	
	$k = h + 1$	0.414	0.942	1	1	1	1	
<b>P2</b>	$k = h$	0.042	0.030	0.024	0.044	0.038	0.058	
	$k = h + 1$	0.180	0.770	1	1	1	1	

## Comparison with the bootstrap procedure

Let us describe the bootstrap procedure for estimating the quantities  $q_\alpha^k$  and  $u_\alpha^k$ . Let  $(X_1^*, \dots, X_d^*)$  be a  $d$ -sample distributed according to the empirical distribution of  $(X_1, \dots, X_d)$ , and let  $f_j^*, j = 0, \dots, \tau^*$  be the empirical estimator of the bootstrap distribution. Then

$$q_\alpha^{*k} = \inf_q \left\{ \mathbb{P}_X \left( \min_{0 \leq j \leq \tau^* - 1} \sqrt{d} \nabla^k (f_j^* - \tilde{p}_j) \leq q \right) \right\},$$

where  $\mathbb{P}_X$  denotes the conditional distribution given  $(X_1, \dots, X_d)$ .

For estimating  $u_\alpha^k$  we use a double bootstrap. For a given  $u$  and for  $0 \leq j \leq \tilde{\tau}$ , let  $\nu_{j,u}^*$  be defined as follows:

$$\nu_{j,u}^* = \inf_\nu \left\{ \mathbb{P}_X \left( \sqrt{d} \nabla^k (f_j^* - \tilde{p}_j) \leq \nu \sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k} \right) = u \right\}$$

Next let  $(X_1^{**}, \dots, X_d^{**})$  be a  $d$ -sample distributed according to the empirical distribution of  $(X_1, \dots, X_d)$ , independant of  $(X_1^*, \dots, X_d^*)$ , and let  $f_j^{**}, j = 1, \dots, \tau^{**}$  be the empirical frequencies. The bootstrap estimator of  $u_\alpha$  is defined as follows:

$$u_\alpha^{*k} = \max_{0 \leq u \leq 1} \left\{ \mathbb{P}_X \left( \min_{0 \leq j \leq \tau^* - 1} \left\{ \sqrt{d} \nabla^k (f_j^{**} - f_j) - \nu_{j,u}^* \sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k} \right\} \leq 0 \right) = \alpha \right\}.$$

The results (not shown) are equivalent to those of procedures **P1** and **P2**.

Although the validity of the bootstrap procedure, like our procedures P1 to P2, lies on asymptotic arguments, we could have expected a different behaviour of the bootstrap procedure, because bootstrap does not use the approximation of the empirical distribution by the Gaussian distribution for practical calculation. This is clearly not the case, may be because our simulation study consider large values of the number of observations.

## Estimating the degree of monotonicity of $p^+$

### Estimator and asymptotic properties

We propose a procedure for estimating  $k$ , the degree of monotonicity of  $p^+$ , based on the testing procedures described in the previous section.

For some  $\alpha$  and  $k_{\max}$ , we define  $\tilde{k}_\alpha$  as follows

- if there exists  $1 \leq \ell \leq k_{\max}$  such that  $H^\ell$  is rejected, then

$$\tilde{k}_\alpha = \inf_{1 \leq \ell \leq k_{\max}} \left\{ H^\ell \text{ is rejected at level } \alpha \right\} - 1$$

- if not,  $\tilde{k}_\alpha = k_{\max}$ .

We show that  $\tilde{k}_\alpha$  is asymptotically close to  $k$ .

**Théorème 68.** *Let  $p$  be a  $k$ -monotone distribution with  $k \leq k_{\max}$  and let  $\tilde{k}_\alpha$  be defined as above.*

**P1** *If for all  $1 \leq \ell \leq k - 2$ ,*

$$\min_{0 \leq j \leq \tau - 1} \nabla^\ell p_j \geq \sqrt{\frac{2}{d}} \sigma^\ell \sqrt{\log(\tau - 1) + \frac{1}{2} \log(d)}$$



**P2** If for all  $1 \leq \ell \leq k - 2$ ,

$$\min_{0 \leq j \leq \tau - 1} \nabla^\ell p_j \geq \sqrt{\frac{2}{d}} \zeta^\ell \sqrt{\log(\tau - 1) + \frac{1}{2} \log(d)} \quad (10.5)$$

then

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P}(\tilde{k}_\alpha \leq k - 1) \leq \alpha$$

Let  $k_{\max}$  an integer,  $k_{\max} \geq 1$ , and let  $\tilde{k}$  be defined as

$$\tilde{k}_\alpha = \inf_{1 \leq \ell \leq k_{\max}} \left\{ H^\ell \text{ is rejected at level } \alpha \right\} - 1.$$

Let  $p$  be a  $k$ -monotone distribution such that  $k \leq k_{\max} - 1$  and that satisfies the following property:

$$\exists j_0, \nabla^{k+1} p_{j_0} + \frac{1}{\sqrt{d}} \left( \sigma^k \sqrt{\log \frac{\tau}{\alpha}} + \zeta_{j_0}^k \sqrt{-2 \log \frac{k_{\max} - k - 1}{\sqrt{d}}} \right) \leq 0.$$

then

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \mathbb{P}(\tilde{k}_\alpha \geq k + 1) = 0.$$

## Simulation study

The properties of  $\tilde{k}$  for  $k_{\max} = 6$  are assessed on the basis of the simulation study presented before, and presented at Tables 10.11 to 10.13. The results are reported for models whose degree of monotonicity is smaller than 5, when using the procedure that proved to maximise the power in the simulation study presented in the previous Section.

Let  $h$  be the true degree of monotony of the distribution  $p$ . From these results, we deduce that

- Probability to under estimate  $h$ .

The estimator  $\tilde{k}_\alpha$  equals  $h - 1$  in nearly 5% of the runs. When  $h \geq 2$ , the number of runs for which  $\tilde{k}_\alpha \leq h - 2$  is 0. This result confirms the first part of Theorem 68, see Equation (10.5).

- Probability to over estimate  $h$ .

This probability is linked with the power of the test: if the test has a low power, the degree of monotony will be overestimated. When  $h$  increases, the probability to get  $\tilde{k}_\alpha \geq h + 1$ , and in particular  $\tilde{k}_\alpha = k_{\max}$ , increase. This over estimation decreases with  $D$ . For the spline distribution, if  $D = 5000$  the results are correct for  $h \leq 3$ .

Table 10.11: For Poisson distributions with parameters  $\lambda_h$  given at Table 10.1: Estimated degree of monotonicity with procedure **P1** and  $\alpha = 5\%$ . For each value of  $D$ , the first row of the table gives  $h$ , the second the mean of  $\tilde{k}_\alpha$  estimated over 500 runs, the following rows give the histogram of the estimated values of  $\tilde{k}_\alpha$  (as  $100\times$  percentages).

$h$	$D = 1000$					$D = 5000$					$D = 30000$				
	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1
$\tilde{k}$	5.77	5.27	4.42	2.68	0.99	5.50	4.30	3.00	1.94	0.92	4.97	3.96	2.93	1.96	0.97
0	0	0	0	0	2.0	0	0	0	0	2.8	0	0	0	0	3.2
1	0	0	0	3.4	97.6	0	0	0	5.6	97.2	0	0	0	4.4	96.8
2	0	0	4	74.8	0.2	0	0	5.6	94.4	0	0	0	7.2	95.6	0
3	0	4.4	36.6	5.4	0	0	4.2	90	0	0	0	4.4	92.8	0	0
4	5	24.8	16	0	0	4	70.8	3.6	0	0	4.4	95.6	0	0	0
5	12.6	10	0.6	0	0	41.8	16.2	0	0	0	94.6	0	0	0	0
6	82.4	60.8	42.8	16.4	0.2	54.2	8.8	0.8	0	0	1	0	0	0	0

Table 10.12: For Spline distributions with two knots defined as  $0.9Q_1^h + 0.1Q_{15}^h$ : Estimated degree of monotonicity with procedure **P1** and  $\alpha = 5\%$ . For each value of  $D$ , the first row of the table gives  $h$ , the second the mean of  $\tilde{k}_\alpha$  estimated over 500 runs, the following rows give the histogram of the estimated values of  $\tilde{k}_\alpha$  (as  $100\times$  percentages).

$h$	$D = 1000$					$D = 5000$					$D = 30000$				
	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1
$\tilde{k}$	5.67	4.48	3.00	1.95	0.94	5.14	3.95	2.95	1.95	0.94	4.95	3.95	2.96	1.96	0.95
0	0	0	0	0	6.4	0	0	0	0	6	0	0	0	0	5.2
1	0	0	0	5.2	93.6	0	0	0	5	94	0	0	0	4.4	94.8
2	0	0	6.2	94.8	0	0	0	5.2	95	0	0	0	4	95.6	0
3	0	4.4	87.4	0	0	1.6	1.6	68.8	0.4	0	0	4.6	96	0	0
4	5	58.6	6.4	0	0	1	23.2	26.8	0	0	4.8	95.4	0	0	0
5	22.8	21.2	0	0	0	7.2	28.2	1.6	0	0	95.2	0	0	0	0
6	72.2	15.8	0	0	0	87.8	45	0.4	0	0	0	0	0	0	0

Table 10.13: For Spline distributions with two knots defined as  $0.9Q_3^h + 0.1Q_{15}^h$ : Estimated degree of monotonicity with procedure **P2** and  $\alpha = 5\%$ . For each value of  $D$ , the first row of the table gives  $h$ , the second the mean of  $\tilde{k}_\alpha$  estimated over 500 runs, the following rows give the histogram of the estimated values of  $\tilde{k}_\alpha$  (as  $100\times$  percentages).

