

Estimation adaptative non paramétrique pour les modèles à chaîne de Markov cachée

LUC LEHÉRICY

Mémoire du M2 MFA PS (année 2014-2015) de l'université Paris-Sud 11,
réalisé sous la direction d'Elisabeth GASSIAT

Table des matières

1	Modèles à chaîne de Markov cachée et cadre d'étude	3
1.1	Définition du modèle	3
1.2	Hypothèses	3
1.3	Identifiabilité du modèle	4
2	Estimation de la densité de trois observations consécutives	4
2.1	Enoncé des théorèmes de convergence	7
2.1.1	Nombre d'états cachés connu	7
2.1.2	Nombre d'états cachés inconnu	8
2.2	Preuve de la borne oracle avec sélection du nombre d'états cachés	10
2.3	Preuve de la consistance de l'estimateur du nombre d'états cachés	12
2.3.1	Cas $K < K^*$	12
2.3.2	Cas $K > K^*$ (et $K \leq \log(N)$)	14
2.4	Preuve du lemme de contrôle des $Z_{K,M}(s)$ (lemme 2)	15
2.4.1	Inégalité de concentration pour $Z_{K,M}(s)$	16
2.4.2	Contrôle de l'entropie à crochets	18
2.4.3	Choix des paramètres	22
2.4.4	Pistes d'amélioration	23
3	Estimation spectrale	23
3.1	Justification théorique	23
3.2	Algorithme d'estimation	26
4	Simulations numériques	28

Introduction

Les modèles à chaîne de Markov cachée sont une classe de modèles très utilisée pour étudier des données présentant une certaine cohérence spatiale ou temporelle : étude du génôme, traitement du signal, analyse d'images, reconnaissance de langage etc.

Essentiellement, un modèle à chaîne de Markov cachée est un processus markovien $(X_n, Y_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tel que (X_n) est une chaîne de Markov et que pour tout n , l'observation Y_n ne dépend que de X_n et est indépendante des autres Y_k conditionnellement à (X_n) .

Deux méthodes d'estimation répandues sont la maximisation de la vraisemblance, souvent couplée à l'algorithme EM¹, ainsi que l'estimation spectrale (voir par exemple [HKZ12], [AHK12]). Toutefois, les méthodes fondées sur l'algorithme EM présentent des défauts tels que la lenteur de la convergence et le risque de se retrouver bloqué dans un maximum local de la vraisemblance. Pour sa part, la méthode spectrale ne permet pas d'atteindre la vitesse de convergence minimax dans le cas non paramétrique, mais elle présente tout de même des garanties de convergence satisfaisantes (voir [dCGLLC15]) qui la rendent intéressante comme point de départ d'un algorithme itératif.

Jusqu'à récemment, les garanties de performance des estimateurs ne portaient que sur le cas paramétrique, c'est-à-dire le cas où les lois possible pour Y dépendent d'un nombre fini de paramètres.

L'article [dCGL15] introduit une méthode de moindres carrés pénalisés permettant d'estimer les paramètres de modèles à chaîne de Markov cachée dans un cadre non paramétrique, pour laquelle les auteurs prouvent une borne oracle garantissant une vitesse de convergence presque minimax. Nous reprenons et généralisons leur preuve dans le cas où le nombre d'états cachés est inconnu, sans toutefois obtenir la meilleure pénalité possible.

Malheureusement, il n'existe pas de formule explicite pour le minimiseur du critère des moindres carrés. Il est donc nécessaire pour l'estimer d'utiliser un algorithme de minimisation approchée. L'estimateur spectral constitue dans ce cadre un point de départ intéressant pour un algorithme itératif grâce à ses garanties de convergence.

C'est l'approche adoptée dans [dCGL15], où les simulations réalisées sur un modèle à chaîne de Markov cachée à deux états cachés confirment les garanties théoriques. Nous avons repris leurs codes de simulation et les avons généralisés pour prendre en compte un plus grand nombre d'états cachés, ce qui met en évidence un comportement de l'estimateur pouvant déboucher sur une nouvelle procédure de sélection du nombre d'états cachés.

1. Estimation Maximization

1 Modèles à chaîne de Markov cachée et cadre d'étude

1.1 Définition du modèle

Commençons par définir les modèles à chaîne de Markov cachée que nous utilisons.

Définition 1. *Un modèle à chaîne de Markov cachée (nous utiliserons l'abréviation HMM, Hidden Markov Model en anglais) est un processus $(X_k, Y_k)_{k \geq 1}$ tel que*

- $(X_k)_{k \geq 1}$ est une chaîne de Markov,
- conditionnellement à $(X_k)_{k \geq 1}$, $(Y_k)_{k \geq 1}$ sont des variables indépendantes ;
- pour tout $k \geq 1$, la loi de Y_k conditionnée à $(X_{k'})_{k' \geq 1}$ est égale à la loi de Y_k conditionnée à X_k .

On peut exprimer la loi de Y sachant X à l'aide d'un noyau markovien Q . Les $Q(x, \cdot)$ sont appelés lois d'émission du HMM :

$$\mathbb{P}(Y_k \in A | (X_{k'})_{k' \geq 1}) = Q(X_k, A).$$

Rappelons qu'un noyau markovien Q sur $(E, \mathcal{E}) \times (F, \mathcal{F})$ est une application $(E, \mathcal{F}) \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

- $\forall A \in \mathcal{F}$, $Q(\cdot, A)$ est une fonction mesurable $E \rightarrow \mathbb{R}$,
- $\forall x \in E$, $Q(x, \cdot)$ est une probabilité sur F .

Les paramètres du HMM sont la loi de transition de la chaîne de Markov $(X_k)_{k \geq 1}$, sa loi initiale, et ses lois d'émission. On cherche à les estimer en n'ayant accès qu'aux observations $(Y_k)_k$.

Nous nous restreignons au cas où il existe K^* et D tels que :

- Le processus $(X_k)_k$ ne peut prendre qu'un nombre fini K^* de valeurs, disons $\{1, \dots, K^*\}$ (espace d'états fini). Nous notons \mathbf{Q}^* sa matrice de transition, c'est-à-dire la matrice telle que $\mathbf{Q}^*(i, j) = \mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_k = i)$, et π^* sa loi initiale.
- Le processus $(Y_k)_k$ est à valeurs dans $[0, 1]^D$.

Dans ce cas, la famille des lois d'émission est finie. Nous les notons μ_i^* , pour $i \in \{1, \dots, K^*\}$, où $\mu_i^* = Q(i, \cdot)$ est la loi de Y_k conditionnée à l'évènement $\{X_k = i\}$. Nous supposons que μ_i^* est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, de densité f_i^* , que nous appelons densité d'émission.

1.2 Hypothèses

Nous utiliserons systématiquement les hypothèses suivantes :

- [Hinv] la matrice de transition \mathbf{Q}^* est inversible,
- [Hirréd] la chaîne de Markov $(X_k)_k$ est irréductible aperiodique,
- [Hpi] la loi initiale π^* de $(X_k)_k$ est la mesure invariante,
- [Hlibre] la famille des lois d'émission $\mathbf{f}^* := (f_1^*, \dots, f_{K^*}^*)$ est libre.

Les hypothèses [Hinv] et [Hlibre] sont essentielles pour garantir l'identifiabilité du modèle et la convergence de l'estimateur spectral dans le cas où les observations sont i.i.d., et apparaissent notamment dans [AHK12], [dCGL15], [HKZ12]. Les hypothèses [Hirréd] et [Hpi] permettent d'appliquer la méthode spectrale et les inégalités oracles lorsque les observations sont des triplets consécutifs (donc non i.i.d.) d'un même HMM.

1.3 Identifiabilité du modèle

Un HMM n'est pas forcément identifiable si on ne dispose que d'une ou deux observations (voir par exemple l'annexe G de [AHK12]). En revanche, trois observations suffisent pour garantir l'identifiabilité du modèle (voir par exemple [GCR13])

[HKZ12] présente une méthode spectrale permettant de retrouver la matrice de transition \mathbf{Q}^* ainsi que les lois d'émission à partir de la loi de trois observations consécutives, sous les hypothèses [Hinv], [Hirréd], [Hpi] et [Hlibre], à permutation des états cachés près. D'autres articles l'étudient également, dans un cadre plus général [AHK12] ou dans le cas des HMM non paramétriques [dCGL15]. Nous reprendrons une version adaptée de ce dernier article dans la section 3.

Estimer les paramètres du HMM est donc équivalent à estimer la densité de trois observations consécutives, qui s'écrit dans notre cas :

$$g^*(y_1, y_2, y_3) = \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^{K^*} \pi^*(k_1) \mathbf{Q}^*(k_1, k_2) \mathbf{Q}^*(k_2, k_3) f_{k_1}^*(y_1) f_{k_2}^*(y_2) f_{k_3}^*(y_3)$$

2 Estimation de la densité de trois observations consécutives

Synthèse des principales notations utilisées :

- K^* , \mathbf{Q}^* , \mathbf{f}^* , g^* : section 1 ;
- $g^{\mathbf{Q}, \mathbf{f}}$;
- \mathfrak{P}_M , \mathcal{M} , V_M ;
- \mathcal{F} , $C_{\mathcal{F}, 2}$, $C_{\mathcal{F}, \infty}$;
- \mathcal{Q}_K , $S_{K, M}$, S_K , $S(\mathbf{Q}, M)$, \mathbf{S} ;
- \mathbf{f}_M^* , $g_{K, M}^*$, g_M^* ;
- ν , $Z_{K, M}(s)$: section 2.2 ;
- $H(\epsilon, A, d)$: section 2.4.1.

Commençons par introduire quelques notations qui nous serviront tout au long de ce mémoire :

- Pour tous \mathbf{Q} une matrice de transition irréductible $K \times K$ et $\mathbf{f} = (f_k)_{1 \leq k \leq K} \in \mathbf{L}^2([0, 1]^D, \mathbb{R}_+)^K$ un K -uplet de densités de probabilité, on définit la fonction $g^{\mathbf{Q}, \mathbf{f}} \in \mathbf{L}^2([0, 1]^D)^3, \mathbb{R}_+$ par :

$$g^{\mathbf{Q}, \mathbf{f}}(y_1, y_2, y_3) = \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^K \pi(k_1) \mathbf{Q}(k_1, k_2) \mathbf{Q}(k_2, k_3) f_{k_1}(y_1) f_{k_2}(y_2) f_{k_3}(y_3)$$

où π est la mesure invariante associée à \mathbf{Q} . $g^{\mathbf{Q}, \mathbf{f}}$ est la densité de trois observations consécutives du HMM de paramètres $(\pi, \mathbf{Q}, \mathbf{f})$. En particulier, sous l'hypothèse [Hpi], $g^* = g^{\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*}$.

- $(\mathfrak{P}_M)_{M \in \mathcal{M} \subset \mathbb{N}}$ est une suite croissante d'espaces vectoriels de dimension finie d'union dense dans $\mathbf{L}^2([0, 1]^D, \mathbb{R}_+)$ tel que pour tout $M \in \mathcal{M}$, \mathfrak{P}_M est de dimension M . On peut par exemple prendre l'ensemble des fonctions constantes par morceaux sur une partition régulière en $M = 2^k$ morceaux de $[0, 1]^D$, auquel cas $\mathcal{M} = \{2^{kD}, k \in \mathbb{N}\}$. On note également $V_M = \text{Vect}\{v_1 \otimes v_2 \otimes v_3, (v_1, v_2, v_3) \in \mathfrak{P}_M^3\}$.
- \mathcal{F} est un sous-ensemble donné de $\mathbf{L}^2([0, 1]^D, \mathbb{R}_+)$. C'est l'espace dans lequel les densités d'émission seront estimées. Nous supposons toujours satisfaites les deux hypothèses suivantes :
 - [HF] \mathcal{F} est un sous-ensemble fermé borné par $C_{\mathcal{F},2}$ de $\mathbf{L}^2([0, 1]^D, \mathbb{R}_+)$ tel qu'il existe une constante $C_{\mathcal{F},\infty}$ tel que pour tout $f \in \mathcal{F}$, $\int f d\mathcal{L}^D = 1$ et $\|f\|_\infty \leq C_{\mathcal{F},\infty}$, où \mathcal{L}^D désigne la mesure de Lebesgue sur $[0, 1]^D$.
 - [Hproj] $\mathbf{f}^* \in \mathcal{F}^{K^*}$ et \mathcal{F} est stable par projection sur \mathfrak{P}_M pour tout $M \in \mathcal{M}$.²
- Notons \mathcal{Q}_K l'ensemble des matrices de transition irréductible $K \times K$. On pose $S_{K,M}$ (respectivement S_K) l'ensemble des densités de trois observations consécutives générées par un HMM de matrice de transition dans \mathcal{Q}_K et de densités d'émission dans $\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M$ (respectivement dans \mathcal{F}) :

$$S_{K,M} := \{g^{\mathbf{Q},\mathbf{f}}, \mathbf{Q} \in \mathcal{Q}_K, \mathbf{f} \in (\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)^K\}$$

$$S_K := \{g^{\mathbf{Q},\mathbf{f}}, \mathbf{Q} \in \mathcal{Q}_K, \mathbf{f} \in \mathcal{F}^K\}$$

Les $S_{K,M}$ sont les modèles parmi lesquels nous choisirons un estimateur de g^* , avant de sélectionner les meilleurs M et K . Notons que pour tout K, M , $S_{K,M} \subset V_M$, que les suites $(S_{K,M})_{M \in \mathcal{M}}$ sont croissantes car $(\mathfrak{P}_M)_{M \in \mathcal{M}}$ l'est et que les suites $(S_{K,M})_{K \geq 1}$ et $(S_K)_{K \geq 1}$ sont croissantes : un HMM de matrice de transition irréductible à K états cachés peut être vu comme un HMM de matrice de transition irréductible à $K + 1$ états cachés en dédoublant un de ses états.

On définit également pour une matrice $\mathbf{Q} \in \mathcal{Q}_K$ l'ensemble $S(\mathbf{Q}, M)$ des densités de $S_{K,M}$ générées par un HMM de matrice de transition \mathbf{Q} :

$$S(\mathbf{Q}, M) := \{g^{\mathbf{Q},\mathbf{f}}, \mathbf{f} \in (\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)^K\}$$

Ces ensembles serviront de modèles parmi lesquels nous choisirons un estimateur de g^* dans le cas où la matrice \mathbf{Q}^* est déjà estimée par une autre méthode.

Notons enfin $\mathbf{S} = \bigcup_{K \geq 1} S_K$ l'ensemble de toutes les densités possibles. Remarquons

que sous l'hypothèse [Hproj], tous les $S_{K,M}$ sont inclus dans l'espace S_K correspondant et donc dans \mathbf{S} grâce au lemme suivant :

- On note \mathbf{f}_M^* le projeté orthogonal de \mathbf{f}^* sur $(\mathfrak{P}_M)^{K^*}$, $g_{K,M}^*$ un projeté de g^* sur $S_{K,M}$ (au sens qu'il minimise la distance \mathbf{L}^2 à g^*) et $g_M^* = g^{\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}_M^*}$. Remarquons que pour tout $K \geq K^*$, on a $g_M^* \in S_{K,M}$, et donc $g_{K,M}^* = g_M^*$.

