

## Prédicteur de Bayes en classification binaire

On considère un  $n$ -échantillon de v.a.i.i.d.  $\mathcal{D}_n = \{Z_1, \dots, Z_n\}$  avec  $Z_i = (X_i, Y_i)$ . On suppose que les v.a.  $X$  sont issues d'un espace  $\mathbb{X}$ , que les v.a.  $Y$  sont issues d'un espace  $\mathbb{Y}$  et l'on se donne une loi de probabilité (inconnue)  $\mathbb{P}$  sur l'espace  $\mathcal{E} = \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ .  $\mathbb{P}$  est la loi de  $(X, Y)$  et également la loi jointe commune des  $(X_i, Y_i)$ .

Fonction de prédiction  $g \in \mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ . Fonction de perte  $l : \mathbb{Y}^2 \rightarrow \mathbb{R}_+$  telles que  $l(Y, g(X))$ . Le risque de  $g$  est

$$R(g) = R_{\mathbb{P}}(g) = \mathbb{E}[l(Y, g(X))] \quad (1)$$

Le prédicteur de Bayes est l'élément  $g^*$  de  $\mathcal{F}$  qui minimise la perte  $R(g)$ .

$$l(Y, Y') = \mathbb{1}_{Y \neq Y'} \quad (2)$$

$$\eta(x) = \mathbb{P}[Y = 1|X = x] = \mathbb{E}[Y|X = x] \quad (3)$$

$$g^*(x) = \mathbb{1}_{\eta(x) > 1/2} \quad (4)$$

1°.

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}[Y = 1|X = x] \\ &= \mathbb{P}[Y = g(X)|X = x] \mathbb{1}_{[g(x)=1]} + \mathbb{P}[Y = 0|X = x] \mathbb{1}_{[g(x)=0]} \\ &= \eta(x) \mathbb{1}_{[g(x)=1]} + (1 - \eta(x)) \mathbb{1}_{[g(x)=0]} \end{aligned}$$

2°.

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}[g(X) \neq Y|X = x] = 1 - \mathbb{P}[g(X) = Y|X = x] \\ &= 1 - \mathbb{P}[Y = 1, g(X) = 1|X = x] - \mathbb{P}[Y = 0, g(X) = 0|X = x] \\ &= 1 - \mathbb{1}_{[g(x)=1]} \mathbb{P}[Y = 1|X = x] - \mathbb{1}_{[g(x)=0]} \mathbb{P}[Y = 0|X = x] \\ &= 1 - \mathbb{1}_{[g(x)=1]} \eta(x) - \mathbb{1}_{[g(x)=0]} (1 - \eta(x)) \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}[g(X) \neq Y|X = x] - \mathbb{P}[g^*(X) \neq Y|X = x] \\ &= \eta(x) (\mathbb{1}_{[g^*(x)=1]} - \mathbb{1}_{[g(x)=1]}) + \dots \\ & \dots + (1 - \eta(x)) (\mathbb{1}_{[g^*(x)=0]} - \mathbb{1}_{[g(x)=0]}) \\ &= (2\eta(x) - 1) (\mathbb{1}_{[g^*(x)=1]} - \mathbb{1}_{[g(x)=1]}) \\ & \geq 0 \end{aligned}$$

par définition de  $g^*(x)$  et parce que  $2\eta(x) - 1 > 0 \iff g^*(x) = 1$ . D'où l'inégalité demandée :

$$\mathbb{P}[Y \neq g^*(X)|X = x] \leq \mathbb{P}[Y \neq g(X)|X = x] \quad (5)$$

3°.

$$\begin{aligned} R(g) &= \mathbb{E}[\mathbb{1}_{g(X) \neq Y}] \\ &= \mathbb{P}[g(X) \neq Y] = \mathbb{E}[(g(X) - Y)^2]. \end{aligned}$$

La dernière égalité provient du fait que d'une part,  $Y$  et  $g(X)$  valent 0 ou 1 uniquement et d'autre part l'indicatrice de  $[g(X) \neq Y]$  et  $(g(X) - Y)^2$  prennent les mêmes valeurs (0 ou 1) quelque soit les valeurs prises par  $g(X)$  et  $Y$  (0 ou 1).

$$\begin{aligned} \mathbb{1}_{[g(X) \neq Y]} &= (g(X) - Y)^2 \\ &= Y^2 + g(X)^2 - 2Yg(X) = Y + g(X)(1 - 2Y) \end{aligned}$$

(car  $Y = Y^2$ ). Ainsi,

$$\begin{aligned} R(g) &= \mathbb{E}[Y] + \mathbb{E}[g(X)(1 - 2Y)] \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[Y|X]] + \mathbb{E}[g(X)(1 - 2\mathbb{E}[Y|X])] \\ &= \mathbb{E}[\eta(X)] + \mathbb{E}[g(X)(1 - 2\eta(X))] \end{aligned}$$

Maintenant, si  $g = g^*$ ,

$$R^* = R(g^*) = \mathbb{E}[\eta(X)] + \mathbb{E}[\mathbb{1}_{\eta(X) > 1/2} (1 - 2\eta(X))]$$

Si  $\eta(X) > 1/2$  l'expression devient

$$\begin{aligned} R^* &= \mathbb{E}[\eta(X)(1 - 2\mathbb{1}_{\eta(X) > 1/2}) + \mathbb{1}_{\eta(X) > 1/2}] \\ &= \mathbb{E}[1 - \eta(X)] \end{aligned}$$

et de même, si  $\eta(X) < 1/2$ ,

$$R^* = \mathbb{E}[\eta(X)]$$

et donc

$$R^* = \mathbb{E}[\eta(X) \wedge (1 - \eta(X))]$$

Pour la seconde égalité, rappelons que

$$a \wedge b = (a + b - |a - b|)/2$$

de sorte que

$$R^* = \mathbb{E}\left[\frac{1}{2} (1 - |2\eta(X) - 1|)\right] = \frac{1}{2} (1 - \mathbb{E}[|2\eta(X) - 1|])$$

avec  $x \wedge y = \inf(x, y)$ .