$h$	$D = 1000$					$D = 5000$					$D = 30000$				
	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1	5	4	3	2	1
$\tilde{k}$	5.90	5.78	5.47	2.71	0.97	5.83	5.73	3.89	1.97	0.95	5.79	4.68	2.94	1.95	0.94
0	0.2	0.8	1.2	0.4	3	0	0	0	0.6	5	0	0	0	0	5.8
1	0	0	0	0.4	97	0.8	0.8	1	1.6	95	0.2	0.8	2	4.6	94.2
2	0.2	0.8	2.4	50.4	0	0.8	0.8	1	97.8	0	0.2	0.2	1.8	95.4	0
3	2.4	3	7	39.2	0	1.6	2.2	48.2	0	0	2.2	2	96.2	0	0
4	0.2	2.4	6.8	2.8	0	1.4	5.2	28	0	0	0.6	47.6	0	0	0
5	0.8	0.4	2	0.2	0	2	2.6	1.2	0	0	4.6	19.2	0	0	0
6	96.2	92.6	81.1	6.6	0	93.4	88.4	20.6	0	90.4	28.4	0	0	0	0

## Application to real data sets

Most real observed abundance distributions are at least decreasing and appear to be  $k$ -monotone for some  $k \geq 2$ . Several examples were already studied when considering convexity (Durot et al., 2017, 2015). Let us consider three examples in order to illustrate how our procedure applies when we aim at estimating the total number of species taking into account the hollowed shape of the abundance distribution.

1. Data from Hser (2001), given Table 1.3 in (Böhning Dankmar, 2017), reporting the episode count per drug user in Los Angeles 1989, are used for estimating the size of a population of illicit drug users.
2. The famous data set reporting the frequencies of word types used by Shakespeare (see Spevack (1968) and Table 1.8 in (Böhning Dankmar, 2017)), allows to estimate *how many words did Shakespeare know but not use* (Efron and Thisted (1976)).
3. A metagenomics data set (Tap et al., 2009) was analysed by Li-Thiao-Té et al. (2012) to estimate the total number of microbial strains in the human gut microbiome.

For the two last data sets, the maximum of the support of the empirical abundance distribution is very large: five words were seen 100 times, one strain were seen 564 times. Indeed, the tail of the distribution does not contribute to estimate the behaviour of the beginning of the distribution. However considering a very large number of variates in the test statistics may affect the power of the test by increasing  $\tilde{q}_\alpha^k$  in procedure **P1** and reducing  $\tilde{u}_\alpha^k$  in procedure **P2**. Therefore we carried out the testing procedure replacing  $\tilde{\tau}$  in the definition of  $\tilde{T}^k$  and  $\tilde{U}^k$  by the minimum of some fixed integer  $l$  and  $\tilde{\tau}$ . The results are given with  $l = 20$ . For these two data sets, it appears that the results does not change with the value of  $l$ .

For each data set we test the hypothesis  $H^k$  for  $1 \leq k \leq k_{\max}$  with  $k_{\max} = 6$ , and calculate the estimated number of species as well as its estimated standard-error. The results are given in Table 10.14 and Figure 10.4.

For the first example we choose  $\tilde{k} = 4$  using **P1** and  $\tilde{k} = 5$  using **P2**, while for the two last data sets, we choose  $\tilde{k} = k_{\max}$ . This choice may be explained by the followed shape of the empirical distributions together with the difficulty of rejecting  $H^k$  for large  $k$ .

The number of Shakespeare's unused words was estimated to be at least equal to 35000 by Efron and Thisted (1976). Using our procedure with  $k_{\max} = 6$ , we get approximatively 50000 words. In that example  $D$  is large enough to protect us against lack of power for testing  $H^k$ , at least for  $k \leq 4$ . Therefore we are confident that  $k = 6$  is a reasonable choice.

Concerning the number of strains, the estimation given by the Chao1 procedure (Chao, 1984),  $\tilde{N} = D + f_1^2 / 2f_2$ , equals 9940, while the estimation given by Li-Thiao-Té et al. (2012) is 25700 with a 95% confidence interval equals to [19421, 36355]. Choosing  $k = 6$  we get  $\tilde{N} = 13207$ . Let us see (Table 10.15) what happens if  $k$  increases: for any  $7 \leq k \leq 13$  the hypothesis  $H^k$  is not rejected. If  $k = 12$  we get  $\tilde{N} = 23561$  which is close to the value proposed by Li-Thiao-Té et al. (2012). Nevertheless, the estimated standard-error  $\tilde{s}^k$  increases drastically with  $k$ , making the result useless for large  $k$ .

Size of a population of drug users :  $D = 20198$  episodes counted

	Test <b>P1</b>	Test <b>P2</b>	$\tilde{N}^k$	$\tilde{s}^k$
$k = 1$	accept	accept	32180	154
$k = 2$	accept	accept	40269	268
$k = 3$	accept	accept	46424	414
$k = 4$	accept	accept	51602	629
$k = 5$	accept	reject	56333	973
$k = 6$	reject	reject	60955	1542

Number of words Shakespeare knew :  $D = 30709$  words used

	Test <b>P1</b>	Test <b>P2</b>	$\tilde{N}^k$	$\tilde{s}^k$
$k = 1$	accept	accept	45085	170
$k = 2$	accept	accept	55118	298
$k = 3$	accept	accept	63100	451
$k = 4$	accept	accept	69860	681
$k = 5$	accept	accept	75807	1051
$k = 6$	accept	accept	81136	1682

Number of microbial strains in the human gut microbiome :  $D = 3180$  strains seen

	Test <b>P1</b>	Test <b>P2</b>	$\tilde{N}^k$	$\tilde{s}^k$
$k = 1$	accept	accept	5471	68
$k = 2$	accept	accept	7375	117
$k = 3$	accept	accept	9040	173
$k = 4$	accept	accept	10538	245
$k = 5$	accept	accept	11915	348
$k = 6$	accept	accept	13207	508

Table 10.14: For each data set, decision of the test of the hypothesis  $H^k$ , estimation of  $N$  and of the standard-error of  $\tilde{N}^k$ , for  $1 \leq k \leq 6$ . The line in red corresponds to the estimated value of  $k$ .

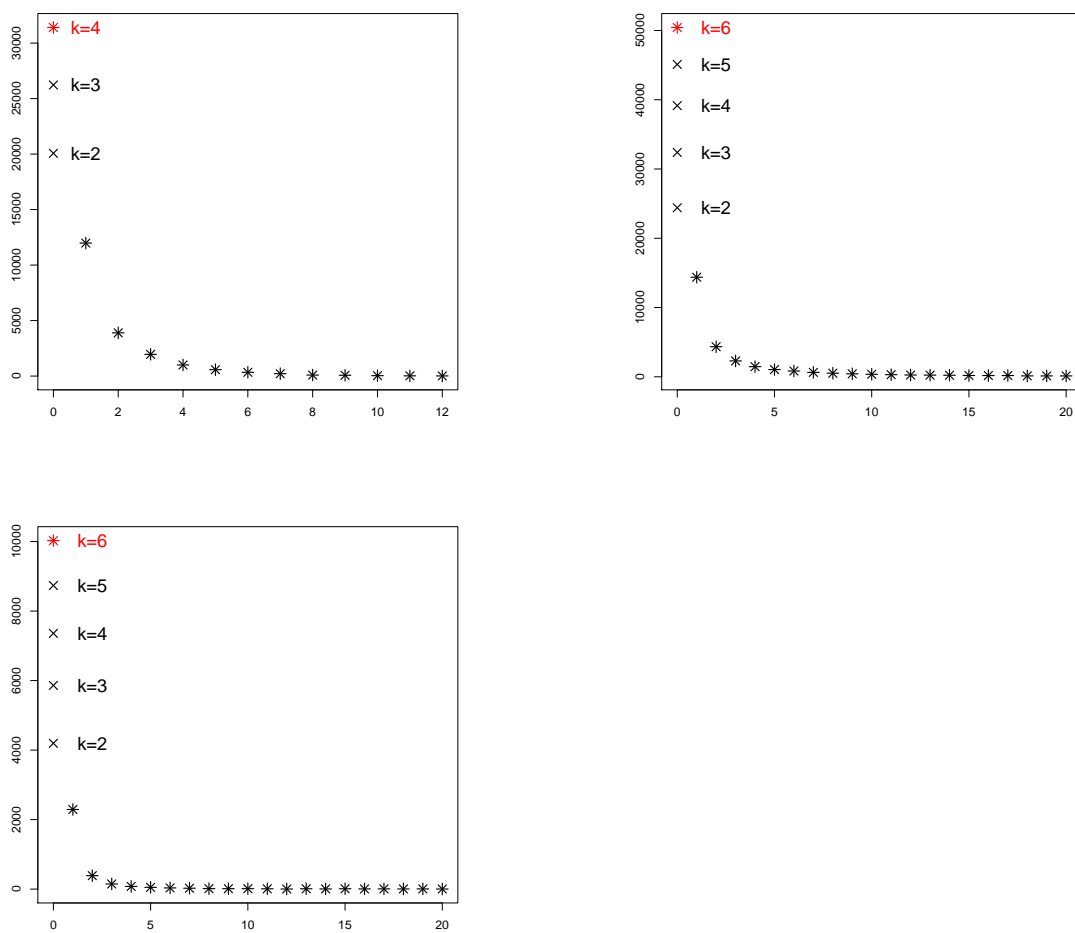


Figure 10.4: For each data set, graphics of the observed frequencies on the interval  $[1, 20]$ . For each  $2 \leq k \leq \tilde{k}$ , estimated value of the number of missing classes or species.

## Conclusion

We proposed two testing procedures and their bootstrap versions to estimate the degree of  $k$ -monotonicity of a discrete distribution  $p$ . The procedures can be used to infer the degree of  $k$ -monotonicity in the estimation of the number of species in a population. All of these testing procedures are completely nonparametric : the hypothesis  $\mathbb{H}_0^k$  and the alternative  $\mathbb{H}_1^k$  being both nonparametric. We also implemented a parametric procedure for Poisson distribution which quantifies the intrinsic difficulty to reject  $\mathbb{H}_0^k$  when the distribution  $p$  is  $(k-1)$ -monotone and not  $k$ -monotone. We note the following facts :

- The bootstrap procedures do not provide better results on the simulations
- The procedures lack of power in some cases and thus require a large value for  $d$ , with respect to the parameter  $k_{\max}$ . This phenomenon is due to an important variance's growth of the statistic of the test
- There are many variabilities of the statistic of the tests
- The procedures highly depend on the choice of the parameter  $k_{\max}$

It could be possible to develop other procedures like an empirical approach with AIC or BIC criterion (see Chee and Wang (2016)) or an other nonparametric procedure based on the limit distribution on the least squares estimator under  $k$ -monotonicity constraint, similar to the test proposed by Balabdaoui et al. (2017b) in the case where  $k = 2$ . Such a testing procedure could present some difficulties; we need to characterize the limit distribution and to approximate it numerically. Inconsistency phenomenon on the  $k$ -knots will probably arise, similar to the convex case.