2. Cette hypothèse n'est pas présente de manière aussi forte dans l'article [dCGL15], où on suppose seulement que les vraies densités d'émission et leurs projections sur \mathfrak{P}_M sont dans \mathcal{F} pour tout M . Comme ces densités sont inconnues en pratique, il est naturel de généraliser l'hypothèse sous cette forme.

Lemme 1. g_M^* est le projeté orthogonal de g^* sur V_M .

Démonstration. Rappelons que $\mathbf{f}_M^* = ((f_M^*)_1, \dots, (f_M^*)_{K^*})$ est le projeté orthogonal de $\mathbf{f}^* = (f_1^*, \dots, f_{K^*}^*)$ sur $\mathfrak{P}_M^{K^*}$. Ses composantes sont les projetés des composantes de \mathbf{f}^* sur \mathfrak{P}_M . Rappelons également que

$$g^* = \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^{K^*} \pi^*(k_1) \mathbf{Q}^*(k_1, k_2) \mathbf{Q}^*(k_2, k_3) f_{k_1}^* \otimes f_{k_2}^* \otimes f_{k_3}^*$$

$$g_M^* = \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^{K^*} \pi^*(k_1) \mathbf{Q}^*(k_1, k_2) \mathbf{Q}^*(k_2, k_3) (f_M^*)_{k_1} \otimes (f_M^*)_{k_2} \otimes (f_M^*)_{k_3}$$

Par définition, $g_M^* \in V_M$. Par linéarité de la projection orthogonale sur un espace vectoriel, il suffit de montrer que le projeté de $u_1 \otimes u_2 \otimes u_3$ sur V_M pour $(u_1, u_2, u_3) \in \mathcal{F}^3$ est $P_{\mathfrak{P}_M}(u_1) \otimes P_{\mathfrak{P}_M}(u_2) \otimes P_{\mathfrak{P}_M}(u_3)$ où $P_{\mathfrak{P}_M}$ est la projection orthogonale sur \mathfrak{P}_M .

Pour cela, considérons $(u_1, u_2, u_3) \in \mathcal{F}^3$ et (ϕ_1, \dots, ϕ_M) une base orthonormée de \mathfrak{P}_M , que l'on complète en $(\phi_1, \dots, \phi_M, \phi_{M+1}, \phi_{M+2}, \phi_{M+3})$ une base orthonormée de $V' = \text{Vect}(\mathfrak{P}_M, u_1, u_2, u_3)$ (la preuve s'adapte directement au cas où cet espace vectoriel n'est pas de dimension $M+3$). Alors $(\phi_a \otimes \phi_b \otimes \phi_c)_{(a,b,c) \in \{1, \dots, M+3\}^3}$ forme une base orthonormée de $\text{Vect}\{v_1 \otimes v_2 \otimes v_3, (v_1, v_2, v_3) \in V'^3\}$, sur laquelle on peut décomposer $u_1 \otimes u_2 \otimes u_3$ et son projeté orthogonal sur V_M , en remarquant que $(\phi_a \otimes \phi_b \otimes \phi_c)_{(a,b,c) \in \{1, \dots, M\}^3}$ forme une base orthonormée de V_M :

$$\begin{cases} u_1 \otimes u_2 \otimes u_3 = \sum_{a,b,c=1}^{M+3} \lambda_a^1 \lambda_b^2 \lambda_c^3 \phi_a \otimes \phi_b \otimes \phi_c \\ P_{V_M}(u_1 \otimes u_2 \otimes u_3) = \sum_{a,b,c=1}^M \mu_{a,b,c} \phi_a \otimes \phi_b \otimes \phi_c \end{cases}$$

en posant $u_i = \sum_{a=1}^{M+3} \lambda_a^i \phi_a$ pour tout $i \in \{1, 2, 3\}$. Notons qu'alors $P_{\mathfrak{P}_M}(u_i) = \sum_{a=1}^M \lambda_a^i \phi_a$.

On en déduit que pour tout $(a, b, c) \in \{1, \dots, M\}^3$, $\mu_{a,b,c} = \lambda_a^1 \lambda_b^2 \lambda_c^3$, autrement dit que $P_{V_M}(u_1 \otimes u_2 \otimes u_3) = P_{\mathfrak{P}_M}(u_1) \otimes P_{\mathfrak{P}_M}(u_2) \otimes P_{\mathfrak{P}_M}(u_3)$. \square

Nous estimerons g^* à l'aide d'une méthode de moindres carrés pénalisés. L'objectif de cette méthode est de minimiser la distance \mathbf{L}^2 entre g^* et son estimateur, ce qui est équivalent à minimiser la perte $t \mapsto \|t - g^*\|_2^2 - \|g^*\|_2^2 = \|t\|_2^2 - 2 \int t g^*$. On va donc chercher à minimiser la perte empirique associée :

$$\gamma_N(t) = \|t\|_2^2 - \frac{2}{N} \sum_{s=1}^N t(Z_s)$$

avec $(Z_s)_{s=1}^N = (Y_1^{(s)}, Y_2^{(s)}, Y_3^{(s)})_{s=1}^N$ (scénario A) ou $(Z_s)_{s=1}^N = (Y_s, Y_{s+1}, Y_{s+2})$ (scénario B). Tout l'enjeu de la preuve sera de contrôler l'écart entre la perte et la perte empirique.

Dans le scénario A, on dispose de N HMM i.i.d. $((X_k^{(s)}, Y_k^{(s)})_{k \geq 1})_{s=1}^N$ pour lesquelles on prend à chaque fois les trois premières observations.

Dans le scénario B, on ne dispose que d'un seul HMM de longueur $N + 2$, et on considère tous les triplets de trois observations consécutives.

Le scénario B semble plus intéressant pour les applications pratiques, car il n'est pas évident de disposer d'un grand nombre de réalisations i.i.d. du HMM que l'on cherche à estimer. Un autre avantage est la faible dépendance en la mesure initiale. En effet, sous l'hypothèse **[Hirréd]**, la loi de X_k converge vers la mesure stationnaire de la chaîne cachée lorsque k tend vers l'infini. L'hypothèse **[Hpi]** perd alors de son importance car une modification de la loi initiale n'a que peu d'effet dès lors que le nombre d'observations devient grand.

Dans les deux scénarios, la perte empirique $\gamma_N(t)$ converge presque sûrement vers la vraie perte $\|t - g^*\|_2^2 - \|g^*\|_2^2$. Il est donc naturel de prendre comme estimateur de g^* la fonction t qui minimise la perte empirique dans un modèle S à préciser. Cette approche nous permet de construire une famille d'estimateurs $\hat{g}_{K,M}$ minimisant la perte empirique dans les modèles $S_{K,M}$. Il reste alors à sélectionner le "meilleur" au sens qu'il minimise la quantité $\gamma_N(\hat{g}_{K,M}) + \text{pen}(N, M, K)$ pour une pénalité à préciser.

On peut déjà remarquer une dichotomie selon que le nombre d'états cachés de la chaîne est connu ou inconnu.

Le fait de connaître le nombre d'états cachés permet d'utiliser des estimateurs de la matrice de transition, par exemple l'estimateur spectral, pour lequel on dispose de garanties concernant la vitesse de convergence. Cette approche allège grandement l'implémentation de l'estimation puisqu'il ne reste plus qu'à estimer les densités d'émission.

Dans le cas où le nombre d'états cachés est inconnu, il est impossible d'utiliser un estimateur de la matrice de transition à cause des problèmes d'identifiabilité du modèle. En effet, un tel estimateur ne pourra converger que si le nombre d'états cachés sur lequel il travaille correspond au vrai nombre d'états cachés, ce qui n'est pas le cas la plupart du temps. Il est donc nécessaire d'estimer simultanément la matrice de transition et les densités d'émission.

2.1 Enoncé des théorèmes de convergence

2.1.1 Nombre d'états cachés connu

On suppose qu'on a accès à un estimateur $\hat{\mathbf{Q}}$ de \mathbf{Q}^* , par exemple l'estimateur spectral de [HKZ12]. On note $\hat{\pi}$ sa mesure invariante.

On construit pour chaque M, N , l'estimateur

$$\hat{g}_M = \underset{t \in S(\hat{\mathbf{Q}}, M)}{\text{argmin}} \gamma_N(t)$$

correspondant au meilleur HMM de matrice de transition $\hat{\mathbf{Q}}$ (on ne notera pas la dépendance en N des estimateurs de g^* pour alléger les notations), puis on sélectionne

$$\hat{M} = \underset{M \leq N}{\text{argmin}} \{\gamma_N(\hat{g}_M) + \text{pen}(N, M)\}$$

et on pose $\hat{g} = \hat{g}_{\hat{M}}$.

Le théorème suivant, repris de [dCGL15], fournit une borne oracle sur cet estimateur :

Théorème 1 (Borne oracle, K^* connu). *Il existe des constantes positives ρ^* , A_1 et N_0 dépendant de $C_{\mathcal{F},2}$, $C_{\mathcal{F},\infty}$ (et \mathbf{Q}^* dans le scénario B) telles que, si*

$$\text{pen}(N, M) \geq \rho^* \frac{M \log N}{N}$$

alors pour tout $x > 0$, pour tout $N \geq N_0$, on a avec probabilité $1 - (e - 1)^{-1}e^{-x}$:

$$\begin{aligned} \|\hat{g} - g^*\|_2^2 \leq & 6 \inf_M \{ \|g^* - g_M^*\|_2^2 + \text{pen}(N, M) \} + A_1 \frac{x}{N} \\ & + 18K^* C_{\mathcal{F},2}^6 \inf_{\tau \in \mathfrak{S}_{K^*}} (2\|\mathbf{Q}^* - \mathbb{P}_\tau \hat{\mathbf{Q}}_N \mathbb{P}_\tau^\top\|_F^2 + \|\pi^* - \mathbb{P}_\tau \hat{\pi}\|_2^2) \end{aligned}$$

où \mathfrak{S}_{K^*} est l'ensemble des permutations de $\{1, \dots, K^*\}$, \mathbb{P}_τ est la matrice de permutation associée à τ et $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius.

Remarque Cette pénalité est minimale au terme $\log(N)$ près. En effet, le modèle a alors $K^*(K^* - 1) + MK^*$ degrés de liberté, ce qui correspond à une pénalité minimale d'ordre M/N .

Il est alors possible d'obtenir une borne oracle sur l'erreur d'estimation des densités d'émission \mathbf{f}^* . En effet, une hypothèse générique (introduite dans [dCGL15]) assure que l'erreur sur les densités d'émission est contrôlée par l'erreur sur la densité de trois observations consécutives, ce qui permet d'obtenir une borne oracle similaire à celle du théorème 1 pour les densités d'émission.

En combinant ce résultat à un contrôle de l'erreur de l'estimateur spectral, [dCGL15] montre que choisir la méthode spectrale pour estimer la matrice de transition garantit une convergence à vitesse minimax à un facteur en puissance de $\log(N)$ près des estimateurs des densités d'émission.

2.1.2 Nombre d'états cachés inconnu

On définit pour tout $K \geq 1$, $M \in \mathcal{M}$ l'estimateur

$$\hat{g}_{K,M} \in \arg \min_{t \in \mathcal{S}_{K,M}} \gamma_N(t)$$

puis on sélectionne les "meilleurs" M et K au sens de la perte empirique pénalisée :

$$(\hat{K}, \hat{M}) \in \arg \min_{K \leq \log(N), M \leq N} (\gamma_N(\hat{g}_{K,M}) + \text{pen}(N, M, K))$$

Pour que les résultats soient significatifs, il est naturel de prendre N beaucoup plus grand que K , d'où l'introduction d'une contrainte supplémentaire : nous chercherons le minimiseur parmi les K inférieurs à $\rho(N)$ pour une certaine fonction seuil ρ . Dans la suite, on aura besoin de $\rho(N) \leq \log(N)$.

On veut savoir deux choses :

- L'estimateur de K^* ainsi défini est-il consistant ?
- A-t-on toujours une inégalité oracle ?

Théorème 2 (Consistance de \hat{K}). *Supposons \mathcal{F} compact.*

Soit $(u_{N,M})_{N \geq 1, M \geq 1}$ une suite de réels telle que

$$\inf_{M \leq N} u_{N,M} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} +\infty$$

Supposons que la pénalité vérifie

$$\begin{cases} \forall M, K, N \geq 1, & \text{pen}(N, M, K) = u_{N,M}(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N} \\ \forall M, K, & \text{pen}(N, M, K) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} 0 \end{cases}$$

Alors l'estimateur \hat{K}_N est fortement consistant, c'est-à-dire

$$p.s. \quad \hat{K}_N \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} K^*$$

Démonstration. Voir section 2.3. □

L'estimateur de K^* est donc fortement consistant à condition de multiplier la pénalité "de base" par un facteur divergent. Notons toutefois qu'il est possible de remplacer ce facteur divergent par une constante suffisamment grande si on dispose d'une borne a priori sur K^* .

Le théorème 1 devient :

Théorème 3 (Borne oracle, K^* inconnu, K estimé). *Il existe des constantes N_0, ρ^* et A dépendant de $C_{\mathcal{F},2}, C_{\mathcal{F},\infty}, \mathbf{Q}^*$ telles que si*

$$\forall N, M, K, \quad \text{pen}(N, M, K) \geq \rho^*(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N}$$

alors pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, on a avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$:

$$\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 \leq 4 \inf_{K \leq \log(N), M \leq N} \{\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + \text{pen}(N, M, K)\} + 4A \frac{x}{N}$$

Démonstration. Voir section 2.2. □

Ce théorème n'utilise pas et n'implique pas la consistance de l'estimateur \hat{K}_N , et il n'a donc pas été nécessaire de modifier la pénalité.

Remarques

- Cette pénalité n'est pas minimale : elle est d'ordre $MK + K^2 - 1$ alors que le nombre de paramètres continus du modèle $S_{K,M}$ est $MK + K(K - 1)$.
- Le résultat de [dCGL15] reliant l'erreur sur \mathbf{f}^* à l'erreur sur g^* ne peut s'appliquer directement dans ce cas puisqu'elle nécessite de connaître K^* . Toutefois, conditionnellement à l'évènement $\hat{K} = K^*$, tous les résultats de la partie K^* connu s'appliquent.

2.2 Preuve de la borne oracle avec sélection du nombre d'états cachés

La preuve dans le cas K^* connu est détaillée dans [dCGL15]. Nous l'adaptions dans le cas K^* inconnu.

Observons tout d'abord que la perte empirique peut se réécrire en faisant apparaître un processus empirique centré qui décrit la différence entre la perte empirique et la perte théorique :

$$\gamma_N(t) = \|t - g^*\|_2^2 - \|g^*\|_2^2 - 2\nu(t) \quad (1)$$

avec

$$\begin{aligned} \nu(t) &:= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N t(Z_s) - \int t g^* \\ &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N t(Z_s) - \mathbb{E}[t] \end{aligned}$$

Le coeur de la preuve sera de contrôler ce processus.