We also thought about a third procedure, denoted **P3**, which rejects the null hypothesis if  $\nabla^k p_j$  is highly negative for several indices  $j$ . In other words the reject region of **P3** is

$$\left\{ \tilde{V}_\alpha^k \leq \tilde{\rho}_\alpha^k \right\} \text{ where } \tilde{V}_\alpha^k = -d \sum_{j=0}^{\tilde{\tau}-1} \left[ \min \left\{ 0, \frac{\nabla^k \tilde{p}_j}{\sqrt{A_j^{kT} \tilde{\Gamma} A_j^k}} \right\} \right]^2$$

where

$$\rho_\alpha^k = \inf_{\rho} \left\{ \mathbb{P} \left( \sum_{j=0}^{\tau-1} \left[ \min \left\{ 0, \frac{\sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'}^k Z_{j'}^k}{\sqrt{A_j^{kT} \Gamma A_j^k}} \right\} \right]^2 \leq \rho \right) = 1 - \alpha \right\}.$$

The simulations under Procedure **P3** do not show significant improvement for the power of the test, consequently we choose to omit them.

To conclude we recommend the user to choose a parameter  $k_{\max}$  coherent with the number of species observed  $d$ . For example  $k_{\max} = 6$  for  $D = 30000$  or  $k_{\max} = 4$  for  $D = 5000$ .

Number of microbial strains in the human gut microbiome :  $D = 3180$  strains seen

	$k = 7$	$k = 8$	$k = 9$	$k = 10$	$k = 11$	$k = 12$	$k = 13$
$\tilde{N}^k$	14447	15675	16962	18458	20469	23561	28695
$\tilde{s}^k$	770	1218	2004	3401	5900	10378	18411

Table 10.15: Estimation of  $N$  and of the standard-error of  $\tilde{N}^k$ , for  $7 \leq k \leq 13$ .

## Proofs

### Proof of Theorem 66

Let us first remark that for  $d$  large enough,  $\tilde{\tau}$  is almost surely equal to  $\tau$ . This result comes from the application of the Borel-Cantelli lemma, by noting that

$$\sum_{d=1}^{\infty} P(\tilde{\tau} < \tau) = \sum_{d=1}^{\infty} (1 - p_{\tau})^d < +\infty.$$

In the following we will assume that  $d$  is large enough to set  $\tilde{\tau} = \tau$ .

**Procedure P1** Let us begin with the testing procedure based on the statistic  $\tilde{\mathcal{T}}^k$ . Because  $p$  is  $k$ -monotone,

$$P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \nabla^k f_j \leq q\right) \leq P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} (\nabla^k f_j - \nabla^k p_j) \leq q\right)$$

By the central limit theorem we know that the vector  $\sqrt{d}A(f - p)$  converges in distribution to a centered Gaussian vector with covariance matrix  $A\Gamma A^T$ , where  $\Gamma$  is the matrix with components  $\Gamma_{jj'} = -p_j p_{j'}$  if  $j \neq j'$  and  $\Gamma_{jj} = p_j(1 - p_j)$  for  $0 \leq j \leq \tau - 1$ . Let  $M$  be defined as the square-root of the matrix  $A\Gamma A^T$ , then

$$\begin{aligned} P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} (\nabla^k f_j - \nabla^k p_j) \leq q\right) &= P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau} A_{jj'}(f_{j'} - p_{j'}) \leq q\right) \\ &= P\left(\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq q\right) + o(1). \end{aligned}$$

uniformly for all  $q \in \mathbb{R}$ , where the  $\mathcal{Z}_{j'}, j' = 0, \dots, \tau - 1$  are independent centered Gaussian variates.

Because  $\tilde{\Gamma}$  converges in probability to  $\Gamma$  when  $d$  tends to infinity, and thanks to the continuity of the limiting distribution of  $\sqrt{d} \min_j (\nabla^k f_j - \nabla^k p_j^+)$ , we get that

$$P\left(\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq \tilde{q}_{\alpha}^k\right) = P\left(\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} \tilde{M}_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq \tilde{q}_{\alpha}^k\right) + o(1) = \alpha + o(1).$$

Let us consider now the case where  $p$  is strictly  $k$ -monotone and let  $C \geq 0$  be such that  $\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \nabla^k p_j \geq C$ .

$$\begin{aligned} P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \nabla^k f_j \leq q\right) &= P\left(\sqrt{d} \min_{0 \leq j \leq \tau-1} (\nabla^k f_j - \nabla^k p_j) \leq q - \sqrt{d}C\right) \\ &= P\left(\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq q - \sqrt{d}C\right) + o(1). \end{aligned}$$

Let  $q_{\alpha}^k$  be defined at Equation (10.1) and  $\sigma^k$  be defined in Theorem 66. Applying the Cramer-Chernoff method to Gaussian variables (see for example Massart, 2003, chapter 2), we get the following result:

$$P\left(\min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq q_{\alpha}^k - \sqrt{d}C\right) \leq \tau \exp\left(-\frac{(q_{\alpha}^k - \sqrt{d}C)^2}{2(\sigma^k)^2}\right). \quad (10.6)$$

Then we have:

$$P \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \sum_{j'=0}^{\tau-1} M_{jj'} \mathcal{Z}_{j'} \leq q_\alpha^k - \sqrt{d}C \right) \leq \tau \exp \left( -\frac{dC^2}{2(\sigma^k)^2} \right) \leq \beta$$

as soon as  $C \geq \sqrt{2/d} \sigma^k \sqrt{\log((\tau)/\beta)}$ .

**Procedure P2** Let us now consider the procedure based on  $\tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k$ . The proof of the first part of the theorem is similar to the proof for the procedure **P1**. Let us consider the case where  $p$  is strictly  $k$ -monotone. If  $\min_j \nabla_j^k \geq C$ ,  $\zeta_j^k = \sqrt{A_j^{kT} \Gamma A_j^k}$  and  $\zeta^k = \max_j \zeta_j^k$ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 \right) &= \mathbb{P} \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \left\{ \sqrt{d} \nabla^k f_j - \nu_{u_\alpha^k} \zeta_j^k \right\} \leq 0 \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left( \min_{0 \leq j \leq \tau-1} \left\{ A_j^{kT} \Gamma^{1/2} \mathcal{Z} - \nu_{u_\alpha^k} \zeta_j^k \right\} \leq -\sqrt{d}C \right) + o(1) \end{aligned}$$

Then:

$$\mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 \right) \leq \tau \max_j \mathbb{P} \left( A_j^{kT} \Gamma^{1/2} \mathcal{Z} \leq \nu_{u_\alpha^k} \zeta_j^k - \sqrt{d}C \right) + o(1) \quad (10.7)$$

Moreover,

$$\mathbb{P} \left( A_j^{kT} \Gamma^{1/2} \mathcal{Z} \leq \nu_{u_\alpha^k} \zeta_j^k - \sqrt{d}C \right) \leq \exp \left( -\frac{(\nu_{u_\alpha^k} \zeta_j^k - \sqrt{d}C)^2}{2(\zeta_j^k)^2} \right).$$

Then we have:

$$\mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \leq 0 \right) \leq \tau \max_j \exp \left( -\frac{dC^2}{2(\zeta_j^k)^2} \right) + o(1) \leq \beta + o(1)$$

as soon as

$$C \geq \frac{1}{\sqrt{d}} \left( \zeta^{k+1} \sqrt{2 \log \frac{\tau}{\beta}} \right).$$

## Proof of Theorem 67

**Procedure P1** Let  $q < 0$  and  $C$  such that  $\nabla^{k+1} p_{j_0} \leq -C$ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left( \tilde{\mathcal{T}}^{k+1} \geq q | D = d \right) &\leq \mathbb{P} \left( \sqrt{d} \nabla^{k+1} f_{j_0} \geq q \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left( \sqrt{d} (\nabla^{k+1} f_{j_0} - \nabla^{k+1} p_{j_0}) \geq q - \sqrt{d} \nabla^{k+1} p_{j_0} \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left( \sqrt{d} (\nabla^{k+1} f_{j_0} - \nabla^{k+1} p_{j_0}) \geq q + C\sqrt{d} \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left( \sqrt{d} A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq q + C\sqrt{d} \right) + o(1) \end{aligned}$$

Applying the classical Tchebychev inequality, we get

$$\mathbb{P} \left( \sqrt{d} A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq q_\alpha^{k+1} + C\sqrt{d} \right) \leq \exp \left( -\frac{(q_\alpha^{k+1} + C\sqrt{d})^2}{2(\zeta_{j_0}^{k+1})^2} \right). \quad (10.8)$$



Let us remark that applying Formula (10.6) to the case where  $C = 0$ , we get

$$\alpha \leq \tau \exp\left(-\frac{(q_\alpha^{k+1})^2}{2(\sigma^{k+1})^2}\right)$$

then

$$q_\alpha^{k+1} \geq -\sigma^{k+1} \sqrt{2 \log \frac{\tau}{\alpha}}. \quad (10.9)$$

Considering inequalities given at Equations (10.8) and (10.9), we get that

$$\mathbb{P}_{\bar{H}^{k+1}(C)}\left(\sqrt{d}A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq q_\alpha^{k+1} + C\sqrt{d}\right) \leq \beta$$

as soon as

$$C \geq \frac{1}{\sqrt{d}} \left( \sigma^{k+1} \sqrt{2 \log \frac{\tau}{\alpha}} + \zeta_{j_0}^{k+1} \sqrt{-2 \log \beta} \right).$$