Soit $K \leq \log N$ et $M \leq N$. Alors :

$$\begin{aligned} \gamma_N(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}}) + \text{pen}(N, \hat{M}, \hat{K}) &\leq \gamma_N(\hat{g}_{K, M}) + \text{pen}(N, M, K) && \text{par définition de } (\hat{K}, \hat{M}) \\ &\leq \gamma_N(g_{K, M}^*) + \text{pen}(N, M, K) && \text{par définition de } \hat{g}_{K, M} \end{aligned}$$

D'où

$$\gamma_N(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}}) - \gamma_N(g_{K, M}^*) \leq \text{pen}(N, M, K) - \text{pen}(N, \hat{M}, \hat{K})$$

Or

$$\gamma_N(t_1) - \gamma_N(t_2) = \|t_1 - g^*\|_2^2 - \|t_2 - g^*\|_2^2 - 2\nu(t_1 - t_2)$$

D'où

$$\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 \leq \|g_{K, M}^* - g^*\|_2^2 + \text{pen}(N, M, K) - \text{pen}(N, \hat{M}, \hat{K}) + 2\nu(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g_{K, M}^*) \quad (2)$$

L'objectif est maintenant de contrôler le terme en ν . Par linéarité,

$$\nu(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g_{K, M}^*) = \nu(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*) + \nu(g^* - g_{K, M}^*)$$

Introduisons les applications

$$\begin{aligned} s = (s_{K, M})_{K \in \mathbf{N}^*, M \in \mathcal{M}} \in \mathbf{S}^{\mathbf{N}^* \times \mathcal{M}} &\longmapsto \\ (Z_{K, M}(s))_{K \in \mathbf{N}^*, M \in \mathcal{M}} &:= \left(\sup_{t \in S_{K, M}} \left[\frac{|\nu(t - s_{K, M})|}{\|t - s_{K, M}\|_2^2 + x_{K, M}^2} \right] \right)_{K \in \mathbf{N}^*, M \in \mathcal{M}} \end{aligned}$$

où les réels $x_{K, M}$ seront à préciser. Le lemme suivant est fondamental et utilise de manière extensive l'hypothèse **[HF]** :

Lemme 2 (Contrôle des $Z_{K,M}(s)$). *Il existe une suite $(x_{K,M})_{K \in \mathbb{N}^*, M \in \mathcal{M}}$, des constantes ρ^* , A , N_0 telles si $\widetilde{\text{pen}}$ vérifie*

$$\forall N, M, K, \quad \widetilde{\text{pen}}(N, M, K) \geq \rho^*(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N}$$

alors pour tout $s \in \mathbf{S}^{\mathbb{N}^* \times \mathcal{M}}$, pour tout $N \geq N_0$, $x > 0$, on a avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$:

$$\begin{cases} \sup_{K' \leq \log(N), M' \leq N} Z_{K',M'}(s) \leq \frac{1}{4} \\ \sup_{K' \leq \log(N), M' \leq N} (2Z_{K',M'}(s)x_{K',M'}^2 - \widetilde{\text{pen}}(N, M', K')) \leq A \frac{x}{N} \end{cases}$$

Notons qu'il n'est pas nécessaire que $s_{K,M} \in S_{K,M}$. Nous appliquerons principalement ce lemme à la suite constante $(g^*)_{K' \in \mathbb{N}^*, M' \in \mathcal{M}}$, et nous noterons alors $Z_{K,M}(g^*)$ au lieu de $Z_{K,M}((g^*)_{K' \in \mathbb{N}^*, M' \in \mathcal{M}})$.

On obtient alors les inégalités :

$$\begin{cases} |\nu(\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*)| \leq Z_{\hat{K}, \hat{M}}(g^*)(\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 + x_{\hat{K}, \hat{M}}^2) \\ |\nu(g_{K,M}^* - g^*)| \leq Z_{K,M}(g^*)(\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + x_{K,M}^2) \end{cases}$$

d'où en reprenant (2)

$$\begin{aligned} \|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 &\leq \|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + 2\text{pen}(N, M, K) \\ &\quad + 2Z_{\hat{K}, \hat{M}}(g^*)\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 + 2Z_{K,M}(g^*)\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 \\ &\quad + 2Z_{\hat{K}, \hat{M}}(g^*)x_{\hat{K}, \hat{M}}^2 - \text{pen}(N, \hat{M}, \hat{K}) + 2Z_{K,M}(g^*)x_{K,M}^2 - \text{pen}(N, M, K) \end{aligned}$$

Supposons que $\text{pen}(N, M, K) \geq \rho^*(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N}$. Le lemme 2 s'applique et assure que pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$, pour tout M, K :

$$\begin{aligned} \|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 &\leq \|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + 2\text{pen}(N, M, K) \\ &\quad + \frac{1}{2}\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 + \frac{1}{2}\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + 2A \frac{x}{N} \end{aligned}$$

autrement dit pour tout M, K ,

$$\frac{1}{2}\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 \leq \frac{3}{2}\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + 2\text{pen}(N, M, K) + 2A \frac{x}{N}$$

et donc

$$\|\hat{g}_{\hat{K}, \hat{M}} - g^*\|_2^2 \leq 4 \inf_{K \leq \log(N), M \leq N} \{\|g_{K,M}^* - g^*\|_2^2 + \text{pen}(N, M, K)\} + 4A \frac{x}{N}$$

ce qui conclut la preuve.

2.3 Preuve de la consistance de l'estimateur du nombre d'états cachés

Dans un premier temps, nous contrôlerons la probabilité de sélectionner un mauvais K . Une application directe du lemme de Borel-Cantelli sera alors suffisante pour obtenir la consistance forte de \hat{K} .

La définition de \hat{K} est équivalente à la suivante :

$$\hat{K} \in \arg \min_{K \leq \log(N)} \{\gamma_N(\hat{g}_K) + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K)\}$$

où on pose

$$\hat{M}_K \in \arg \min_{M \leq N} \{\gamma_N(\hat{g}_{M,K}) + \text{pen}(N, M, K)\}$$

Le fait de choisir K signifie donc en particulier que K est meilleur que K^* , c'est-à-dire :

$$\{\hat{K} = K\} \subset \left\{ \inf_M \{\gamma_N(\hat{g}_{K,M}) + \text{pen}(N, M, K)\} - \inf_M \{\gamma_N(\hat{g}_{K^*,M}) + \text{pen}(N, M, K^*)\} \leq 0 \right\}$$

Notons

$$\begin{aligned} \Delta_{N,K} &:= \inf_M \{\gamma_N(\hat{g}_{K,M}) + \text{pen}(N, M, K)\} - \inf_M \{\gamma_N(\hat{g}_{K^*,M}) + \text{pen}(N, M, K^*)\} \\ &= \gamma_N(\hat{g}_{K,\hat{M}_K}) + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \inf_M \left\{ \inf_{t \in S_{K^*,M}} \gamma_N(t) + \text{pen}(N, M, K^*) \right\} \end{aligned}$$

Alors

$$\{\hat{K} = K\} \subset \{\Delta_{N,K} \leq 0\}$$

Il s'agit donc de montrer que p.s. $\Delta_{N,K} > 0$ à partir d'un certain rang dès que $K \neq K^*$. Nous aurons à distinguer deux cas selon que K est inférieur ou supérieur à K^* . Dans le premier cas, l'estimateur \hat{g} ne peut converger vers g^* . Dans le second, il faudra montrer que la pénalité est suffisamment grande pour compenser le gain sur la perte empirique dû à l'agrandissement du modèle.

2.3.1 Cas $K < K^*$

Fixons $M_0 \in \mathbb{N}$. Alors en utilisant la définition de ν (équation (1)) et le fait que $g_{M_0}^* \in S_{K^*,M_0}$:

$$\begin{aligned} \Delta_{N,K} &\geq \gamma_N(\hat{g}_{K,\hat{M}_K}) + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \gamma_N(g_{M_0}^*) - \text{pen}(N, M_0, K^*) \\ &\geq \|g^* - \hat{g}_{K,\hat{M}_K}\|_2^2 - \|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 - 2\nu(\hat{g}_{K,\hat{M}_K} - g_{M_0}^*) + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \text{pen}(N, M_0, K^*) \end{aligned}$$

Nous pouvons alors contrôler le terme en ν comme dans la section 2.2, en utilisant que $g_{M_0}^* = g_{K^*,M_0}^* \in S_{K^*,M_0}$:

$$\begin{aligned} |\nu(\hat{g}_{K,\hat{M}_K} - g_{M_0}^*)| &\leq |\nu(\hat{g}_{K,\hat{M}_K} - g^*)| + |\nu(g^* - g_{M_0}^*)| \\ &\leq Z_{K,\hat{M}_K}(g^*) (\|g^* - \hat{g}_{K,\hat{M}_K}\|_2^2 + x_{K,\hat{M}_K}^2) \\ &\quad + Z_{K^*,M_0}(g^*) (\|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 + x_{K^*,M_0}^2) \end{aligned}$$

Utilisons le lemme 2 avec la fonction $\widetilde{\text{pen}}(N, M, K) = \rho^*(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N}$. Pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$, pour tout $K \leq \log(N)$:

$$\begin{aligned} |\nu(\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{M_0}^*)| &\leq \frac{1}{4} \|g^* - \hat{g}_{K, \hat{M}_K}\|_2^2 + \frac{1}{2} A \frac{x}{N} + \frac{1}{2} \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \\ &\quad + \frac{1}{4} \|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 + \frac{1}{2} A \frac{x}{N} + \frac{1}{2} \widetilde{\text{pen}}(N, M_0, K^*) \end{aligned}$$

D'où pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$, pour tout $K \leq \log(N)$:

$$\begin{aligned} \Delta_{N, K} &\geq \frac{1}{2} \|g^* - \hat{g}_{K, \hat{M}_K}\|_2^2 - \frac{3}{2} \|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 - 2A \frac{x}{N} \\ &\quad + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \text{pen}(N, M_0, K^*) - \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) - \widetilde{\text{pen}}(N, M_0, K^*) \end{aligned}$$

Supposons $\text{pen} \geq \widetilde{\text{pen}}$. Alors pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, avec probabilité $1 - (e - 1)^{-2}e^{-x}$, pour tout $K \leq \log(N)$:

$$\Delta_{N, K} \geq \frac{1}{2} \|g^* - \hat{g}_{K, \hat{M}_K}\|_2^2 - \frac{3}{2} \|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 - 2A \frac{x}{N} - 2\text{pen}(N, M_0, K^*) \quad (3)$$

Le lemme suivant découle de l'identifiabilité du modèle :

Lemme 3. *Supposons \mathcal{F} compact. Alors pour tout $K < K^*$:*

$$d_K := \inf_{t \in S_K} \|t - g^*\|_2 > 0$$

Démonstration. Cette preuve repose sur les outils d'estimation spectrale introduits en section 3.

Raisonnons par l'absurde. Supposons que $d_K = 0$. Alors $g^* \in \overline{S_K}$. Remarquons que, en notant

$$g^{\pi, \mathbf{Q}, \mathbf{f}} = \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^K \pi(k_1) \mathbf{Q}(k_1, k_2) \mathbf{Q}(k_2, k_3) f_{k_1}(y_1) f_{k_2}(y_2) f_{k_3}(y_3)$$

on a

$$S_K \subset \{g^{\pi, \mathbf{Q}, \mathbf{f}} \mid \pi \in B_{\mathbb{R}^K}(0, 1), \quad \mathbf{Q} \in B_{\mathbb{R}^{K \times K}}(0, 1), \quad \mathbf{f} \in \mathcal{F}^K\}$$

Remarquons également que l'application $(\pi, \mathbf{Q}, \mathbf{f}) \mapsto g^{\pi, \mathbf{Q}, \mathbf{f}}$ est continue et que $\mathcal{F}^K \times B_{\mathbb{R}^K}(0, 1) \times B_{\mathbb{R}^{K \times K}}(0, 1)$ est compact.

On en déduit que $g^* = g^{\pi_0, \mathbf{Q}_0, \mathbf{f}_0}$ pour un certain triplet $(\pi_0, \mathbf{Q}_0, \mathbf{f}_0)$.

Reprenons les formules de la section 3. Le lemme 8 s'applique à ce triplet et assure que pour tout $M \in \mathcal{M}$:

$$\mathbf{N}_M = (\mathbf{O}_M)_0 \text{Diag}(\pi_0) \mathbf{Q}_0 (\mathbf{O}_M)_0^\top$$

où la matrice $(\mathbf{O}_M)_0$ est associée à la famille \mathbf{f}_0 . Or cette matrice est de rang au plus K , et on sait que sous les hypothèses faites en introduction, elle est de rang K^* pour M assez grand (voir la remarque suivant le lemme 8). Cette contradiction permet de conclure. \square

On choisit maintenant $x = 2 \log(N)$. On en déduit que pour tout $N \geq N_0$, avec probabilité $1 - \frac{1}{N^2(e-1)^2}$, pour tout $K \leq \log(N)$:

$$\Delta_{N,K} \geq \frac{d_K^2}{2} - 2\|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 - 4A \frac{\log(N)}{N} - 2\text{pen}(N, M_0, K^*)$$

La seconde condition sur la pénalité du théorème 2 et le lemme de Borel-Cantelli assurent alors que p.s., à partir d'un certain rang, pour tout $K \leq \log(N)$,

$$\Delta_{N,K} \geq \frac{d_K^2}{4} - 2\|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2$$

et donc pour peu que $\|g^* - g_{M_0}^*\|_2^2 \leq \inf_{K < K^*} \frac{d_K^2}{16}$, on a p.s., à partir d'un certain rang, $\hat{K} \geq K^*$.

2.3.2 Cas $K > K^*$ (et $K \leq \log(N)$)

Remarquons que pour tout $K \geq K^*$,

$$\Delta_{N,K} \geq \gamma_N(\hat{g}_{K, \hat{M}_K}) + \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \gamma_N(g_{\hat{M}_K}^*) - \text{pen}(N, \hat{M}_K, K^*)$$

car $g_{\hat{M}_K}^* \in S_{K^*, \hat{M}_K} \subset S_{K, \hat{M}_K}$. Or

$$\gamma_N(\hat{g}_{K, \hat{M}_K}) - \gamma_N(g_{\hat{M}_K}^*) = \|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g^*\|_2^2 - \|g_{\hat{M}_K}^* - g^*\|_2^2 - 2\nu(\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*)$$

$g_{\hat{M}_K}^*$ est le projeté orthogonal de g^* sur $V_{\hat{M}_K}$ et $\hat{g}_{K, \hat{M}_K} \in S_{K, \hat{M}_K} \subset V_{\hat{M}_K}$ donc par le théorème de Pythagore $\|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g^*\|_2^2 - \|g_{\hat{M}_K}^* - g^*\|_2^2 = \|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*\|_2^2$.