**Procedure P2** Let  $C$  be a real such that  $\nabla^{k+1} p_{j_0} \leq -C$ , and let  $\zeta_{j_0}^{k+1} = \sqrt{A_{j_0}^{kT} \Gamma A_{j_0}^{k+1}}$ . We have:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k \geq 0 | D = d\right) &= \mathbb{P}\left(\min_{0 \leq j \leq \tilde{\tau}-1} \left\{ \sqrt{d} \nabla^{k+1} f_j - \nu_{u_\alpha^{k+1}} \sqrt{A_j^{k+1T} \tilde{\Gamma} A_j^{k+1}} \right\} \geq 0\right) \\ &\leq \mathbb{P}\left(\sqrt{d}(\nabla^{k+1} f_{j_0} - \nabla^{k+1} p_{j_0}) \geq \nu_{u_\alpha^{k+1}} \sqrt{A_{j_0}^{k+1T} \tilde{\Gamma} A_{j_0}^{k+1}} + C\sqrt{d}\right) \\ &\leq \mathbb{P}\left(\sqrt{d}A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq \nu_{u_\alpha^{k+1}} \zeta_{j_0}^{k+1} + C\sqrt{d}\right) + o(1) \end{aligned}$$

Applying the classical Tchebychev inequality, we get

$$\mathbb{P}\left(\sqrt{d}A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq \nu_{u_\alpha^{k+1}} \zeta_{j_0}^{k+1} + C\sqrt{d}\right) \leq \exp\left(-\frac{(\nu_{u_\alpha^{k+1}} \zeta_{j_0}^{k+1} + C\sqrt{d})^2}{2(\zeta_{j_0}^{k+1})^2}\right). \quad (10.10)$$

Let us remark that applying Formula (10.7) to the case where  $C = 0$ , we get

$$\alpha \leq \tau \max_j u_\alpha^k$$

then  $u_\alpha^{k+1} \geq \alpha/\tau$  and

$$\nu_{u_\alpha^{k+1}} \geq \nu_{\alpha/\tau}. \quad (10.11)$$

Considering inequalities given at Equations (10.10) and (10.11), we get that

$$\mathbb{P}_{\bar{H}^{k+1}(C)}\left(\sqrt{d}A_{j_0}^{k+1T} \mathcal{Z} \geq \nu_{u_\alpha^{k+1}} \zeta_{j_0}^{k+1} + C\sqrt{d}\right) \leq \beta$$

as soon as

$$C \geq \frac{1}{\sqrt{d}} \left( -\nu_{\alpha/\tau} \zeta_{j_0}^{k+1} + \zeta_{j_0}^{k+1} \sqrt{-2 \log \beta} \right).$$

## Proof of Theorem 68

If  $k = 1$ ,

$$\mathbb{P}\left(\tilde{k}_\alpha = 0\right) = \mathbb{P}\left(H^1 \text{ is rejected}\right) \leq \alpha + o(1)$$

Let us now consider the case where  $k \geq 2$

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(\tilde{k}_\alpha \leq k-1) &= \mathbb{P}(\exists \ell, 1 \leq \ell \leq k-1, \forall m \leq \ell, H^m \text{ is not rejected and } H^{\ell+1} \text{ is rejected}) \\
 &\leq \mathbb{P}(\exists \ell, 1 \leq \ell \leq k-1, H^{\ell+1} \text{ is rejected}) \\
 &\leq \mathbb{P}(H^k \text{ is rejected}) + \mathbb{I}_{(k \geq 3)} \sum_{\ell=1}^{k-2} \mathbb{P}(H^{\ell+1} \text{ is rejected})
 \end{aligned}$$

Thanks to Theorem 66, taking  $\beta = 1/(k-2)\sqrt{d}$  if  $k \geq 3$ , we get the first part of the Theorem.

For the second part of the theorem

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(\tilde{k}_\alpha \geq k+1) &= \sum_{\ell=k+1}^{k_{\max}} \mathbb{P}(\tilde{k}_\alpha = \ell) \\
 &= \sum_{\ell=k+1}^{k_{\max}} \mathbb{P}(\forall m, 1 \leq m \leq \ell, H^m \text{ is not rejected and } H^{\ell+1} \text{ is rejected}) \\
 &\leq \sum_{\ell=k+1}^{k_{\max}} \mathbb{P}(\forall m, k+1 \leq m \leq \ell, H^m \text{ is not rejected}) \\
 &\leq (k_{\max} - k - 1) \mathbb{P}(H^{k+1} \text{ is not rejected}).
 \end{aligned}$$

## Conclusion et perspectives

## Conclusion

Le travail réalisé durant ma thèse est une contribution à l'estimation non-paramétrique d'une densité sous contrainte de forme. La forme considérée est la  $k$ -monotonie qui est une généralisation de la convexité. L'entier  $k$  est un indicateur du degré de creux des densités convexes.

Dans la Partie I, deux estimateurs des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie ont été définis pour estimer une densité discrète  $p^*$  et leurs propriétés statistiques ont été étudiées. Bien que non-paramétriques, ces estimateurs convergent à la vitesse paramétrique en  $1/\sqrt{n}$ . Un algorithme de descente de gradients exact, dérivé de l'Algorithme de Réduction de Support, a été implémenté. Il est disponible au package `pkmon`<sup>1</sup>. Dans la Partie II, des bornes de type oracle pour le risque quadratique lié à ces estimateurs ont été montrées. Elles dépendent de bornes entropiques pour les espaces de fonctions  $k$ -monotones, également calculées dans cette partie. Ces bornes sont adaptatives au sens où leur vitesse s'améliore lorsque  $p^*$  est suffisamment proche d'une probabilité  $k$ -monotone possédant peu de  $k$ -nœuds et un support réduit. Dans la Partie III, une application en écologie pour l'estimation du nombre d'espèces dans une population est proposée. La méthode est basée sur une procédure de tests de  $k$ -monotonie emboîtés.

A la différence du cas continue, qui est caractérisé par des vitesses dont l'ordre dépend de  $k$ , à savoir  $n^{-k/(2k+1)}$ , l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie discrète présente des estimateurs convergeant à vitesse  $C_k/\sqrt{n}$ , avec  $C_k$  une constante dépendant de  $k$  et de  $p^*$ . Les espaces  $\mathcal{P}^k$  de probabilités  $k$ -monotones discrètes étant emboîtés, le fait de se placer sous le *vrai* degré de monotonie de  $p^*$  (c'est-à-dire l'entier  $\ell$  tel que  $p^*$  est  $\ell$ -monotone et non  $(\ell+1)$ -monotone) plutôt que sous un degré de monotonie plus faible permet de gagner en vitesse d'estimation, phénomène illustré par les simulations de la Partie I. En d'autres termes, plus  $k$  est proche de  $\ell$  et plus  $C_k$  est faible. Cependant les résultats des différentes parties ont montré que plus  $k$  augmente et plus il est difficile de quantifier la différence entre les espaces  $\mathcal{P}^k$  et  $\mathcal{P}^{k+1}$ .

---

<sup>1</sup><https://cran.r-project.org/web/packages/pkmon/index.html>

# Perspectives

De nombreuses perspectives ont émergé de ce travail de thèse. Les premières concernent l'estimation sous contrainte de  $k$ -monotonie pour une densité discrète développée en Partie I. Ce travail, en effet, est assez *classique* par rapport au domaine de la contrainte de forme, tant du côté des méthodes et algorithmes développés que de celui du type de résultats obtenus. Aussi, il est naturel de se demander si des résultats supplémentaires, analogues à ceux obtenus dans le cas d'autres contraintes de forme ou pour le cas continu, ne pourraient pas également être montrés dans le cas de l'estimateur de  $k$ -monotonie discrète.

## Perspectives concernant l'estimateur sous contrainte de $k$ -monotonie discrète.

Le comportement de l'estimateur  $\hat{p}$  des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie discrète pourrait être étudié plus en détail. Quelques perspectives surviennent naturellement en analysant le travail effectué dans le cas continu ou dans le cas convexe et rappelé dans l'état de l'art :

- Pour commencer il serait intéressant de montrer une inégalité de Marshall c'est-à-dire une inégalité de la forme suivante :

$$\|\hat{F}_n - F\|_\infty \leq \alpha \|\mathbb{F}_n - F\|_\infty$$

vraie pour toute fonction discrète  $F$  primitive d'une fonction  $k$ -monotone, où  $\alpha$  désigne un réel strictement positif,  $\hat{F}_n$  désigne la primitive de l'estimateur des moindres carrés  $\hat{p}_n$  et  $\mathbb{F}_n$  la fonction de répartition empirique. L'article de Balabdaoui et Durot (2015) constituerait un bon point de départ pour développer des résultats dans cette voie.

- L'étude des lois limites ponctuelles associées à chacun des laplaciens de l'estimateur  $\hat{p}$  constituerait également un développement intéressant. Les résultats analogues de la contrainte de forme (voir Balabdaoui et Wellner (2007, 2010) et Balabdaoui et al. (2017)) nous incitent à penser que la loi limite de la fonction de répartition de l'estimateur des moindres carrés, en particulier, s'écrit comme la projection de la fonction de répartition d'un processus gaussien sur l'ensemble des fonctions  $k$ -monotones, pour une vitesse paramétrique en  $1/\sqrt{n}$ .
- De nouveaux résultats de consistances pourraient être obtenus. On imagine notamment que l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie est probablement fortement consistant comme son équivalent unimodal (Balabdaoui et Jankowski (2014)).

Pour finir, contrairement à ce qui a été fait dans le cas convexe par Durot et al. (2013), nous n'avons pas réussi, dans le cas où  $k \geq 3$ , à montrer l'inégalité suivante concernant

---

les maxima des supports de  $\hat{p}_n$  (estimateur contraint) et  $\tilde{p}_n$  (estimateur empirique) respectivement :

$$\hat{s}_n \leq \tilde{s}_n$$

Pourtant les simulations n’infirmant pas cette propriété. Une piste supplémentaire serait donc de montrer cette inégalité.