La définition de $Z_{K, M}((g_{K', M'}^*)_{K', M'})$ puis le lemme 2 (appliqué à la fonction $\widetilde{\text{pen}}(N, M, K) = \rho^*(MK + K^2 - 1) \frac{\log(N)}{N}$) assurent que pour tout $N \geq N_0$, pour tout $x > 0$, avec probabilité $1 - (e-1)^{-2}e^{-x}$, pour tout $K \leq \log(N)$ tel que $K \geq K^*$:

$$\begin{aligned} |\nu(\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*)| &\leq Z_{K, \hat{M}_K}((g_{K', M'}^*)_{K', M'}) \|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*\|_2^2 + Z_{K, \hat{M}_K}((g_{K', M'}^*)_{K', M'}) x_{K, \hat{M}_K}^2 \\ &\leq \frac{1}{4} \|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*\|_2^2 + \frac{1}{2} A \frac{x}{N} + \frac{1}{2} \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \end{aligned}$$

ce qui implique :

$$\begin{aligned} \gamma_N(\hat{g}_{K, \hat{M}_K}) - \gamma_N(g_{\hat{M}_K}^*) &\geq \frac{1}{2} \|\hat{g}_{K, \hat{M}_K} - g_{\hat{M}_K}^*\|_2^2 - A \frac{x}{N} - \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \\ &\geq -A \frac{x}{N} - \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \end{aligned}$$

et donc pour tout $x > 0$, $N \geq N_0$, avec probabilité $1 - (e-1)^{-2}e^{-x}$, pour tout $K \leq \log(N)$ tel que $K \geq K^*$:

$$\Delta_{N,K} \geq \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \text{pen}(N, \hat{M}_K, K^*) - \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) - A \frac{x}{N}$$

Prenons maintenant $x = 2 \log(N)$ (donc $A \frac{x}{N} \leq \frac{2A}{\rho^*} \widetilde{\text{pen}}(N, M, K)$ pour tout M, K) et pen satisfaisant les hypothèses du théorème 2, de sorte qu'il existe $N_1 \geq N_0$ ne dépendant que de $u, K^*, C_{\mathcal{F},2}, C_{\mathcal{F},\infty}$ et \mathbf{Q}^* telle que pour tout $N \geq N_1$ et pour tout K tel que $K^* < K \leq \log(N)$:

$$\begin{aligned} \text{pen}(N, \hat{M}_K, K) - \text{pen}(N, \hat{M}_K, K^*) &= \frac{1}{\rho^*} \left(1 - \left(\frac{K^*}{K} \right)^3 \right) u_{N, \hat{M}_K} \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \\ &\geq \frac{1}{\rho^*} \left(1 - \left(\frac{K^*}{1 + K^*} \right)^3 \right) u_{N, \hat{M}_K} \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \\ &\geq \left(2 + \frac{2A}{\rho^*} \right) \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \end{aligned}$$

et donc pour tout $N \geq N_1$, pour tout K tel que $K^* < K \leq \log(N)$, avec probabilité $1 - \frac{1}{N^2(e-1)^2}$:

$$\begin{aligned} \Delta_{N,K} &\geq \left(2 + \frac{2A}{\rho^*} \right) \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) - \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) - A \frac{x}{N} \\ &\geq \widetilde{\text{pen}}(N, \hat{M}_K, K) \\ &> 0 \end{aligned}$$

d'où pour tout $N \geq N_1$, avec probabilité $1 - \frac{1}{N^2(e-1)^2}$:

$$\forall K \text{ tel que } K^* < K \leq \log(N), \quad \Delta_{N,K} > 0$$

Le lemme de Borel-Cantelli s'applique et assure que p.s., à partir d'un certain rang, $\hat{K} \leq K^*$, ce qui conclut la preuve du théorème 2.

Remarque : L'hypothèse sur la divergence de la suite u n'est nécessaire que si on ne dispose pas d'une borne a priori sur K^* . Si on connaît K_0 tel que $K^* \leq K_0$, il suffit de prendre $u_{N,M}$ supérieur à $\frac{2(\rho^*+A)}{1 - \left(\frac{K_0}{1+K_0}\right)^3}$ pour obtenir la consistance forte de \hat{K} .

2.4 Preuve du lemme de contrôle des $Z_{K,M}(s)$ (lemme 2)

L'essentiel de cette preuve est identique à celle de [dCGL15]. Nous avons toutefois fait apparaître la dépendance en K des quantités considérées pour pouvoir généraliser les résultats de l'article au cas K^* inconnu.

Pour contrôler $Z_{K,M}(s)$, nous allons faire appel à un lemme d'épluchage. Pour cela, nous aurons besoin d'une inégalité de concentration portant sur le supremum de $|\nu(t - s_M)|$ pour t dans certaines classes de fonctions à préciser. Ces outils sont repris de [Mas07]. L'essentiel du travail et la seule différence par rapport à [dCGL15] sera de contrôler l'entropie à crochets de ces classes fonctionnelles en prenant en compte la dépendance en K . C'est de là que viendra l'expression de la pénalité.

2.4.1 Inégalité de concentration pour $Z_{K,M}(s)$

Introduisons les ensembles

$$B_\sigma = \{t \in S_{K,M}, C_{\mathcal{F},\infty}^3 \|t - s_M\|_2 \leq \sigma\}$$

Notons d_{g^*} la semi-distance définie par $d_{g^*}^2(t_1, t_2) = \mathbb{E}[(t_1 - t_2)^2(Z_1)] = \int g^*(t_1 - t_2)^2$, et d_2 la distance issue de la norme 2 de $\mathbf{L}^2([0, 1]^D, \mathbb{R})$.

On note $N(\epsilon, A, d) = e^{H(\epsilon, A, d)}$ le plus petit cardinal d'un recouvrement par crochets de taille ϵ pour la semi-distance d de A , où on appelle crochet de taille ϵ pour la semi-distance d un ensemble $[t_1, t_2] = \{t, t_1(\cdot) \leq t(\cdot) \leq t_2(\cdot)\}$ tel que $d(t_1, t_2) \leq \epsilon$. On appelle $H(\cdot, A, d)$ l'entropie à crochets de A pour la semi-distance d .

Le lemme suivant est adapté de la proposition 7 de [dCGL15] :

Lemme 4. *Il existe une constante C^* ne dépendant que de \mathbf{Q}^* telle que pour tout $\sigma > 0$, pour tout ensemble mesurable A tel que $\mathbb{P}(A) > 0$:*

$$\mathbb{E}^A(\sup_{t \in B_\sigma} |\nu(t - s_M)|) \leq C^* \left[\frac{E}{N} + \sigma \sqrt{\frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right)} + \frac{2C_{\mathcal{F},\infty}^3}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right) \right]$$

avec $\mathbb{E}^A(Z)$ l'espérance de la variable aléatoire Z conditionnée à l'évènement A et

$$E = \sqrt{N} \int_0^\sigma \sqrt{H(u, B_\sigma - s_M, d_{g^*})} \wedge N du + 2C_{\mathcal{F},\infty}^3 (1 + C_{\mathcal{F},2}^3) H(\sigma, B_\sigma - s_M, d_{g^*})$$

Démonstration. La seule différence par rapport à la proposition 7 de [dCGL15] est l'ensemble sur lequel on considère le supremum. En effet, la formulation d'origine suppose que cet ensemble est dénombrable, ce qui n'est pas forcément le cas de B_σ .

Commençons par remarquer que l'application

$$\nu : \begin{cases} (\mathbf{L}^\infty([0, 1]^D, \mathbb{R}), \|\cdot\|_\infty) \mapsto \mathbb{R} \\ t \mapsto \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N t(Z_s) - \mathbb{E}[t] \end{cases}$$

est continue. Cela signifie que si l'on dispose d'une suite dénombrable dense pour la norme infinie dans $(B_\sigma - s_M)$ (ce qui est équivalent à en avoir une dans B_σ), alors le lemme sera prouvé.

Considérons une base $(\phi_a)_{a \in \{1, \dots, A\}}$ de $\text{Vect}(\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)$ tel que chaque ϕ_a soit dans \mathcal{F} . Alors on a directement

$$B_\sigma \subset \text{Vect}(\{\phi_a \otimes \phi_b \otimes \phi_c, \quad a, b, c \in \{1, \dots, A\}\})$$

L'hypothèse [HF] assure que la norme infinie est une norme sur cet espace vectoriel de dimension finie. Il est donc séparable, donc B_σ l'est également, ce qui conclut la preuve. \square

Le coeur de la preuve consiste à contrôler l'entropie à crochets pour trouver une "bonne" fonction φ telle que $x \mapsto \frac{\varphi(x)}{x}$ soit décroissante, un $\sigma_{K,M}$ et une constante C dépendant de $C_{\mathcal{F},2}$ et $C_{\mathcal{F},\infty}$ tels que

$$\forall \sigma \geq \sigma_{K,M} \quad E \leq C \varphi(\sigma) \sqrt{N} \quad (4)$$

Le lemme suivant est repris du lemme d'épluchage 4.23 de [Mas07]

Lemme 5. Soit S un ensemble dénombrable de fonctions mesurables réelles, $u \in S$, $a : S \mapsto \mathbb{R}_+$ telle que $a(u) = \inf_{t \in S} a(t)$, Z un processus indexé par S tel que la variable aléatoire $\sup_{t \in \mathbf{B}(\lambda)} [Z(t) - Z(u)]$ est intégrable pour tout $\lambda \geq 0$, où

$$\mathbf{B}(\lambda) = \{t \in S, a(t) \leq \lambda\}$$

Alors pour toute fonction ϕ définie sur \mathbb{R}_+ telle que $x \mapsto \phi(x)/x$ est décroissante sur \mathbb{R}_+ et vérifie pour une constante λ_* :

$$\forall \lambda \geq \lambda_* \geq 0, \quad \mathbb{E} \left[\sup_{t \in \mathbf{B}(\lambda)} [Z(t) - Z(u)] \right] \leq \phi(\lambda)$$

on a pour tout $x \geq \lambda_*$:

$$\mathbb{E} \left[\sup_{t \in S} \left[\frac{Z(t) - Z(u)}{a(t)^2 + x^2} \right] \right] \leq 4 \frac{\phi(x)}{x^2}$$

Ici,

$$\begin{cases} S = S_{K,M} - s_M \\ u = s_M \\ a(t) = C_{\mathcal{F},\infty}^3 \|t - s_M\|_2 \\ Z(t) = |\nu(t - s_M)| \\ \lambda_* = \sigma_{K,M} \\ \phi(x) = C^* \left[C \frac{\varphi(x)}{\sqrt{N}} + x \sqrt{\frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right)} + \frac{2C_{\mathcal{F},\infty}^3}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right) \right] \end{cases}$$

On peut appliquer cette proposition même si l'ensemble S utilisé n'est pas dénombrable pour la même raison que dans le lemme 4.

On a donc pour tout $x \geq \sigma_{K,M}$:

$$\mathbb{E}^A \left[\sup_{t \in S_{K,M}} \frac{|\nu(t - s_M)|}{C_{\mathcal{F},\infty}^3 \|t - s_M\|_2 + x^2} \right] \leq 4 \frac{\phi(x)}{x^2}$$

et donc pourvu que $x_{K,M} \geq \frac{\sigma_{K,M}}{C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}}$:

$$\mathbb{E}^A [Z_{K,M}(s)] \leq 4 \frac{\phi(x_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2})}{x_{K,M}^2}$$

Il en découle que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^A [Z_{K,M}(s)] &\leq 4 \frac{C^*}{x_{K,M}^2} \left[C \frac{\varphi(x_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2})}{\sqrt{N}} + x_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} \sqrt{\frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right)} + \frac{2C_{\mathcal{F},\infty}^3}{N} \log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right) \right] \\ &=: \psi \left(\log \left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)} \right) \right) \end{aligned}$$

Notons que la fonction ψ ainsi définie est croissante. Plaçons-nous sur l'évènement $A = \{Z_{K,M}(s) \geq \psi(x)\}$:

$$\psi(x) \leq \mathbb{E}^A[Z_{K,M}(s)] \leq \psi\left(\log\left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)}\right)\right)$$

d'où $x \leq \log\left(\frac{1}{\mathbb{P}(A)}\right)$ et donc $\mathbb{P}(A) \leq e^{-x}$.

D'où avec probabilité $1 - e^{-z_{K,M}-z}$:

$$Z_{K,M}(s) \leq 4C^* \left[C \frac{\varphi(x_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2})}{x_{K,M}^2 \sqrt{N}} + C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} \sqrt{\frac{z_{K,M} + z}{x_{K,M}^2 N}} + 2C_{\mathcal{F},\infty}^3 \frac{z_{K,M} + z}{x_{K,M}^2 N} \right] \quad (5)$$

et il ne restera plus qu'à choisir $x_{K,M}$ et $z_{K,M}$ pour retrouver le lemme 2.

2.4.2 Contrôle de l'entropie à crochets

L'entropie à crochets est invariante par translation de l'ensemble étudié et croissante au sens de l'inclusion, donc

$$H(u, B_\sigma - s_M, d_{g^*}) = H(u, B_\sigma, d_{g^*}) \leq H(u, S_{K,M}, d_{g^*}) \quad (6)$$

On utilise ensuite que g^* est bornée en norme infinie par $C_{\mathcal{F},\infty}^3$ pour obtenir que pour toute fonction t de carré intégrable, $\int t^2 g^* \leq C_{\mathcal{F},\infty}^3 \|t\|_2^2$. Un crochet de taille $u/C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}$ pour d_2 est donc aussi un crochet de taille u pour d_{g^*} d'où un recouvrement par crochets de taille $u/C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}$ pour d_2 fournit un recouvrement par crochets de taille u pour d_{g^*} , d'où

$$H(u, S_{K,M}, d_{g^*}) \leq H\left(\frac{u}{C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}}, S_{K,M}, d_2\right) \quad (7)$$

Réécrivons la définition de $S_{K,M}$:

$$S_{K,M} = \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in \{1, \dots, K\}^3} \pi_{k_1} \mathbf{Q}_{k_1, k_2} \mathbf{Q}_{k_2, k_3} f_{k_1} \otimes f_{k_2} \otimes f_{k_3}, \quad \mathbf{Q} \in \mathcal{Q}_K, \quad \pi \mathbf{Q} = \pi, \quad \mathbf{f} \in (\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)^K \right\} \quad (8)$$

$$\subset \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in \{1, \dots, K\}^3} \mu_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}, \quad \mu \in \mathcal{U}, \quad \phi \in \Phi \right\} \quad (9)$$

avec

$$\begin{cases} \mathcal{U} = \{(\pi_{k_1} \mathbf{Q}_{k_1, k_2} \mathbf{Q}_{k_2, k_3})_{k_1, k_2, k_3}, & \mathbf{Q} \text{ matrice de transition } K \times K, \quad \pi \geq 0, \quad \pi \in \mathbb{S}_{K-1}\} \\ \Phi = \{(f_{k_1} \otimes f_{k_2} \otimes f_{k_3})_{k_1, k_2, k_3}, & \mathbf{f} \in (\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)^K \} \end{cases}$$

Supposons qu'on dispose d'un recouvrement par crochets $\{[a^i, b^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\mathcal{U}}}$ de taille ϵ de \mathcal{U} (pour la distance $d_2(a, b) = \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^i - a_{\mathbf{k}}^i)^2$) et d'un recouvrement par crochets $\{[u^i, v^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\Phi}}$ de taille ϵ de Φ (pour la distance $d_{\infty, 2}(u, v) = \sup_{\mathbf{k}} \int (v_{\mathbf{k}}^i - u_{\mathbf{k}}^i)^2$). Quitte à remplacer a^i par $\max(a^i, 0)$, on peut supposer $a_{\mathbf{k}}^i \geq 0$ pour tout i, \mathbf{k} . Considérons l'ensemble de crochets $\{[\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^i u_{\mathbf{k}}^j, \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^i v_{\mathbf{k}}^j]\}_{1 \leq i \leq N_{\mathcal{U}}, 1 \leq j \leq N_{\Phi}}$.