## Perspectives concernant les bornes de risque

Des perspectives concernant les bornes de type oracle développées en Partie II ont émergé naturellement de la discussion de la Section 7.4. Les bornes de risque étant intrinsèquement liées à l’optimalité des entropies à crochet calculées, les perspectives données d’amélioration de ce résultat étaient les suivantes :

- Montrer la Conjecture 1, par exemple en engageant une stratégie de récurrence différente de celle de Gao and Wellner (2009)
- Adapter un découpage analogue à celui de Flammarion et al. (2016) pour  $k$  quelconque
- Dans le cas où  $k = 2$ , construire un crochet pour les fonctions convexes et affines par morceaux constituées de fonctions elles-mêmes convexes ou affines par morceaux

Par ailleurs, une perspective envisagée est de montrer l’optimalité du résultat pour  $k = 1$  au moyen du calcul de vitesse minimax. Enfin, deux généralisations de cette partie pourraient être développées : la première dans le cadre de la régression  $k$ -monotone (voir Section 7.4.3) et la seconde dans le cadre de l’estimation d’une densité  $k$ -monotones continue. En ce cas la vitesse de l’estimateur du maximum de vraisemblance a été calculée par Gao et Wellner Gao and Wellner (2009) mais des bornes de risque pour cet estimateur ou l’estimateur des moindres carrés n’ont pas été développées.

## Perspectives concernant la Partie III

**A propos de l’estimation du nombre d’espèces dans une population** : deux estimateurs pour le nombre d’espèces  $N$  basés sur une hypothèse d’abondance  $k$ -monotone ont été proposés. Le premier repose sur l’estimation préalable de la distribution d’abondance tronquée sous contrainte de  $k$ -monotonie, la second utilise uniquement l’estimateur empirique. Seules les propriétés statistiques du second estimateur ont été développées. Celles du premier pourraient se déduire à partir de la loi limite de l’estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie si elle était développée. Des intervalles de confiance du même type de ceux développés dans le Chapitre *Convex Estimation* du livre *Capture and Recapture* (Durot et al., 2017) pourraient être établis.

**A propos des tests de  $k$ -monotonie** Les procédures de tests emboîtés développées au Chapitre 10 ont révélé qu’il était difficile de rejeter l’hypothèse de  $k$ -monotonie lorsque l’estimateur  $p^*$  est  $(k - 1)$ -monotone. Ce phénomène semble être intrinsèque au problème considéré, les espaces de probabilités  $k$ -monotones étant difficiles à séparer, comme l’illustre le manque de puissance du test paramétrique défini à la Section 10.2.1. Néanmoins les simulations réalisées par Balabdaoui et al. (2017b) suggèrent qu’une procédure de test basée sur l’estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie présenterait un gain en puissance. Deux pistes envisagées de poursuite de ce travail sont donc :

- 
- Calculer des bornes minimax (voir Section 3.3.1) pour la procédure de test afin de montrer que le problème de séparation des degrés de  $k$ -monotonie est intrinsèquement difficile et trouver une borne inférieure pour la puissance d'une telle procédure de tests.
  - Développer une procédure de test basée sur l'estimateur sous contrainte de  $k$ -monotonie. Une telle procédure nécessiterait d'avoir calculé au préalable la loi asymptotique de cet estimateur et d'être capable de l'approcher numériquement. Des problèmes d'inconsistance aux points qui sont des  $k$ -nœuds, semblables à ceux rencontrés par Balabdaoui et al. (2017b) dans le cas convexe, devraient être considérés.

## Perspectives concernant la $k$ -monotonie

Un problème essentiel qui nous a empêché de déduire simplement les résultats du cas continu au cas discret a été la difficulté à construire, étant donnée une densité discrète  $k$ -monotone  $p^*$ , une fonction  $f^*$   $k$ -monotone continue passant par les points de  $p^*$  (ou à moins de  $\varepsilon$  de  $p^*$  pour tout  $\varepsilon > 0$ ) dès lors que  $k \geq 3$ .

Cette difficulté à interpoler par des fonctions  $k$ -monotones a été un frein à l'établissement des propriétés statistiques de l'estimateur des moindres carrés dans la Partie I et au calcul des entropies à crochet durant la Partie II. Une perspective à la fois utile d'un point de vue pratique (pour établir des résultats pour le cas discret à partir de ceux montrés dans le cas continu) que d'un point de vue théorique (pour comprendre la topologie des espaces de fonctions et de suites  $k$ -monotones) se situe donc dans le développement de méthodes d'interpolation par des fonctions  $k$ -monotones.

# Index

- $(X_1^{**}, \dots, X_d^{**})$ , 215  
 $(X_1^*, \dots, X_d^*)$ , 215  
 $A^k$ , 202  
 $A_i$ , 172  
 $D$ , 173  
 $D_\nu^*$ , 69  
 $D_\nu$ , 70  
 $E_j$ , 138  
 $F(t)$ , 125  
 $F_f^j$ , 63  
 $H(\varepsilon)$ , 128  
 $H_S$ , 70  
 $K(q, p^*, n)$ , 122  
 $K_1(q, p^*)$ , 122  
 $K_2(q, p^*)$ , 122  
 $M^k$ , 202  
 $M_{p^*}(t, q)$ , 119  
 $M_q(t)$ , 125  
 $N$ , 173  
 $N(\varepsilon, \mathcal{T}, d)$ , 40  
 $N_{[\cdot]}(\varepsilon, \mathcal{T}, d)$ , 40  
 $Q_S$ , 70  
 $Q_j^k$ , 57  
 $R(q, p^*, n)$ , 122  
 $S_j$ , 173  
 $T_j$ , 56  
 $\Delta^k$ , 53  
 $\Gamma$ , 202  
 $\Psi$ , 68  
 $\mathcal{Z}$ , 202  
 $\beta(f)$ , 64  
 $\delta_j(t, q, p^*)$ , 127  
 $\hat{N}^{k, LSE}$ , 181  
 $\hat{N}^{k, emp}$ , 181  
 $\hat{\pi}^*$ , 68  
 $\hat{\pi}^{*L}$ , 69  
 $\hat{p}$ , 65  
 $\hat{p}^k$ , 64  
 $\hat{p}^{*k}$ , 62  
 $\hat{p}_0^{k, LSE}$ , 181  
 $\hat{p}_0^{k, emp}$ , 181  
 $\hat{p}_n^{*L}$ , 67  
 $\hat{p}_n^L$ , 67  
 $\lambda_S$ , 70  
 $\lambda_\ell$ , 74  
 $\mathbb{H}_0^k$ , 201  
 $\mathbb{H}_1^k$ , 201  
 $\mathcal{F}_{I_j}^k(t, q)$ , 127  
 $\mathcal{M}$ , 39  
 $\mathcal{M}^B(\mathbb{R}^+)$ , 144  
 $\mathcal{M}_+$ , 39  
 $\mathcal{P}$ , 39  
 $\mathcal{P}^k$ , 53  
 $\mathcal{P}_0^k$ , 122  
 $\mathcal{P}_L^k$ , 53  
 $\mathcal{R}$ , 42  
 $\mathcal{S}^k$ , 53  
 $\mathcal{S}_L^k$ , 53  
 $\mathcal{S}^{1, B}$ , 144  
 $\mathcal{S}_L^{k, B}$ , 143  
 $\nu_{j, u}^*$ , 215  
 $\nu_u$ , 202  
 $\pi_S$ , 70  
 $\tilde{p}_n$ , 62  
 $\tilde{s}_n$ , 65  
 $\hat{s} = s$ , 65  
 $\tilde{s}^k$ , 183  
 $\tilde{M}^k$ , 202  
 $\tilde{\mathcal{T}}^k$ , 202  
 $\tilde{\mathcal{U}}^k$ , 202  
 $\tilde{\mathcal{Z}}$ , 202  
 $\tilde{\mathcal{S}}_\alpha^k$ , 202  
 $\tilde{k}_\alpha$ , 215  
 $\tilde{q}_\alpha^k$ , 202  
 $\tilde{u}_\alpha^k$ , 202  
 $f(x, n, r, p^*)$ , 122  
 $f_j^{**}$ , 215  
 $f_j^*$ , 215  
 $m_l^k$ , 57  
 $p^*$ , 62  
 $p^+$ , 173  
 $q_\alpha^{*k}$ , 215



---

$q_\alpha^k$ , 202

$r(q)$ , 122

$u_\alpha^{*k}$ , 215

$u_\alpha^k$ , 202

$\tilde{\Gamma}$ , 202

$\tilde{\tau}$ , 202

## Bibliography

- J. Ahn, R. Sinha, Z. Pei, C. Dominianni, J. Wu, J. Shi, J. J. Goedert, R. B. Hayes, and L. Yang. Human gut microbiome and risk of colorectal cancer. *Journal of the National Cancer Institute*, page djt300, 2013.
- N. Akakpo, F. Balabdaoui, and C. Durot. Testing monotonicity via local least concave majorants. *Bernoulli*, 20(2):514–544, 2014.
- H. K. Allen, J. Bunge, J. A. Foster, D. O. Bayles, and T. B. Stanton. Estimation of viral richness from shotgun metagenomes using a frequency count approach. *Microbiome*, 1(1):1, 2013.
- D. Amelunxen, M. Lotz, M. B. McCoy, and J. A. Tropp. Living on the edge: Phase transitions in convex programs with random data. *Information and Inference*, page iau005, 2014.
- M. Azadbakhsh, H. Jankowski, and X. Gao. Computing confidence intervals for log-concave densities. *Computational Statistics & Data Analysis*, 75:248–264, 2014.
- F. Balabdaoui. A curious fact about  $k$ -monotone functions ( $k > 2$ ). 2003.
- F. Balabdaoui. *Nonparametric estimation of a  $k$ -monotone density: A new asymptotic distribution theory*. PhD thesis, University of Washington, 2004.
- F. Balabdaoui. Consistent estimation of a convex density at the origin. *Mathematical Methods of Statistics*, 16(2):77–95, 2007.
- F. Balabdaoui. Global convergence of the log-concave mle when the true distribution is geometric. *Journal of Nonparametric Statistics*, 26(1):21–59, 2014.
- F. Balabdaoui and C. R. Doss. Inference for a mixture of symmetric distributions under log-concavity. *arXiv preprint arXiv:1411.4708*, 2014.
- F. Balabdaoui and C. Durot. Marshall lemma in discrete convex estimation. *Statistics & Probability Letters*, 99:143–148, 2015.
- F. Balabdaoui and H. Jankowski. Maximum likelihood estimation of a unimodal probability mass function. 2015.
- F. Balabdaoui and K. Rufibach. A second marshall inequality in convex estimation. *Statistics & Probability Letters*, 78(2):118–126, 2008.
- F. Balabdaoui and J. A. Wellner. Estimation of a  $k$ -monotone density: limit distribution theory and the spline connection. *The Annals of Statistics*, pages 2536–2564, 2007.
- F. Balabdaoui and J. A. Wellner. Estimation of a  $k$ -monotone density: characterizations, consistency and minimax lower bounds. *Statistica Neerlandica*, 64(1):45–70, 2010.