Cette famille recouvre $S_{K, M}$: pour tout $\mu \in \mathcal{U}$, $\phi \in \Phi$, il existe $[a, b] \in \{[a^i, b^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\mathcal{U}}}$ et $[u, v] \in \{[u^i, v^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\Phi}}$ tels que $\mu \in [a, b]$ et $\phi \in [u, v]$ et alors $\sum_{\mathbf{k}} \mu_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \in [\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}, \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}]$.

Calculons la taille de ces crochets. Soit $[a, b] \in \{[a^i, b^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\mathcal{U}}}$ et $[u, v] \in \{[u^i, v^i]\}_{1 \leq i \leq N_{\Phi}}$, alors :

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \right\|_2^2 &= \int \left(\sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}) \right)^2 \\ &\leq K^3 \int \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}})^2 \\ &= K^3 \int \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}) + (a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}})v_{\mathbf{k}})^2 \\ &\leq 2K^3 \left[\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^2 \int (u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}})^2 + \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}})^2 \int v_{\mathbf{k}}^2 \right] \end{aligned}$$

Or par définition $\int (u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}})^2 \leq \epsilon^2$ et $\sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}})^2 \leq \epsilon^2$. De plus, on peut supposer $\|a\|_{\infty} \leq 1$ et $\|v_{\mathbf{k}}\|_{\infty} \leq C_{\mathcal{F}, \infty}^3$ pour tout \mathbf{k} , d'où

$$\left\| \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \right\|_2^2 \leq 2K^3 \epsilon^2 [K^3 + C_{\mathcal{F}, \infty}^6]$$

On obtient donc :

$$N(\epsilon, S_{K, M}, d_2) \leq N\left(\frac{\epsilon}{\sqrt{2K^3(K^3 + C_{\mathcal{F}, \infty}^6)}}, \mathcal{U}, d_2\right) N\left(\frac{\epsilon}{\sqrt{2K^3(K^3 + C_{\mathcal{F}, \infty}^6)}}, \Phi, d_{\infty, 2}\right) \quad (10)$$

Contrôle de l'entropie de \mathcal{U} . Soit $\epsilon \in (0, 2)$. On part de la famille $\{[k/n, (k+1)/n], k \in \{0, \dots, n-1\}\}$ pour n un entier entre $1/\epsilon$ et $2/\epsilon$, ce qui donne un recouvrement par crochets de taille ϵ de $[0, 1]$ de cardinal inférieur à $2/\epsilon$.

Ces crochets vont servir à contrôler chaque composante libre de \mathbf{Q} et π , soit $K^2 - 1$.

Plus précisément, considérons l'ensemble de crochets

$$\begin{aligned} \left\{ [A, B] \mid A_{k_1, k_2, k_3} &= \frac{1}{n^3} p_{k_1} a_{k_1, k_2} a_{k_2, k_3}, \quad B_{k_1, k_2, k_3} = \frac{1}{n^3} (p_{k_1} + 1)(a_{k_1, k_2} + 1)(a_{k_2, k_3} + 1), \right. \\ p &\in \{0, \dots, n-1\}^{K-1}, \quad \sum_{k=1}^{K-1} p_k < n, \quad p_K = n - \sum_{k=1}^{K-1} (p_k + 1), \\ a &\in \{0, \dots, n-1\}^{K \times (K-1)}, \quad \forall i \in \{1, \dots, K\}, \quad \sum_{k=1}^{K-1} a_{i, k} < n, \quad a_{i, K} = n - \sum_{k=1}^{K-1} (a_{i, k} + 1) \left. \right\} \end{aligned}$$

Cet ensemble est de cardinal inférieur à $\left(\frac{2}{\epsilon}\right)^{K^2-1}$. C'est bien un ensemble de crochets qui recouvrent \mathcal{U} .

Pour déterminer leur taille, remarquons que

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^K \left(\frac{1}{n^3} p_{k_1} a_{k_1, k_2} a_{k_2, k_3} - \frac{1}{n^3} (p_{k_1} + 1)(a_{k_1, k_2} + 1)(a_{k_2, k_3} + 1) \right)^3 \\ &= \frac{1}{n^6} \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^K \left((a_{k_1, k_2} + 1)(a_{k_2, k_3} + 1) + p_{k_1}(a_{k_2, k_3} + 1) + p_{k_1} a_{k_1, k_2} \right)^3 \\ &\leq \frac{9n^4 K^3}{n^6} \\ &\leq 9K^3 \epsilon^2 \end{aligned}$$

D'où

$$N(u, \mathcal{U}, d_2) \leq \max \left(\frac{6K^{3/2}}{u}, 1 \right)^{K^2-1} \quad (11)$$

Contrôle de l'entropie de Φ . Tout élément $f \in \mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M$ peut s'écrire sous la forme $\sum_{m=1}^M \lambda_m \varphi_m$ pour $(\varphi_m)_{m \in \{1, \dots, M\}}$ une base orthonormée de \mathfrak{P}_M . La condition **[HF]** implique alors que $|\lambda_m| \leq C_{\mathcal{F}, 2}$ pour tout $m \in \{1, \dots, M\}$.

Nous allons donc partir d'un recouvrement par crochets de la boule de rayon $C_{\mathcal{F}, 2}$ de \mathbb{R}^M , à partir duquel on peut construire un recouvrement de $\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M$ et de Φ .

Soit $\epsilon > 0$, alors il existe un recouvrement par crochets $\{[a^i, b^i], i \in \{1, \dots, N_M\}\}$ de taille ϵ de la boule de rayon $C_{\mathcal{F}, 2}$ de \mathbb{R}^M , de cardinal inférieur à $\max \left(\frac{4\sqrt{M}C_{\mathcal{F}, 2}}{\epsilon}, 1 \right)^M$.

Pour tout $m \in \{1, \dots, M\}$, $i \in \{1, \dots, N_M\}$ et $y \in [0, 1]^D$, on pose

$$\begin{aligned} u_m^i(y) &= \begin{cases} a_m^i & \text{si } \varphi_m(y) \leq 0 \\ b_m^i & \text{sinon} \end{cases} \\ v_m^i(y) &= a_m^i + b_m^i - u_m^i(y) \end{aligned}$$

puis pour tout $i \in \{1, \dots, N_M\}$ et $y \in [0, 1]^D$,

$$\begin{cases} U_1^i(y) = \sum_{m=1}^M u_m^i(y) \varphi_m(y) \\ U_2^i(y) = \sum_{m=1}^M v_m^i(y) \varphi_m(y) \end{cases}$$

et enfin pour tout $\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_K) \in \{1, \dots, N_M\}^K$ et $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3) \in \{1, \dots, K\}^3$:

$$\begin{cases} (V^{\mathbf{i}})_{\mathbf{k}} = \min \{ U_{\sigma_1}^{i_{k_1}} \otimes U_{\sigma_2}^{i_{k_2}} \otimes U_{\sigma_3}^{i_{k_3}}; (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \in \{1, 2\}^3 \} \\ (W^{\mathbf{i}})_{\mathbf{k}} = \max \{ U_{\sigma_1}^{i_{k_1}} \otimes U_{\sigma_2}^{i_{k_2}} \otimes U_{\sigma_3}^{i_{k_3}}; (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \in \{1, 2\}^3 \} \end{cases}$$

Lemme 6. $\{[V^i, W^i], \mathbf{i} \in \{1, \dots, N_M\}^K\}$ est un recouvrement par crochets de taille $cM^{3/2}\epsilon$ de Φ pour une constante $c \geq 2$ ne dépendant que de $C_{\mathcal{F},2}$.

Démonstration. En suivant le raisonnement de [dCGL15] (section 8.2.4), on obtient que cette famille de crochets recouvre bien Φ et que pour tout $\mathbf{k} \in \{1, \dots, K\}^3$ et pour une constante numérique $\alpha \geq 4$,

$$\int ((W^i)_{\mathbf{k}} - (V^i)_{\mathbf{k}})^2 \leq \alpha M^3 (\max(C_{\mathcal{F},2}, 1))^4 \epsilon^2$$

et on prend $c = \sqrt{\alpha} (\max(C_{\mathcal{F},2}, 1))^2$. □

On obtient donc que

$$N(u, \Phi, d_{\infty,2}) \leq \max\left(\frac{4cC_{\mathcal{F},2}M^2}{u}, 1\right)^{MK} \quad (12)$$

Synthèse et fonction φ . Combinons (6), (7), (10), (11) et (12) :

$$\begin{aligned} H(u, B_\sigma - s_M, d_{g^*}) &\leq (K^2 - 1) \log \max\left(\frac{C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} 6K^{3/2} \sqrt{2K^3(K^3 + C_{\mathcal{F},\infty}^6)}}{u}, 1\right) \\ &\quad + MK \log \max\left(\frac{4cC_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} M^2 \sqrt{2K^3(K^3 + C_{\mathcal{F},\infty}^6)}}{u}, 1\right) \\ &\leq (MK + K^2 - 1) \log \max\left(\frac{4cC_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} M^2 K^3 \sqrt{2(K^3 + C_{\mathcal{F},\infty}^6)}}{u}, 1\right) \\ &\leq (MK + K^2 - 1) \log \max\left(\frac{4cC_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} N^2 N^3 \sqrt{2(N^3 + C_{\mathcal{F},\infty}^6)}}{u}, 1\right) \\ &\leq (MK + K^2 - 1) \log \max\left(\frac{8cC_{\mathcal{F},\infty}^{3/2} N^{13/2}}{u}, 1\right) \end{aligned}$$

pour N assez grand ($N \geq C_{\mathcal{F},\infty}^2$) car on a supposé $M \leq N$ et $K \leq N$, et alors il existe une constante numérique C_0 ne dépendant que de $C_{\mathcal{F},2}$ et $C_{\mathcal{F},\infty}$ telle que en posant

$$\varphi(\sigma) = C_0 \sigma \sqrt{MK + K^2 - 1} \left(1 + \sqrt{\log\left(\max\left\{\frac{N^{13/2}}{\sigma}, 1\right\}\right)}\right)$$

alors pour tout $N \geq C_{\mathcal{F},\infty}^2$ et $\sigma > 0$,

$$\begin{cases} \sigma^2 H(\sigma, S_{K,M}, d_2) \leq \varphi(\sigma)^2 \\ \int_0^\sigma \sqrt{H(\sigma, S_{K,M}, d_2)} d\sigma \leq \varphi(\sigma) \end{cases}$$

Montrons à présent que cette fonction φ convient aux hypothèses de (4). Remarquons déjà que $x \mapsto \frac{\varphi(x)}{x}$ est décroissante, donc $x \mapsto \frac{\varphi(x)}{x^2}$ aussi. On peut donc définir $\sigma_{K,M} \leq N^{13/2}$ comme l'unique solution de l'équation $\varphi(x) = \sqrt{N}x^2$ pourvu que N soit assez grand (c'est de là que vient la condition $N \geq N_0 := \max\{(C_0\sqrt{2})^{1/6}, C_{\mathcal{F},\infty}^2\}$), et alors pour tout $\sigma \geq \sigma_{K,M}$:

$$H(\sigma, B_\sigma - s_M, d_{g^*}) \leq \frac{\varphi(\sigma)^2}{\sigma^2} \leq \frac{\varphi(\sigma)}{\sigma} \sigma \sqrt{N} = \varphi(\sigma) \sqrt{N}$$

L'équation (4) en découle immédiatement.

2.4.3 Choix des paramètres

Reprenons l'équation (5). Par décroissance de $x \mapsto \frac{\varphi(x)}{x}$, on a $\frac{\varphi(x_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2})}{x_{K,M} \sqrt{N}} \leq \sigma_{K,M} C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}$ dès que $x_{K,M} \geq \frac{\sigma_{K,M}}{C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}}$, et donc avec probabilité $1 - e^{-z_{K,M}-z}$:

$$Z_{K,M}(s) \leq C^{**} \left[\frac{\sigma_{K,M}}{x_{K,M}} + \sqrt{\frac{z_{K,M} + z}{x_{K,M}^2 N}} + \frac{z_{K,M} + z}{x_{K,M}^2 N} \right]$$

pour une constante C^{**} ne dépendant que de $C_{\mathcal{F},2}$, $C_{\mathcal{F},\infty}$ et \mathbf{Q}^* .

Posons $x_{K,M} = \theta^{-1} \sqrt{\sigma_{K,M}^2 + \frac{z_{K,M} + z}{N}}$ où $\theta \leq C_{\mathcal{F},\infty}^{3/2}$ est tel que $2\theta + \theta^2 \leq 1/(4C^{**})$. Alors avec probabilité $1 - e^{-z_{K,M}-z}$:

$$Z_{K,M}(s) \leq C^{**}(\theta + \theta + \theta^2) \leq \frac{1}{4}$$

Posons maintenant $z_{K,M} = M+K$, il vient $\sum_{K \in \mathbb{N}^*, M \in \mathbb{M}} e^{-z_{K,M}} \leq (\sum_{M \geq 1} e^{-M})(\sum_{K \geq 1} e^{-K}) = (e-1)^{-2}$ et donc le premier point du lemme 2 est prouvé.

On a de plus avec probabilité $1 - (e-1)^{-2}e^{-z}$, pour tout K, M :

$$\begin{aligned} Z_{K,M}(s) x_{K,M}^2 &\leq C^{**} \left[\sigma_{K,M} x_{K,M} + x_{K,M} \sqrt{\frac{z_{K,M} + z}{N}} + \frac{z_{K,M} + z}{N} \right] \\ &\leq C^{**} \left[2\theta x_{K,M}^2 + \frac{z_{K,M} + z}{N} \right] \\ &= C^{**} \left[2\theta^{-1} \sigma_{K,M}^2 + (2\theta^{-1} + 1) \frac{M}{N} + (2\theta^{-1} + 1) \frac{K}{N} + (2\theta^{-1} + 1) \frac{z}{N} \right] \end{aligned}$$

Puisqu'on a supposé $K \leq \log(N)$, il suffit donc que

$$\widetilde{\text{pen}}(N, M, K) \geq C^{**} \left[2\theta^{-1} \sigma_{K,M}^2 + (2\theta^{-1} + 1) \frac{M}{N} + (2\theta^{-1} + 1) \frac{\log(N)}{N} \right]$$

Lemme 7. *Il existe une constante C_1 ne dépendant que de $C_{\mathcal{F},2}$ et $C_{\mathcal{F},\infty}$ telle que pour tout $N \geq N_0$:*

$$\sigma_{K,M} \leq C_1 \sqrt{\frac{MK + K^2 - 1}{N}} (1 + \sqrt{\log(N)})$$

Le deuxième point du lemme 2 en découle.

Démonstration. Posons $x(C) = \min \left\{ C \sqrt{\frac{MK+K^2-1}{N}} (1 + \sqrt{\log(N)}), N^{13/2} \right\}$.

$\sigma_{K,M}$ est défini par la relation $\frac{\varphi(x)}{x^2\sqrt{N}} = 1$. La fonction $x \mapsto \frac{\varphi(x)}{x^2}$ étant croissante, il suffit pour obtenir le lemme de prouver que $\frac{\varphi(x(C))}{x(C)^2\sqrt{N}} \leq 1$ pour une constante C suffisamment grande. On supposera $C \geq 1$.

$$\begin{aligned} \frac{\varphi(x(C))}{x(C)^2\sqrt{N}} &= \frac{C_0}{C} \frac{1 + \sqrt{\log \left(\frac{N^7}{\min\{C\sqrt{MK+K^2-1}(1+\sqrt{\log(N)}), N^7\}} \right)}}{1 + \sqrt{\log(N)}} \\ &\leq \frac{C_0}{C} \frac{1 + \sqrt{\log(N^7)}}{1 + \sqrt{\log(N)}} \end{aligned}$$

car par hypothèse $1 \leq K \leq N$ et $1 \leq M \leq N$. Il suffit alors de prendre $C = \max(C_0\sqrt{7}, 1)$. \square

2.4.4 Pistes d'amélioration

Le contrôle de l'entropie de \mathcal{U} ne prend pas en compte la relation entre π et \mathbf{Q} . En pratique, il n'y a que $MK + K(K-1)$ paramètres libres, les $K-1$ en trop ici étant dûs au contrôle de π . Il devrait donc être possible d'améliorer la condition sur la pénalité.

De plus, cette preuve ne montre rien quant à la minimalité de la pénalité obtenue. On dit qu'une pénalité pen est minimale si pour tout $\kappa > 1$, les modèles sélectionnés en utilisant la pénalité κpen restent d'ordre raisonnable, et pour tout $\kappa < 1$, l'ordre des modèles sélectionnés en utilisant la pénalité κpen explose, voir par exemple [BMM12].

3 Estimation spectrale

L'estimation spectrale est une méthode consistante d'estimation des paramètres de nombreux modèles tels que les HMM ([AHK12], [HKZ12]) ou certains modèles de mélange gaussien ([AHK12]). Contrairement à l'algorithme EM, elle ne dépend pas de conditions initiales et ne présente donc pas de risque de rester piégée dans un maximum local de la vraisemblance, tout en restant efficace (dans notre cas, elle est de complexité polynômiale en K^* et M). L'article [dCGLLC15] détaille l'algorithme que nous utiliserons pour les simulations et fournit une preuve concernant sa vitesse de convergence.

3.1 Justification théorique

Voyons tout d'abord comment il est possible de retrouver les paramètres du HMM à partir de la densité g^* de la loi de trois observations consécutives. Soit $(\varphi_1, \dots, \varphi_M)$ une base orthonormée de \mathfrak{P}_M . Nous utiliserons les vecteurs, matrices et tenseurs suivants, définis pour tout $M \in \mathcal{M}$:

- $\mathbf{O}_M \in \mathbb{R}^{M \times K^*}$ représente les coordonnées des lois d'émission sur la base de l'espace d'approximation \mathfrak{P}_M :

$$\forall (a, k) \in \{1, \dots, M\} \times \{1, \dots, K^*\}, \quad \mathbf{O}_M(a, k) = \mathbb{E}[\varphi_a(Y_1) | X_1 = k] = \langle f_k^*, \varphi_a \rangle$$

- $\mathbf{L}_M \in \mathbb{R}^M$ représente les coordonnées de la densité d'une observation sur la base de \mathfrak{P}_M :

$$\forall a \in \{1, \dots, M\}, \quad \mathbf{L}_M(a) = \mathbb{E}[\varphi_a(Y_1)]$$

- $\mathbf{M}_M \in \mathbb{R}^{M \times M \times M}$ représente les coordonnées de la densité de trois observations consécutives, c'est-à-dire g^* , sur la base de $(\mathfrak{P}_M)^{\otimes 3}$:

$$\forall (a, b, c) \in \{1, \dots, M\}^3, \quad \mathbf{M}_M(a, b, c) = \mathbb{E}[\varphi_a(Y_1)\varphi_b(Y_2)\varphi_c(Y_3)] = \langle g^*, \varphi_a \otimes \varphi_b \otimes \varphi_c \rangle$$

- $\mathbf{N}_M \in \mathbb{R}^{M \times M}$ représente les coordonnées de la densité de deux observations consécutives sur la base de $(\mathfrak{P}_M)^{\otimes 2}$:

$$\forall (a, b) \in \{1, \dots, M\}^2, \quad \mathbf{N}_M(a, b) = \mathbb{E}[\varphi_a(Y_1)\varphi_b(Y_2)]$$

- $\mathbf{P}_M \in \mathbb{R}^{M \times M}$ représente les coordonnées de la densité de (Y_1, Y_3) sur la base de $(\mathfrak{P}_M)^{\otimes 2}$:

$$\forall (a, c) \in \{1, \dots, M\}^2, \quad \mathbf{P}_M(a, c) = \mathbb{E}[\varphi_a(Y_1)\varphi_c(Y_3)]$$

On peut vérifier que tous ces objets se réécrivent comme fonction de \mathbf{O}_M , \mathbf{Q}^* et π^* :

Lemme 8 (Expression matricielle des tenseurs).

- $\mathbf{L}_M = \mathbf{O}_M \pi^*$
- $\forall b \in \{1, \dots, M\}, \quad \mathbf{M}_M(\cdot, b, \cdot) = \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) \mathbf{Q}^* \text{Diag}[\mathbf{O}_M(b, \cdot)] \mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top$
- $\mathbf{N}_M = \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) \mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top$
- $\mathbf{P}_M = \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) (\mathbf{Q}^*)^2 \mathbf{O}_M^\top$

où $\text{Diag}(v)$ désigne la matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont ceux du vecteur v .

Remarque L'hypothèse [**Hlibre**] assure que la matrice \mathbf{O}_M est de rang K^* à partir d'un certain rang M_{f^*} . Dans la suite, nous supposons toujours $M \geq M_{f^*}$. L'hypothèse [**Hinv**] implique alors que \mathbf{N}_M et \mathbf{P}_M sont de rang K^* . Cela permet notamment de retrouver $K^* = \lim_{M \rightarrow +\infty} \text{rg}(\mathbf{N}_M)$.

Soit $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{M \times K^*}$ la matrice des K^* vecteurs singuliers à droite de \mathbf{P}_M correspondant à ses K^* plus grandes valeurs singulières (c'est-à-dire ici ses valeurs singulières non nulles). Rappelons qu'il est toujours possible de factoriser \mathbf{P}_M sous la forme $\mathbf{U} \Sigma \mathbf{V}^\top$ avec \mathbf{U} et \mathbf{V} matrices orthogonales et Σ diagonale. Les colonnes de \mathbf{U} sont les vecteurs singuliers à droite de \mathbf{P}_M .

Remarquons que cela implique que $\mathbf{U}^\top \mathbf{P}_M$ est de rang K^* et donc que $\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M$ est inversible.

Considérons les matrices $K^* \times K^*$

$$\forall b \in \{1, \dots, M\}, \quad \mathbf{B}(b) = (\mathbf{U}^\top \mathbf{P}_M \mathbf{U})^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{M}_M(\cdot, b, \cdot) \mathbf{U}$$

Notons que $\mathbf{U}^\top \mathbf{P}_M \mathbf{U} = \mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) (\mathbf{Q}^*)^2 (\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M)^\top$, donc l'inversion ne pose pas de problème. Reprenons les formules de \mathbf{M}_M et \mathbf{P}_M vues au lemme 8 :

$$\forall b \in \{1, \dots, M\},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(b) &= [\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) (\mathbf{Q}^*)^2 \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U}]^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) \mathbf{Q}^* \text{Diag}[\mathbf{O}_M(b, \cdot)] \mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U} \\ &= (\mathbf{O}_M^\top \mathbf{U})^{-1} (\mathbf{Q}^*)^{-1} \text{Diag}[\mathbf{O}_M(b, \cdot)] \mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U} \\ &= (\mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U})^{-1} \text{Diag}[\mathbf{O}_M(b, \cdot)] (\mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U}) \end{aligned}$$

donc toutes les matrices $\mathbf{B}(b)$ sont diagonalisables par la même matrice $\mathbf{R} = (\mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U})^{-1}$.
 Considérons les matrices $K^* \times K^*$

$$\forall k \in \{1, \dots, K^*\}, \quad \mathbf{C}(k) = \sum_{b=1}^M \mathbf{U}(b, k) \mathbf{B}(b)$$

Alors tous les $\mathbf{C}(k)$ se diagonalisent par \mathbf{R} et

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}(k) \mathbf{R} &= \sum_{b=1}^M \mathbf{U}(b, k) \text{Diag}[\mathbf{O}_M(b, \cdot)] \\ &= \text{Diag}(\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M(k, \cdot)) \end{aligned}$$

On peut donc définir

$$\forall k, k' \in \{1, \dots, K^*\}, \quad \Lambda(k, k') = (\mathbf{R}^{-1} \mathbf{C}(k) \mathbf{R})_{k', k'}$$

et on obtient

$$\Lambda = \mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M$$

Or d'une part $\text{Im}(\mathbf{O}_M) = \text{Im}(\mathbf{P}_M)$ en utilisant le lemme 8 et le fait que \mathbf{O}_M et \mathbf{P}_M ont même rang, et d'autre part $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top$ est un projecteur orthogonal sur $\text{Im}(\mathbf{P}_M)$, donc $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M = \mathbf{O}_M$. D'où

$$\mathbf{O}_M = \mathbf{U} \Lambda$$

ce qui nous permet de retrouver les projections des densités d'émission sur tous les espaces \mathfrak{P}_M , donc par densité les densités elles-mêmes. Il reste à retrouver π^* et \mathbf{Q}^* . Pour cela, remarquons que

$$\begin{aligned} (\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M)^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{L}_M &= (\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M)^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \pi^* \\ &= \pi^* \end{aligned}$$

en utilisant le lemme 8. Enfin,

$$\begin{aligned} (\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*))^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{N}_M \mathbf{U} (\mathbf{O}_M^\top \mathbf{U})^{-1} &= (\mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*))^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{O}_M \text{Diag}(\pi^*) \mathbf{Q}^* \mathbf{O}_M^\top \mathbf{U} (\mathbf{O}_M^\top \mathbf{U})^{-1} \\ &= \mathbf{Q}^* \end{aligned}$$

en utilisant le lemme 8, ce qui conclut l'estimation des paramètres.

3.2 Algorithme d'estimation

Nous utiliserons l'algorithme suivant, tiré de [dCGLLC15] :

[Etape 1] Calcul des estimateurs empiriques. On cherche à estimer les tenseurs à la base de l'estimation spectrale introduits à la section précédente. On calcule donc pour tout $(a, b, c) \in \{1, \dots, M\}$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}_M(a) &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \varphi_a(Y_1^{(s)}) \\ \hat{\mathbf{M}}_M(a, b, c) &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \varphi_a(Y_1^{(s)}) \varphi_b(Y_2^{(s)}) \varphi_c(Y_3^{(s)}) \\ \hat{\mathbf{N}}_M(a, b) &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \varphi_a(Y_1^{(s)}) \varphi_b(Y_2^{(s)}) \\ \hat{\mathbf{P}}_M(a, c) &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N \varphi_a(Y_1^{(s)}) \varphi_c(Y_3^{(s)})\end{aligned}$$

[Etape 2] On calcule $\hat{\mathbf{U}}$ la matrice $M \times K^*$ des vecteurs singuliers à droite de $\hat{\mathbf{P}}_M$ associés à ses K^* plus grandes valeurs singulières.

[Etape 3] On calcule pour tout $b \in \{1, \dots, M\}$:

$$\hat{\mathbf{B}}(b) = (\hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{P}}_M \hat{\mathbf{U}})^{-1} \hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{M}}_M(., b, .) \hat{\mathbf{U}}$$

[Etape 4] On génère Θ , matrice uniformément tirée parmi les matrices orthogonales (sa loi est invariante par multiplication par une matrice orthogonale). Pour cela, remarquons que construire Θ revient à tirer les vecteurs de la base orthonormale qu'elle décrit, ce que nous réalisons comme suit :

- On tire $(Y_i)_{1 \leq i \leq K^*} \in (\mathbb{R}^{K^*})^{K^*}$ K^* vecteurs de taille K^* tirés selon une loi normale centrée réduite. Ils forment p.s. une base de \mathbb{R}^{K^*} , de loi invariante par multiplication par une matrice orthogonale,
- On applique le procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt à la famille $(Y_i)_{1 \leq i \leq K^*}$ pour obtenir la base orthonormale $(X_i)_{1 \leq i \leq K^*}$,
- On pose Θ la matrice dont les colonnes sont les X_i .

On se convainc facilement que cette construction est de loi invariante par multiplication par une matrice orthogonale.

[Etape 5] On calcule pour tout $k \in \{1, \dots, K^*\}$:

$$\hat{\mathbf{C}}(k) = \sum_{b=1}^M (\hat{\mathbf{U}} \Theta)(b, k) \hat{\mathbf{B}}(b)$$

[Etape 6] On calcule $\hat{\mathbf{R}}$ une matrice qui diagonalise $\hat{\mathbf{C}}(1)$ telle que ses colonnes soient de norme 1 :

$$\hat{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{C}}(1) \hat{\mathbf{R}} = \text{Diag}[(\hat{\Lambda}(1, 1), \dots, \hat{\Lambda}(1, K^*))]$$

[**Etape 7**] On calcule la matrice $\hat{\Lambda}$ par :

$$\forall k, k' \in \{1, \dots, K^*\}, \quad \hat{\Lambda}(k, k') = (\hat{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{C}}(k) \hat{\mathbf{R}})(k', k')$$

[**Etape 8**] (**facultative**) On répète les étapes 4 à 7 N_{gen} fois, et on sélectionne la matrice Θ qui permet de maximiser la quantité

$$\inf_{k \in \{1, \dots, K^*\}} \left(\inf_{k_1 \neq k_2 \in \{1, \dots, K^*\}} |\hat{\Lambda}(k, k_1) - \hat{\Lambda}(k, k_2)| \right)$$

[**Etape 9**] On calcule $\hat{\mathbf{O}}_M = \hat{\mathbf{U}} \Theta \hat{\Lambda}$.