- 
- F. Balabdaoui, K. Rufibach, and J. A. Wellner. Limit distribution theory for maximum likelihood estimation of a log-concave density. *Annals of statistics*, 37(3):1299, 2009.
- F. Balabdaoui, H. Jankowski, M. Pavlides, A. Seregin, and J. Wellner. On the grenander estimator at zero. *Statistica Sinica*, 21(2):873, 2011.
- F. Balabdaoui, H. Jankowski, K. Rufibach, and M. Pavlides. Asymptotics of the discrete log-concave maximum likelihood estimator and related applications. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 75(4):769–790, 2013.
- F. Balabdaoui, C. Durot, and F. Koladjo. On asymptotics of the discrete convex lse of a pmf. *arXiv preprint arXiv:1404.3094*, 2014.
- F. Balabdaoui, C. Durot, and F. Koladjo. On asymptotics of the discrete convex lse of a pmf. *Bernoulli*, 23(3):1449–1480, 2017a.
- F. Balabdaoui, C. Durot, and F. Koladjo. Testing convexity of a discrete distribution. *arXiv preprint arXiv:1701.04367*, 2017b.
- K. Barger and J. Bunge. Bayesian estimation of the number of species using noninformative priors. *Biometrical Journal*, 50(6):1064–1076, 2008.
- K. Barger and J. Bunge. Objective bayesian estimation for the number of species. *Bayesian Analysis*, 5(4):765–785, 2010.
- R. Barlow, D. Bartholomew, J. Bremner, and H. Brunk. *Statistical inference under order restrictions*. 1972. Wiley, New York.
- A. Barron, L. Birgé, and P. Massart. Risk bounds for model selection via penalization. *Probability theory and related fields*, 113(3):301–413, 1999.
- P. C. Bellec. Sharp oracle inequalities for least squares estimators in shape restricted regression. *arXiv preprint arXiv:1510.08029*, 2016.
- P. C. Bellec and A. B. Tsybakov. Sharp oracle bounds for monotone and convex regression through aggregation. *Journal of Machine Learning Research*, 16:1879–1892, 2015.
- P. J. Bickel and J. Fan. Some problems on the estimation of unimodal densities. *Statistica Sinica*, pages 23–45, 1996.
- L. Birge. The grenader estimator: A nonasymptotic approach. *The Annals of Statistics*, pages 1532–1549, 1989.
- L. Birge. Estimation of unimodal densities without smoothness assumptions. *The Annals of Statistics*, pages 970–981, 1997.
- L. Birgé and P. Massart. From model selection to adaptive estimation. In *Festschrift for lucien le cam*, pages 55–87. Springer, 1997.
- D. Böhning and D. Schön. Nonparametric maximum likelihood estimation of population size based on the counting distribution. *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, 54(4):721–737, 2005.
- v. d. H. P. Böhning Dankmar, Bunge John. *Basic concepts of capture-recapture*. Chapman and Hall CRC Interdisciplinary Statistics, 2017.
- S. Boyd and L. Vandenberghe. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.

- 
- J. G. Breman and K. M. Johnson. Ebola then and now. *New England Journal of Medicine*, 371(18):1663–1666, 2014.
- H. Brunk. *Estimation of isotonic regression*. University of Missouri-Columbia, 1969.
- J. Bunge. Estimating the number of species with catchall. 16:121–130, 2011.
- J. Bunge and K. Barger. Parametric models for estimating the number of classes. *Biometrical Journal*, 50(6):971–982, 2008.
- J. Bunge and M. Fitzpatrick. Estimating the number of species: a review. *Journal of the American Statistical Association*, 88(421):364–373, 1993.
- J. Bunge, A. Willis, and F. Walsh. Estimating the number of species in microbial diversity studies. *Annual Review of Statistics and Its Application*, 1:427–445, 2014.
- C. L. Canonne, I. Diakonikolas, T. Gouleakis, and R. Rubinfeld. Testing shape restrictions of discrete distributions. *arXiv preprint arXiv:1507.03558*, 2015.
- G. Chagny. *Estimation adaptative avec des données transformées ou incomplètes. Application à des modèles de survie*. PhD thesis, Université René Descartes-Paris V, 2013.
- A. Chao. Nonparametric estimation of the number of classes in a population. *Scandinavian Journal of statistics*, pages 265–270, 1984.
- A. Chao and J. Bunge. Estimating the number of species in a stochastic abundance model. *Biometrics*, 58(3):531–539, 2002.
- A. Chao and S.-M. Lee. Estimating the number of classes via sample coverage. *Journal of the American statistical Association*, 87(417):210–217, 1992.
- A. Chao and C.-W. Lin. Nonparametric lower bounds for species richness and shared species richness under sampling without replacement. *Biometrics*, 68(3):912–921, 2012.
- S. Chatterjee. A new perspective on least squares under convex constraint. *The Annals of Statistics*, 42(6):2340–2381, 2014.
- S. Chatterjee and J. Lafferty. Adaptive risk bounds in unimodal regression. *arXiv preprint arXiv:1512.02956*, 2015.
- S. Chatterjee, A. Guntuboyina, and B. Sen. On risk bounds in isotonic and other shape restricted regression problems. *The Annals of Statistics*, 43(4):1774–1800, 2015.
- C.-S. Chee and Y. Wang. Least squares estimation of a k-monotone density function. *Computational Statistics & Data Analysis*, 74:209–216, 2014.
- C.-S. Chee and Y. Wang. Nonparametric estimation of species richness using discrete k-monotone distributions. *Computational Statistics & Data Analysis*, 93:107–118, 2016.
- H. Chen and D. D. Yao. *Fundamentals of queueing networks: Performance, asymptotics, and optimization*, volume 46. Springer Science & Business Media, 2013.
- Y. Chen and R. J. Samworth. Smoothed log-concave maximum likelihood estimation with applications. *Statistica Sinica*, pages 1373–1398, 2013.
- Y. Chen and J. A. Wellner. On convex least squares estimation when the truth is linear. *Electronic Journal of Statistics*, 10(1):171–209, 2016.
- J. H. Conway and R. K. Guy. The book of numbers. page 106, 1996.

- 
- M. Cule, R. Gramacy, and R. Samworth. Logconcdead: An r package for maximum likelihood estimation of a multivariate log-concave density. *Journal of Statistical Software*, 29(2):1–20, 2009.
- A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin. Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the royal statistical society. Series B (methodological)*, pages 1–38, 1977.
- I. Diakonikolas and D. M. Kane. A new approach for testing properties of discrete distributions. In *Foundations of Computer Science (FOCS), 2016 IEEE 57th Annual Symposium on*, pages 685–694. IEEE, 2016.
- C. R. Doss and J. A. Wellner. Global rates of convergence of the mles of log-concave and  $s$ -concave densities. *The Annals of Statistics*, 44(3):954–981, 2016.
- L. Dümbgen and K. Rufibach. Maximum likelihood estimation of a log-concave density and its distribution function: Basic properties and uniform consistency. *Bernoulli*, 15(1):40–68, 2009.
- L. Dümbgen and K. Rufibach. logcondens: Computations related to univariate log-concave density estimation. *Journal of Statistical Software*, to appear, 2010.
- L. Dümbgen, A. Hüsler, and K. Rufibach. Active set and em algorithms for log-concave densities based on complete and censored data. *arXiv preprint arXiv:0707.4643*, 2007.
- L. Dümbgen, R. Samworth, and D. Schuhmacher. Approximation by log-concave distributions, with applications to regression. *The Annals of Statistics*, pages 702–730, 2011.
- C. Durot. On the-error of monotonicity constrained estimators. *The Annals of Statistics*, 35(3):1080–1104, 2007.
- C. Durot and L. Reboul. Goodness-of-fit test for monotone functions. *Scandinavian Journal of Statistics*, 37(3):422–441, 2010.
- C. Durot, S. Huet, F. Koladjo, and S. Robin. Least-squares estimation of a convex discrete distribution. *Computational Statistics & Data Analysis*, 67:282–298, 2013.
- C. Durot, S. Huet, F. Koladjo, and S. Robin. Nonparametric species richness estimation under convexity constraint. *Environmetrics*, 26(7):502–513, 2015.
- C. Durot, J. Giguelay, S. Huet, F. Koladjo, and S. Robin. *Convex Estimation. In Capture-Recapture Methods for the Social and Medical Sciences*. Chapman and Hall CRC Interdisciplinary Statistics, 2017.
- B. Efron and R. Thisted. Estimating the number of unseen species: How many words did shakespeare know? *Biometrika*, pages 435–447, 1976.
- L. Fejér. Trigonometrische reihen und potenzreihen mit mehrfach monotoner koeffizientenfolge. *Transactions of the American Mathematical Society*, 39(1):18–59, 1936.
- W. Feller. Completely monotone functions and sequences. *Duke Math. J*, 5:661–674, 1939.
- R. A. Fisher, A. S. Corbet, and C. B. Williams. The relation between the number of species and the number of individuals in a random sample of an animal population. *The Journal of Animal Ecology*, pages 42–58, 1943.
- N. Flammarion, C. Mao, and P. Rigollet. Optimal rates of statistical seriation. *arXiv preprint arXiv:1607.02435*, 2016.