[**Etape 10**] On calcule $\tilde{\mathbf{f}} = (\tilde{f}_k)_{k \in \{1, \dots, K^*\}} \in (\mathcal{F} \cap \mathfrak{P}_M)^{K^*}$ l'estimateur spectral des densités d'émission défini par

$$\forall k \in \{1, \dots, K^*\}, \quad \tilde{f}_k = \sum_{m=1}^M \hat{\mathbf{O}}_M(m, k) \varphi_m$$

[**Etape 11**] On calcule l'estimateur spectral de la loi invariante :

$$\tilde{\pi} = \Pi_{\Delta_{K^*}} \left((\hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{O}}_M)^{-1} \hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{L}}_M \right)$$

où $\Pi_{\Delta_{K^*}}$ désigne la projection sur le simplexe de \mathbb{R}^{K^*} . La projection sert à s'assurer que la quantité obtenue est bien une probabilité. Comme c'est une projection sur une partie convexe d'un espace préhilbertien réel, elle est contractante, donc réduit la distance à π^* .

[**Etape 12**] On calcule l'estimateur spectral de la matrice de transition :

$$\hat{\mathbf{Q}} = \Pi_{MT} \left((\hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{O}}_M \text{Diag}[\tilde{\pi}])^{-1} \hat{\mathbf{U}}^\top \hat{\mathbf{N}}_M \hat{\mathbf{U}} (\hat{\mathbf{O}}_M^\top \hat{\mathbf{U}})^{-1} \right)$$

où Π_{MT} désigne la projection sur l'ensemble des matrices de transition considéré comme sous-ensemble de $\mathbb{R}^{(K^*)^2}$ muni du produit scalaire usuel, autrement dit la matrice dont les lignes sont l'image des lignes de la matrice de droite par la projection $\Pi_{\Delta_{K^*}}$. La projection sert à s'assurer que la quantité obtenue est bien une matrice de transition.

[**Etape 13**] On calcule $\hat{\pi}$ la mesure invariante de $\hat{\mathbf{Q}}$, c'est-à-dire l'unique solution de l'équation (d'inconnue X) :

$$X \left((\hat{\mathbf{Q}} - I_{K^*}) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \right) = (0 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 1)$$

La matrice Θ de l'étape 4 permet de garantir qu'avec grande probabilité, les valeurs de Λ seront bien séparées, condition nécessaire pour appliquer certains théorèmes de perturbation matricielle dans la preuve de la convergence de l'estimateur. Plus précisément, il faut minorer avec grande probabilité la quantité

$$\inf_{k \in \{1, \dots, K^*\}} \left(\inf_{k_1 \neq k_2 \in \{1, \dots, K^*\}} |\hat{\Lambda}(k, k_1) - \hat{\Lambda}(k, k_2)| \right)$$

Utiliser plusieurs matrices de rotations est alors un moyen peu coûteux de garantir que cet évènement arrive avec grande probabilité. Toutefois, nos simulations montrent que cette approche n'améliore pas nécessairement l'estimation spectrale.

Posons

$$\eta_3^2(\Phi_M) = \sup_{y, y' \in [0,1]^3} \sum_{a,b,c=1}^M (\varphi_a(y_1)\varphi_b(y_2)\varphi_c(y_3) - \varphi_a(y'_1)\varphi_b(y'_2)\varphi_c(y'_3))^2$$

[dCGLLC15] démontre le résultat suivant sur l'erreur \mathbf{L}^2 des estimateurs spectraux :

Théorème 4 (Erreur \mathbf{L}^2 de l'estimateur spectral). *Il existe des constantes $x(\mathbf{Q}^*)$, $\mathcal{C}(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*)$ et $N(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*)$ telles que pour tout $x \geq x(\mathbf{Q}^*)$, pour tout $\delta \in (0, 1)$, pour tout $M \geq M_{\mathbf{f}^*}$, il existe une permutation $\tau_M \in \mathfrak{S}_{K^*}$ telle que les estimateurs spectraux $\hat{\mathbf{f}}$, $\hat{\pi}$ et $\hat{\mathbf{Q}}$ vérifient pour tout $N \geq N(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*)\eta_3(\Phi_M)^2 u(-\log \delta)/\delta^2$ avec probabilité $1 - 2\delta - 4e^{-x}$:*

$$\begin{aligned} \max_{i \in \{1, \dots, K^*\}} \|f_i^* - \hat{f}_{\tau_M(i)}\|_2 &\leq \mathcal{C}(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*) \frac{\sqrt{-\log \delta} \eta_3(\Phi_M)}{\delta \sqrt{N}} \sqrt{x}, \\ \|\pi^* - \mathbb{P}_{\tau_M} \hat{\pi}\|_2 &\leq \mathcal{C}(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*) \frac{\sqrt{-\log \delta} \eta_3(\Phi_M)}{\delta \sqrt{N}} \sqrt{x}, \\ \|\hat{\mathbf{Q}}^* - \mathbb{P}_{\tau_M} \hat{\mathbf{Q}} \mathbb{P}_{\tau_M}^\top\|_F &\leq \mathcal{C}(\mathbf{Q}^*, \mathbf{f}^*) \frac{\sqrt{-\log \delta} \eta_3(\Phi_M)}{\delta \sqrt{N}} \sqrt{x} \end{aligned}$$

4 Simulations numériques

Les codes de simulation employés sont issus de ceux utilisés par Yohann de Castro pour valider l'estimateur de [dCGL15]. Nous les avons repris et généralisés à $K^* \geq 3$, ce qui a nécessité de réécrire certaines étapes de l'algorithme, notamment la génération d'une matrice orthogonale et la projection sur le simplexe en dimension K^* . Nous nous plaçons dans le cas K^* connu.

Soit $M \in \mathcal{M}$. Dans un premier temps, nous calculons l'estimateur spectral des paramètres du HMM, puis nous utilisons un algorithme itératif pour trouver un minimiseur approché de la perte γ_N en prenant comme point de départ de l'estimation des densités d'émission les estimateurs spectraux. L'algorithme spectral est celui de la section précédente, et l'algorithme minimisant γ_N , "Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy" (CMA-ES), est présenté et étudié dans [Han06].

Commençons par préciser les paramètres de simulation choisis :

- On se place dans le cas $D = 1$, autrement dit les observations sont à valeurs dans $[0, 1]$.
- Pour tout $M \in \mathbb{N}^*$, l'espace \mathfrak{P}_M est l'ensemble des fonctions constantes par morceaux sur une partition régulière en M morceaux de $[0, 1]$. Notons que cette suite d'espaces n'est pas croissante au sens de l'inclusion.

- Les observations sont des chaînes de longueur $N = 60\,000$ générées par un HMM à $K^* = 3$ états cachés. Les lois d'émission sont des lois bêta dont les paramètres suivent deux scénarios :

[Scénario 1] : (1, 5; 5), (6; 6) et (7; 2),

[Scénario 2] : (2; 5), (4; 2) et (1, 7; 1, 7),

[Scénario 3] : (2; 5), (4; 2) et (4; 4).

Ces densités sont tracées sur la figure 4.

- Les paramètres de la chaîne de Markov cachée sont

$$\mathbf{Q}^* = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,1 & 0,1 \\ 0,2 & 0,7 & 0,1 \\ 0,07 & 0,13 & 0,8 \end{pmatrix}$$

$$\pi^* = \left(\frac{47}{120} \quad \frac{11}{40} \quad \frac{1}{3} \right)$$

$$= (0,3917 \quad 0,2750 \quad 0,3333)$$

- L'étape 8 de l'algorithme spectral (régénération des matrices de rotation) est omise.

La dimension du modèle utilisé pour l'estimation est sélectionnée par heuristique de pente, comme montré sur la figure 5 (le lecteur intéressé par cette méthode pourra consulter [BMM12]).

Les résultats de simulation présentés sur les figures 6, 7 et 8 montrent que les densités sont très bien estimées dans le cas du scénario 1. L'algorithme CMA-ES améliore également l'estimation : la moyenne sur 20 simulations avec ces paramètres de la variance $\|\hat{g}_{\hat{M}} - g_{\hat{M}}^*\|_2^2$ est de $8,9 \cdot 10^{-3}$ pour l'estimateur spectral et $3,5 \cdot 10^{-3}$ pour l'estimateur des moindres carrés approché par CMA-ES, ce qui correspond à un gain d'un facteur 2,5.

À l'inverse, le résultat de l'estimation du scénario 2 est aberrant. Une augmentation du nombre d'observations jusqu'à $N = 1\,200\,000$ n'a pas permis de l'améliorer (figure 9), il faut monter jusqu'à $N = 30\,000\,000$ pour que l'estimateur spectral donne un résultat satisfaisant (figure 10).

Une explication possible apparaît lorsqu'on calcule les plus grandes valeurs singulières de la matrice $\hat{\mathbf{P}}_M$ (figures 1 et 2).

Scénario 1	Scénario 2	Scénario 3
1,0285	1,1036	1,1860
0,3705	0,1497	0,1707
0,1064	0,0316	0,0415
0,0246	0,0275	0,0272

FIGURE 1 – 4 plus grandes valeurs singulières de la matrice $\hat{\mathbf{P}}_M$. On a pris $N = 60\,000$ et $M = 16$ pour le scénario 1, $M = 10$ pour les scénarios 2 et 3.

$N = 60\,000$	$N = 1\,200\,000$	$N = 30\,000\,000$	$N = \infty$
1,1069	1,1052	1,1058	1,1064
0,1561	0,1513	0,1525	0,1527
0,0237	0,0073	0,0026	0,0023
0,0210	0,0059	0,0012	0

FIGURE 2 – 4 plus grandes valeurs singulières de la matrice $\hat{\mathbf{P}}_M$ pour le scénario 2. On a pris $M = 15$ dans les trois cas.

La justification théorique de la méthode spectrale repose sur le fait que \mathbf{P}_M est de rang K^* . Cela devrait se traduire par la présence de K^* valeurs singulières de $\hat{\mathbf{P}}_M$ nettement plus grandes que les autres. Or dans les scénarios 2 et 3, la troisième valeur propre est presque égale à la quatrième, autrement dit le HMM se comporte comme s’il avait deux états et non trois. Cela s’explique par le fait que la valeur propre de \mathbf{P}_M est noyée par le bruit : sur la figure 2, on voit que pour les plus petits N , le bruit dépasse largement la troisième valeur singulière.

Ceci se confirme lorsqu’on calcule l’erreur de l’estimateur des moindres carrés dans ces trois scénarios pour $K = 2$ et $K = 3$ (figure 3) : le scénario 2 est très bien estimé par un HMM à deux états cachés. Le scénario 3 est moyennement estimé dans les deux cas.

	Scénario 1	Scénario 2	Scénario 3
$K = 3$	0,0018	1,5365	0,0171
$K = 2$	0,1326	0,0027	0,0130

FIGURE 3 – Variance $\|\hat{g}_{K,M} - g_M^*\|_2^2$. Les paramètres sont $N = 60\,000$ et $M = 16$ dans le scénario 1, $M = 10$ dans les scénarios 2 et 3.

Une piste d’étude serait de déterminer une procédure de seuillage des valeurs singulières de $\hat{\mathbf{P}}_M$ pour sélectionner un ”bon” nombre d’états cachés $\hat{K}_{\text{effectif}}$.

Une heuristique de sélection de K consiste à remarquer que les plus petites valeurs singulières de $\hat{\mathbf{P}}_M$ satisfont une relation simple : elles sont très bien approchées par une fonction affine de leur position dans le classement des valeurs singulières par ordre décroissant (figure 11). A l’inverse, les plus grandes valeurs singulières se démarquent nettement de cette tendance. Cela suggère que les valeurs singulières significatives (non dues au bruit), sont celles qui sont ”nettement” plus grandes que cette tendance dans un sens à définir. Pour nos simulations, nous avons pris comme critère que la valeur singulière devait être 2 fois plus grande que la valeur attendue en faisant une régression linéaire sur les $M/2$ plus petites valeurs singulières de $\hat{\mathbf{P}}_M$. On prend alors $\hat{K}_{\text{effectif}}$ comme le nombre de telles valeurs singulières et on effectue le reste de l’estimation avec celui-ci.

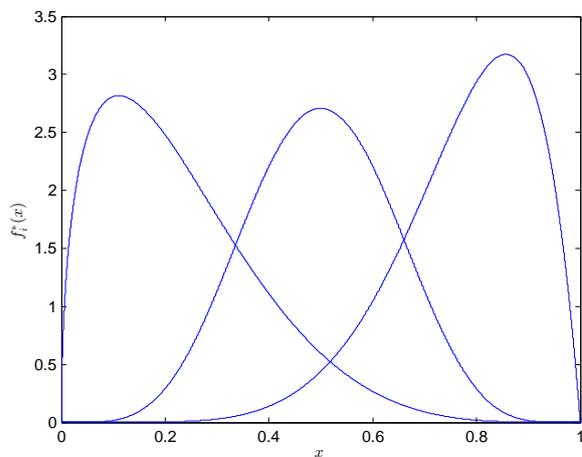
Remerciements

Je remercie Elisabeth Gassiat pour m’avoir proposé ce sujet passionnant et pour ses conseils et Yohann de Castro pour m’avoir fourni ses codes de simulation.

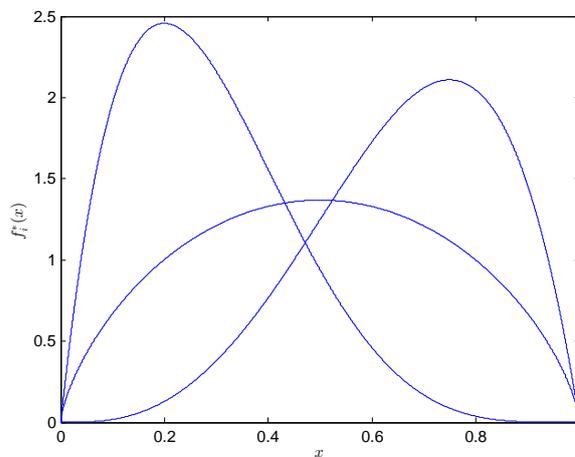
Références

- [AHK12] Animashree Anandkumar, Daniel Hsu, and Sham M Kakade. A method of moments for mixture models and hidden markov models. *arXiv preprint arXiv :1203.0683*, 2012.
- [BMM12] Jean-Patrick Baudry, Cathy Maugis, and Bertrand Michel. Slope heuristics : overview and implementation. *Statistics and Computing*, 22(2) :455–470, 2012.
- [dCGL15] Yohann de Castro, Elisabeth Gassiat, and Claire Lacour. Minimax adaptive estimation of non-parametric hidden markov models. Soumis, 2015.
- [dCGLLC15] Yohann de Castro, Elisabeth Gassiat, Claire Lacour, and Sylvain Le Corff. Consistent estimation of the filtering and marginal smoothing distributions in nonparametric hidden markov models. 2015.
- [GCR13] Elisabeth Gassiat, Alice Cleynen, and Stéphane Robin. Finite state space non parametric hidden markov models are in general identifiable. *arXiv preprint arXiv :1306.4657*, 2013.
- [Han06] Nikolaus Hansen. The cma evolution strategy : a comparing review. In *Towards a new evolutionary computation*, pages 75–102. Springer, 2006.
- [HKZ12] Daniel Hsu, Sham M Kakade, and Tong Zhang. A spectral algorithm for learning hidden markov models. *Journal of Computer and System Sciences*, 78(5) :1460–1480, 2012.
- [Mas07] Pascal Massart. Concentration inequalities and model selection. In *Lecture Notes in Mathematics*, volume 1896. Springer, Berlin, 2007.