- 
- A.-L. Fougères. Estimation de densités unimodales. *Canadian Journal of Statistics*, 25(3): 375–387, 1997.
- O. Frank. Estimation of the number of connected components in a graph by using a sampled subgraph. *Scandinavian Journal of Statistics*, pages 177–188, 1978.
- R. L. Frank, M. Loss, and T. Weidl. Pólya’s conjecture in the presence of a constant magnetic field. *arXiv preprint arXiv:0710.1078*, 2007.
- F. Gao. Entropy estimate for  $k$ -monotone functions via small ball probability of integrated brownian motion. *Electron. Commun. Probab*, 13:121–130, 2008.
- F. Gao and J. A. Wellner. On the rate of convergence of the maximum likelihood estimator of a  $k$ -monotone density. *Science in China Series A: Mathematics*, 52(7):1525–1538, 2009.
- J. Giguelay. Test de convexité pour les densités discrètes. 2014.
- J. Giguelay. Estimation of a discrete probability under constraint of  $k$ -monotonicity. *Electronic Journal of Statistics*, 11(1):1–49, 2017.
- C. Giraud. *Introduction to high-dimensional statistics*, volume 138. CRC Press, 2014.
- U. Grenander. On the theory of mortality measurement: part ii. *Scandinavian Actuarial Journal*, 1956(2):125–153, 1956.
- P. Groeneboom. Estimating a monotone density. *Department of Mathematical Statistics*, (R 8403):1–14, 1984.
- P. Groeneboom and G. Jongbloed. *Nonparametric estimation under shape constraints*, volume 38. Cambridge University Press, 2014.
- P. Groeneboom and G. Jongbloed. Nonparametric confidence intervals for monotone functions. *The Annals of Statistics*, 43(5):2019–2054, 2015.
- P. Groeneboom, G. Hooghiemstra, and H. P. Lopuhaä. Asymptotic normality of the  $l_1$  error of the grenander estimator. *The Annals of Statistics*, 27(4):1316–1347, 1999.
- P. Groeneboom, G. Jongbloed, and J. A. Wellner. Estimation of a convex function: Characterizations and asymptotic theory. *Annals of Statistics*, pages 1653–1698, 2001.
- P. Groeneboom, G. Jongbloed, and J. A. Wellner. The support reduction algorithm for computing non-parametric function estimates in mixture models. *Scandinavian Journal of Statistics*, 35(3):385–399, 2008.
- A. Guntuboyina and B. Sen. Covering numbers for convex functions. *IEEE Transactions on Information Theory*, 59(4):1957–1965, 2013.
- A. Guntuboyina and B. Sen. Global risk bounds and adaptation in univariate convex regression. *Probability Theory and Related Fields*, 163(1-2):379–411, 2015.
- B. Harris. Determining bounds on integrals with applications to cataloging problems. *The Annals of Mathematical Statistics*, pages 521–548, 1959.
- J. A. Hartigan and P. Hartigan. The dip test of unimodality. *The Annals of Statistics*, pages 70–84, 1985.
- D. A. Hejhal et al. The selberg trace formula and the riemann zeta function. *Duke Math. J*, 43(3):441–482, 1976.

- 
- S.-H. Hong, J. Bunge, S.-O. Jeon, and S. S. Epstein. Predicting microbial species richness. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 103(1):117–122, 2006.
- Y.-I. Hser. Population estimation of illicit drug users in los angeles county. *The Journal of Drug Issues*, 23:323(334, 2001.
- H. Hu. A study of log-concave mixture models. 2016.
- H. Hu, Y. Wu, and W. Yao. Maximum likelihood estimation of the mixture of log-concave densities. *Computational Statistics & Data Analysis*, 101:137–147, 2016.
- J. Huang and J. A. Wellner. Estimation of a monotone density or monotone hazard under random censoring. *Scandinavian Journal of Statistics*, pages 3–33, 1995.
- H. Jankowski. Convergence of linear functionals of the grenander estimator under misspecification. *The Annals of Statistics*, 42(2):625–653, 2014.
- H. K. Jankowski and J. A. Wellner. Computation of nonparametric convex hazard estimators via profile methods. *Journal of nonparametric statistics*, 21(4):505–518, 2009a.
- H. K. Jankowski and J. A. Wellner. Estimation of a discrete monotone distribution. *Electronic journal of statistics*, 3:1567, 2009b.
- H. K. Jankowski and J. A. Wellner. Nonparametric estimation of a convex bathtub-shaped hazard function. *Bernoulli: official journal of the Bernoulli Society for Mathematical Statistics and Probability*, 15(4):1010, 2009c.
- N. P. Jewell. Mixtures of exponential distributions. *The Annals of Statistics*, pages 479–484, 1982.
- M. Kacem. *Processus de risque: modélisation de la dépendance et évaluation du risque sous des contraintes de convexité*. PhD thesis, Université Lyon 1, 2013.
- D.-W. Kang, J. G. Park, Z. E. Ilhan, G. Wallstrom, J. LaBaer, J. B. Adams, and R. Krajmalnik-Brown. Reduced incidence of prevotella and other fermenters in intestinal microflora of autistic children. *PloS one*, 8(7):e68322, 2013.
- A. K. Kim and R. J. Samworth. Global rates of convergence in log-concave density estimation. *The Annals of Statistics*, 44(6):2756–2779, 2016.
- A. K. Kim, A. Guntuboyina, and R. J. Samworth. Adaptation in log-concave density estimation. *arXiv preprint arXiv:1609.00861*, 2016.
- K. Knopp. Mehrfach monotone zahlenfolgen. *Mathematische Zeitschrift*, 22(1):75–85, 1925.
- F. Koladjo. Estimation d’une distribution discrète sous contrainte de convexité : Application à l’estimation du nombre d’espèces de la faune ichtyologique du bassin du fleuve ouémé. *manuscrit de thèse*, 2013.
- K. Kopotun and A. Shadrin. On k-monotone approximation by free knot splines. *SIAM journal on mathematical analysis*, 34(4):901–924, 2003.
- K. A. Kopotun. Approximation of k-monotone functions. *Journal of approximation theory*, 94(3):481–493, 1998.
- K. A. Kopotun. Whitney theorem of interpolatory type for k-monotone functions. *Constructive approximation*, 17(2):307–317, 2001.

- 
- A. D. Kostic, D. Gevers, H. Siljander, T. Vatanen, T. Hyötyläinen, A.-M. Hämäläinen, A. Peet, V. Tillmann, P. Pöhö, and I. Mattila. The dynamics of the human infant gut microbiome in development and in progression toward type 1 diabetes. *Cell host & microbe*, 17(2):260–273, 2015.
- N. Laird. Nonparametric maximum likelihood estimation of a mixing distribution. *Journal of the American Statistical Association*, 73(364):805–811, 1978.
- E. Le Chatelier, T. Nielsen, J. Qin, E. Prifti, F. Hildebrand, G. Falony, M. Almeida, M. Arumugam, J.-M. Batto, and S. Kennedy. Richness of human gut microbiome correlates with metabolic markers. *Nature*, 500(7464):541–546, 2013.
- M. Ledoux and M. Talagrand. *Probability in Banach spaces, volume 23 of Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete (3)[Results in Mathematics and Related Areas (3)]*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- C. Lefevre and S. Loisel. On multiply monotone distributions, continuous or discrete, with applications. *Journal of Applied Probability*, 50(3):827–847, 2013.
- A. S. Lele, S. R. Kulkarni, and A. S. Willsky. Convex-polygon estimation from support-line measurements and applications to target reconstruction from laser-radar data. *JOSA A*, 9(10):1693–1714, 1992.
- P. Li and S.-T. Yau. On the schrödinger equation and the eigenvalue problem. *Communications in Mathematical Physics*, 88(3):309–318, 1983.
- Y. Li. Bayesian nonparametric methods for testing shape constraints. 2015.
- S. Li-Thiao-Té, D. Jean-Jacques, and R. Stéphane. Bayesian model averaging for estimating the number of classes: applications to the total number of species in metagenomics. *Journal of Applied Statistics*, 39(7):1489–1504, 2012.
- E. R. Lieb. The number of bound states of one schoedinger operators and the weyl problem. *Geometry of the Laplace Operator*, 36:241, 1980.
- B. G. Lindsay. Mixture models: theory, geometry and applications. pages i–163, 1995.
- M. H. Maathuis and M. G. Hudgens. Nonparametric inference for competing risks current status data with continuous, discrete or grouped observation times. *Biometrika*, page asq083, 2011.
- P. Mair, K. Hornik, and J. de Leeuw. Isotone optimization in r: pool-adjacent-violators algorithm (pava) and active set methods. *Journal of statistical software*, 32(5):1–24, 2009.
- E. Mammen. Estimating a smooth monotone regression function. *The Annals of Statistics*, pages 724–740, 1991.
- C. R. Margules, R. Pressey, and P. Williams. Representing biodiversity: data and procedures for identifying priority areas for conservation. *Journal of biosciences*, 27(4): 309–326, 2002.
- P. Massart. *Concentration inequalities and model selection*, volume 6. Springer, 2007.
- K. Matsuoka and T. Kanai. The gut microbiota and inflammatory bowel disease. 37(1): 47–55, 2015.



- 
- G. Métivier. Valeurs propres de problèmes aux limites elliptiques irréguliers. *Bull. Soc. Math. France, Mem.*, 51(52):125–219, 1977.
- M. C. Meyer and M. Woodroffe. Consistent maximum likelihood estimation of a unimodal density using shape restrictions. *Canadian Journal of Statistics*, 32(1):85–100, 2004.
- J. L. Norris and K. H. Pollock. Non-parametric mle for poisson species abundance models allowing for heterogeneity between species. *Environmental and Ecological Statistics*, 5(4):391–402, 1998.
- J. L. Norris III and K. H. Pollock. Nonparametric mle under two closed capture-recapture models with heterogeneity. *Biometrics*, pages 639–649, 1996.
- G. Pólya. On the eigenvalues of vibrating membranes. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 3(1):419–433, 1961.
- P. Poncet. modeest: mode estimation, r package version 1.14, 2012.
- B. P. Rao. Estimation of a unimodal density. *Sankhyā: The Indian Journal of Statistics, Series A*, pages 23–36, 1969.
- L. Reboul. *Estimation sous restriction de forme et application a la fiabilité. Tests de validation d'un modele parametrique pour un processus de poisson non homogene*. PhD thesis, 1998.
- G. Rozenbljum. On the eigenvalues of the first boundary value problem in unbounded domains. *Mathematics of the USSR-Sbornik*, 18(2):235, 1972.
- K. Rufibach. Computing maximum likelihood estimators of a log-concave density function. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 77(7):561–574, 2007.
- K. Rufibach. A smooth roc curve estimator based on log-concave density estimates. *The international journal of biostatistics*, 8(1), 2012.
- K. Rufibach and L. Duembgen. Logcondens: estimate a log-concave probability density from iid observations. *R package version*, 1(0), 2006.
- L. Sanathanan. Estimating the size of a multinomial population. *The Annals of Mathematical Statistics*, pages 142–152, 1972.
- A. Saumard and J. A. Wellner. Log-concavity and strong log-concavity: a review. *Statistics surveys*, 8:45, 2014.
- J. G. Scott, T. S. Shively, and S. G. Walker. Nonparametric bayesian testing for monotonicity. *arXiv preprint arXiv:1304.3378*, 2013.
- J. Shao. *Mathematical Statistics*. Springer, 2003.
- B. Silverman. Some properties of a test for multimodality based on kernel density estimates. *Probability, statistics and analysis*, 79:248–259, 1983.
- M. Spevack. A complete and systematic concordance to the works of shakespeare. vol. 3: Drama and character concordances to the folio tragedies, 1968.
- J. Tap, S. Mondot, F. Levenez, E. Pelletier, C. Caron, J.-P. Furet, E. Ugarte, R. Muñoz-Tamayo, D. L. Paslier, R. Nalin, et al. Towards the human intestinal microbiota phylogenetic core. *Environmental microbiology*, 11(10):2574–2584, 2009.

- 
- B. C. Turnbull and S. K. Ghosh. Unimodal density estimation using bernstein polynomials. *Computational Statistics & Data Analysis*, 72:13–29, 2014.
- S. van de Geer. Hellinger-consistency of certain nonparametric maximum likelihood estimators. *The Annals of Statistics*, pages 14–44, 1993.
- J.-P. Wang. Estimating species richness by a poisson-compound gamma model. *Biometrika*, page asq026, 2010.
- J.-P. Z. Wang and B. G. Lindsay. A penalized nonparametric maximum likelihood approach to species richness estimation. *Journal of the American Statistical Association*, 100(471): 942–959, 2005.
- Y. Wang. The  $l_1$  theory of estimation of monotone and unimodal densities. *Journal of Nonparametric Statistics*, 4(3):249–261, 1995.
- E. J. Wegman. *On estimating a unimodal density*. 1968.
- H. Weyl. Das asymptotische verteilungsgesetz der eigenwerte linearer partieller differentialgleichungen (mit einer anwendung auf die theorie der hohlraumstrahlung). *Mathematische Annalen*, 71(4):441–479, 1912.
- R. E. Williamson. *On Multiply Monotone Functions and Their Laplace Transforms*. PhD thesis, Graduate School of Arts and Sciences, University of Pennsylvania, 1955.
- M. A. Wolters. A greedy algorithm for unimodal kernel density estimation by data sharpening. 2009.
- M. Woodroffe and J. Sun. A penalized maximum likelihood estimate of  $f(0+)$  when  $f$  is non-increasing. *Statistica Sinica*, pages 501–515, 1993.

## RÉSUMÉ :

Cette thèse est une contribution au domaine de l'estimation non-paramétrique sous contrainte de forme. Les fonctions sont discrètes et la forme considérée, appelée  $k$ -monotonie,  $k$  désignant un entier supérieur à 2, est une généralisation de la convexité. L'entier  $k$  constitue un indicateur du degré de creux d'une fonction convexe. L'introduction comprend trois chapitres. Le premier présente un état de l'art de l'estimation de densité sous contrainte de forme. Le second est une synthèse des résultats obtenus au cours de la thèse, disponible en français et en anglais. Enfin, le Chapitre 3 regroupe quelques notations et des résultats mathématiques utilisés au cours du manuscrit.

**Partie I :** Deux estimateurs des moindres carrés d'une distribution discrète  $p^*$  sous contrainte de  $k$ -monotonie sont proposés. Leur caractérisation est basée sur la décomposition en base de spline des suites  $k$ -monotones, et sur les propriétés de leurs primitives. Les propriétés statistiques de ces estimateurs sont étudiées. Leur qualité d'estimation, en particulier, est appréciée. Elle est mesurée en terme d'erreur quadratique, les deux estimateurs convergent à la vitesse paramétrique. Un algorithme dérivé de l'Algorithme de Réduction de Support est implémenté et une étude sur jeux de données simulés illustre les propriétés de ces estimateurs.

**Partie II :** Dans le premier chapitre de la Partie II, le risque quadratique de l'estimateur des moindres carrés introduit précédemment est borné. Cette borne est adaptative en le sens qu'elle dépend d'un compromis entre la distance de  $p^*$  à la frontière de l'ensemble des densités  $k$ -monotones à support fini, et de la *complexité* (en terme de décomposition dans la base de spline) des densités appartenant à cet ensemble qui sont *suffisamment proches* de  $p^*$ . La méthode est basée sur une formulation variationnelle du risque proposée par Chatterjee (2014) et généralisée au cadre de l'estimation de densité. Par la suite, les entropies à crochet des espaces fonctionnels correspondants sont calculées afin de contrôler le supremum de processus empiriques impliqué dans l'erreur quadratique. L'optimalité de la borne de risque est ensuite discutée au regard des résultats obtenus dans le cas continu et dans le cadre de la régression. Dans le second chapitre de la Partie II, des résultats complémentaires sur les entropies à crochet pour les espaces de fonctions  $k$ -monotones sont donnés.

**Partie III :** La dernière partie traite du problème de l'estimation du nombre d'espèces dans une population. La modélisation choisie est celle d'une distribution d'abondance commune à toutes les espèces et définie comme un mélange. La méthode proposée repose sur l'hypothèse de  $k$ -monotonie d'abondance. Cette hypothèse permet de rendre le problème de l'estimation du nombre d'espèces identifiable. Deux approches sont proposées. La première est basée sur l'estimateur des moindres carrés sous contrainte de  $k$ -monotonie, tandis que la seconde est basée sur l'estimateur empirique. Les deux estimateurs sont comparés sur une étude sur données simulées. L'estimation du nombre d'espèces étant fortement dépendante du degré de  $k$ -monotonie choisi dans le modèle, trois procédures de tests multiples sont ensuite proposées pour inférer le degré  $k$  directement sur la base des observations. Le niveau et la puissance de ces procédures sont calculés, puis évalués au moyen d'une étude sur jeux de données simulés et la méthode est appliquée sur des jeux de données réels issus de la littérature.

## ABSTRACT :

This thesis belongs to the field of nonparametric density estimation under shape constraint. The densities are discrete and the form is  $k$ -monotonicity,  $k \geq 2$ , which is a generalization of convexity. The integer  $k$  is an indicator for the hollow's degree of a convex function. The introduction is structured in three chapters. First Chapter is a state of the art of the topic of density estimation under shape constraint. The second chapter of the introduction is a synthesis of the thesis, available in French and in English. Finally Chapter 3 is a short chapter which summarizes the notations and the classical mathematical results used in the manuscript.

**Part I :** Two least-square estimators of a discrete distribution  $p^*$  under constraint of  $k$ -monotonicity are proposed. Their characterization is based on the decomposition on a spline basis of  $k$ -monotone sequences, and on the properties of their primitives. Their statistical properties are studied, and in particular their quality of estimation is measured in terms of the quadratic error. They are proved to converge at the parametric rate. An algorithm derived from the support reduction algorithm is implemented and a simulation study illustrates the properties of the estimators.

**Part II :** In the first chapter of Part II, a methodology for calculating risk bounds of the least-square estimator is given. These bounds are adaptive in that they depend on a compromise between the distance of  $p^*$  on the frontier of the set of  $k$ -monotone densities with finite support, and the *complexity* (linked to the spline decomposition) of densities belonging to this set that are closed to  $p^*$ . The methodology based on the variational formula of the risk proposed by Chatterjee (2014) is generalized to the framework of discrete  $k$ -monotonic densities. Then the bracketing entropies of the relevant functional space are calculating, leading to control the empirical process involved in the quadratic risk. Optimality of the risk bound is discussed in comparison with the results previously obtained in the continuous case and for the gaussian regression framework. In the second chapter of Part II, several results concerning bracketing entropies of spaces of  $k$ -monotone sequences are presented.

**Part III :** The last part deals with the problem of estimating the number of present species in a given area at a given time, based on the abundances of species that have been observed. A definition of a  $k$ -monotone abundance distribution is proposed. It allows to relate the probability of observing zero species to the truncated abundance distribution. Two approaches are proposed. The first one is based on the Least-Squares estimator under constraint of  $k$ -monotonicity, the second one is based on the empirical distribution. Both estimators are compared using a simulation study. Because the estimator of the number of species depends on the value of the degree of monotonicity  $k$ , we propose a procedure for choosing this parameter, based on nested testing procedures. The asymptotic levels and power of the testing procedure are calculated, and the behaviour of the method in practical cases is assessed on the basis of a simulation study.