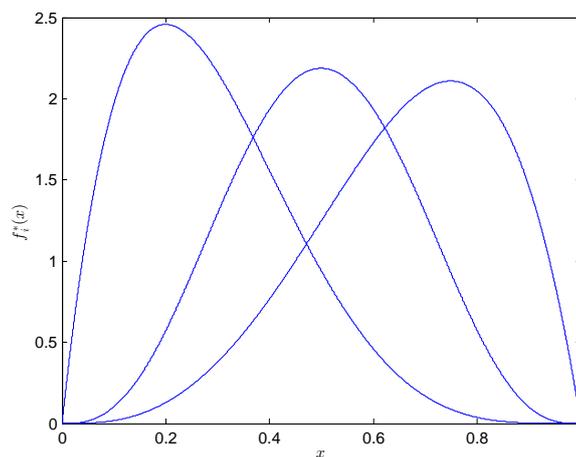
Annexe : simulations numériques



(a) Scénario 1



(b) Scénario 2



(c) Scénario 3

FIGURE 4 – Densités d'émission utilisées

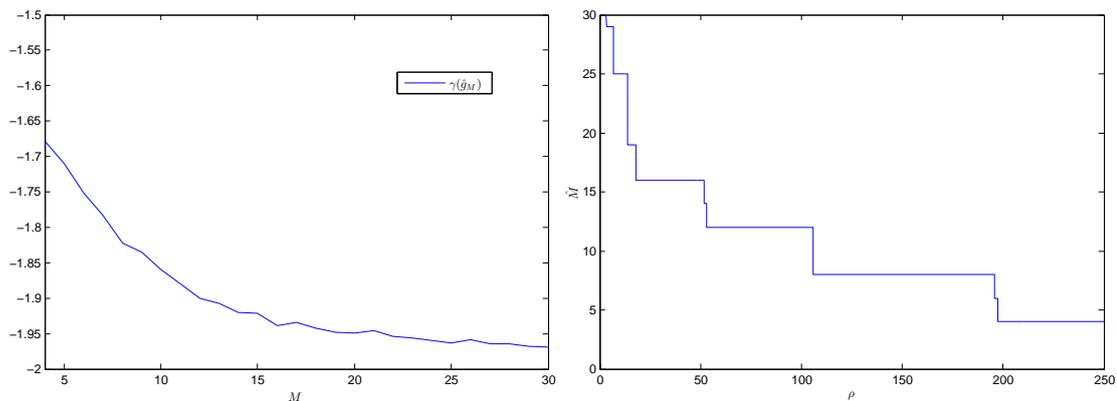


FIGURE 5 – Perte empirique $\gamma_N(\hat{g}_M)$ et M sélectionné pour la pénalité $\rho \times \text{pen}_0$ dans le scénario 1, avec $\text{pen}_0(N, M) = M \log(N)/N$ et $\hat{M}(\rho) = \arg \min_{M \in \mathcal{M}} \{\gamma_N(\hat{g}_M) + \rho \times \text{pen}_0(N, M)\}$. On passe de "gros" modèles à "petits" modèles aux alentours de $\rho = 20$, donc l'heuristique de pente suggère d'utiliser la pénalité $40 \times \text{pen}_0$ qui fournit $\hat{M} = 16$.

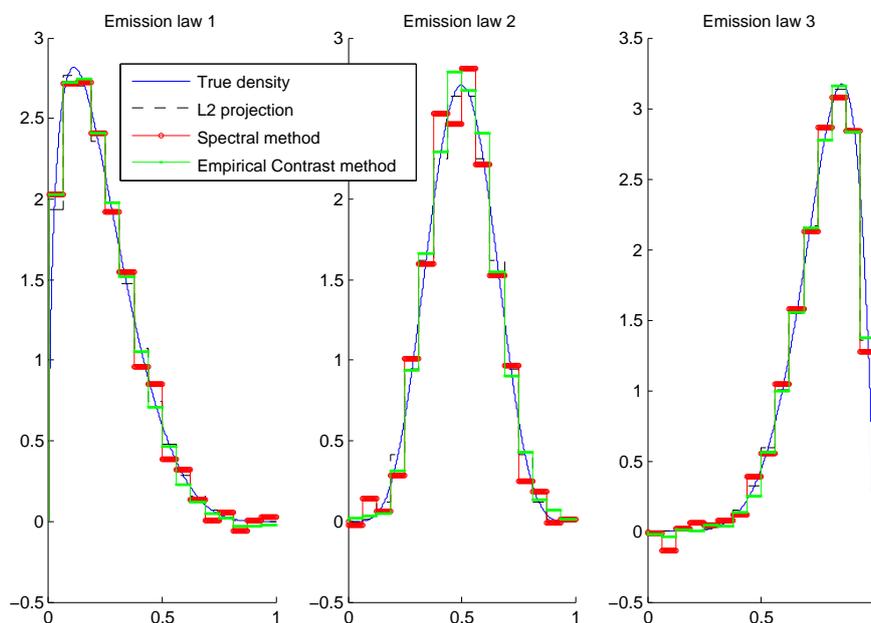


FIGURE 6 – Estimation des densités du scénario 1 pour $M = 16$ et $N = 60\,000$.

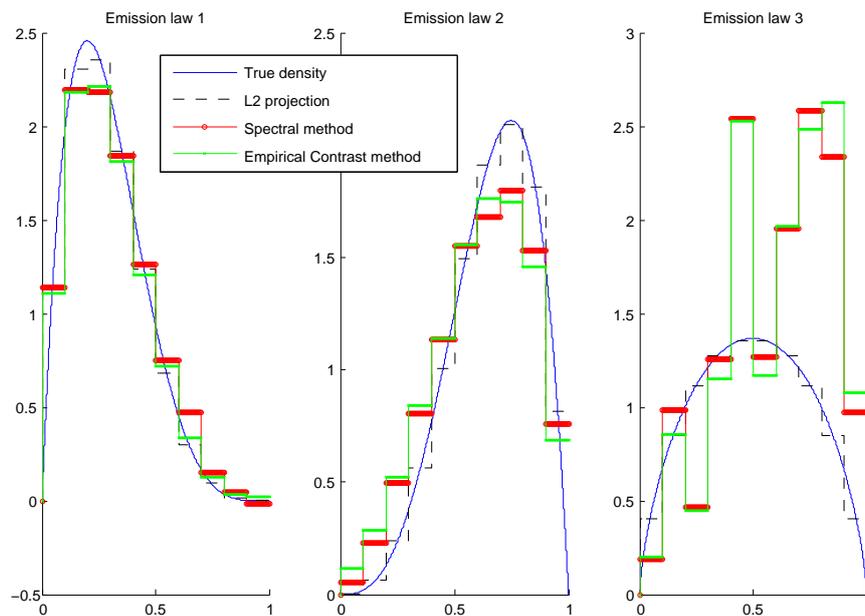


FIGURE 7 – Estimation des densités du scénario 2 pour $M = 10$ et $N = 60\,000$.

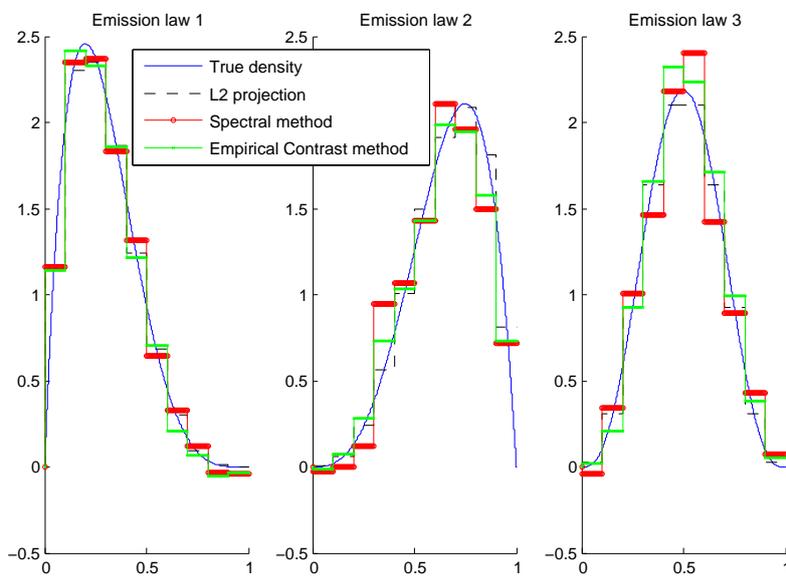


FIGURE 8 – Estimation des densités du scénario 3 pour $M = 10$ et $N = 60\,000$.

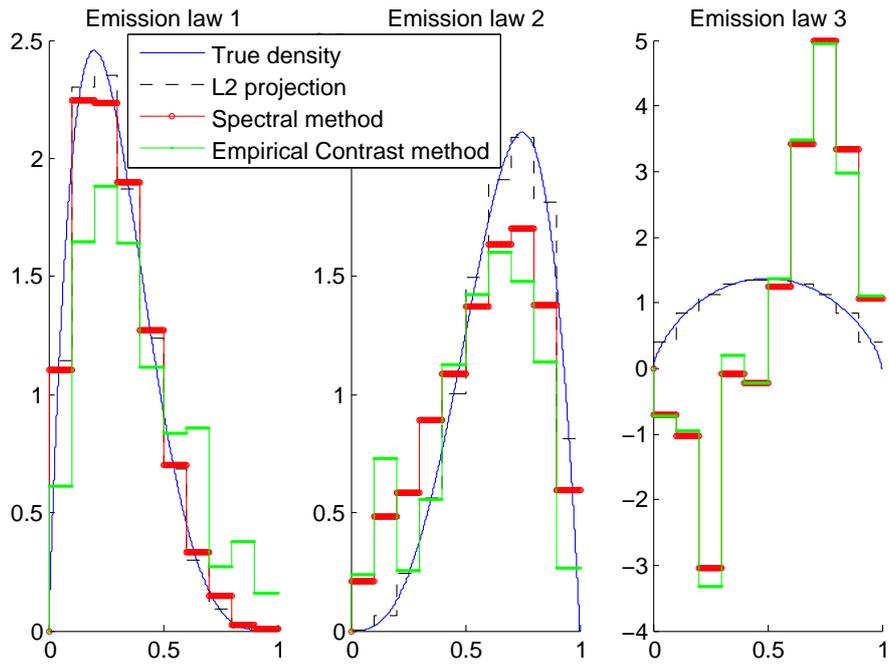


FIGURE 9 – Estimation des densités du scénario 2 pour $M = 10$ et $N = 1\,200\,000$.

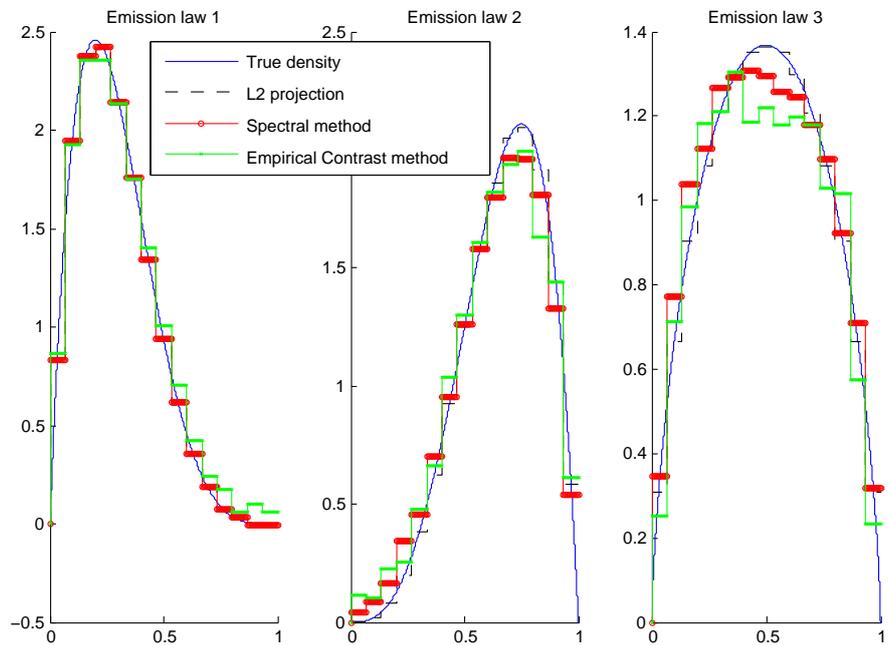


FIGURE 10 – Estimation des densités du scénario 2 pour $M = 15$ et $N = 30\,000\,000$. La variance $\|\hat{g}_M - g_M^*\|_2^2$ vaut 0,0032 pour l'estimateur spectral et 0,0024 pour l'estimateur des moindres carrés.

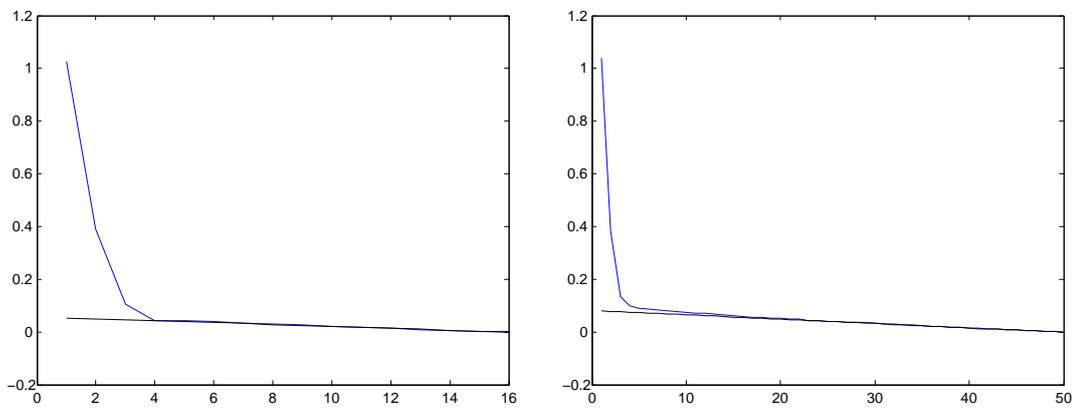


FIGURE 11 – En bleu, valeurs singulières de $\hat{\mathbf{P}}_M$ triées par ordre décroissant, pour $M = 16$ à gauche et $M = 50$ à droite, dans le scénario 1, pour $N = 19998$. En noir, régression linéaire sur les $M/2$ plus petites valeurs propres. A gauche, 3 valeurs singulières dépassent deux fois la valeur prédite par la régression, d'où $\hat{K}_{\text{effectif}} = 3$. A droite, $\hat{K}_{\text{effectif}} = 2$.