4°.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(f(X) - Y)^2|X = x] &= \mathbb{E}[(f(x) - \eta(x) + \eta(x) - Y)^2|X = x] \\ &= (f(x) - \eta(x))^2 + 2(f(x) - \eta(x))\mathbb{E}[\eta(X) - Y|X = x] + \mathbb{E}[(\eta(X) - Y)^2|X = x] \\ &= (f(x) - \eta(x))^2 + \mathbb{E}[(\eta(X) - Y)^2|X = x] \end{aligned}$$

en passant à l'espérance des deux côtés de l'égalité (par linéarité de l'espérance), il vient :

$$\mathbb{E}[(f(X) - Y)^2] = (f(x) - \eta(x))^2 + \mathbb{E}[(\eta(X) - Y)^2].$$

Comme le terme  $(f(x) - \eta(x))^2$  est positif, on en déduit l'inégalité recherchée :

$$\mathbb{E}[(\eta(X) - Y)^2] \leq \mathbb{E}[(f(X) - Y)^2]$$

Quelque soit la fonction  $f$  de  $\mathbb{X}$  dans  $\mathbb{R}$ ,  $\eta(X)$  minimise donc bien l'erreur quadratique lorsque  $f(X)$  prédit  $Y$ .

5°. Si  $X$  suit une loi uniforme sur  $[0, 4c]$ , alors

$$\eta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$$

et

$$\begin{aligned} R^* &= \mathbb{E}[\eta(X) \wedge (1 - \eta(X))] = \mathbb{E}\left[\frac{c \wedge X}{c + X}\right] \\ &= \frac{1}{4c} \int_0^{4c} \frac{c \wedge x}{c + x} dx = \frac{1}{4} \ln\left(\frac{5e}{4}\right) \approx 0,3 \end{aligned}$$

6°. Soit F la fonction de répartition de X. On a :

$$\begin{aligned} F(x) &= \mathbb{P}[X \leq x] \\ &= \mathbb{P}[X \leq x | Y = 0] \mathbb{P}[Y = 0] + \mathbb{P}[X \leq x | Y = 1] \mathbb{P}[Y = 1] \\ &= 2x(1 - p) + xp = x(2 - p) \text{ si } x \in [0, 1/2] \\ &= (1 - p) + xp \text{ si } x \in [1/2, 1] \end{aligned}$$

On en déduit la densité de X en dérivant F :

$$\begin{aligned} f(x) &= 2 - p \text{ si } x \in [0, 1/2] \\ &= p \text{ si } x \in [1/2, 1] \end{aligned}$$

puis

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Y \mathbb{1}_{[X \leq x]}] &= \mathbb{E}[\mathbb{1}_{[X \leq x] \cap [Y = 1]}] \\ &= \mathbb{P}([X \leq x] \cap [Y = 1]) \\ &= \mathbb{P}([X \leq x] | [Y = 1]) \mathbb{P}[Y = 1] \\ &= px \end{aligned}$$

Nous allons maintenant calculer  $\eta(x)$ , en identifiant deux expressions différentes de  $\mathbb{E}[Y \mathbb{1}_{[X \leq x]}]$ .

Rappelons que

$$\eta(x) = \mathbb{E}[Y | X = x]$$

Par ailleurs, en utilisant la loi jointe de (X, Y) on a également

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Y \mathbb{1}_{[X \leq x]}] &= \int \int y \mathbb{1}_{[X \leq x]} \mathbb{P}_{(X,Y)}(dx, dy) \\ &= \int \int y \mathbb{1}_{[X \leq x]} \mathbb{P}_{(Y|X)}(x, dy) \mathbb{P}_X(dx) \\ &= \int \left( \int y \mathbb{P}_{(Y|X)}(x, dy) \right) \mathbb{1}_{[X \leq x]} \mathbb{P}_X(x) \\ &= \int_0^x \mathbb{E}[Y | X = u] f_X(u) du \\ &= \int_0^x \eta^*(u) f_X(u) du = px = \int_0^x p du \end{aligned}$$

Si  $x < 1/2$ , alors  $f_X(u) = 2 - p$  et par identification avec l'égalité précédente, on a  $\eta^*(x) = p/(2 - p)$ . De la même façon, si  $x > 1/2$ ,  $f_X(u) = p$  et par identification on a alors  $\eta^*(x) = 1$

Finalement, la loi conditionnelle de Y sachant  $[X = x]$  est une loi de Bernoulli :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[Y = 1 | X = x] &= \mathbb{E}[Y | X = x] = \eta^*(x) = 1 \text{ ou } p/(2 - p) \\ \mathbb{P}[Y = 0 | X = x] &= 1 - \mathbb{P}[Y = 1 | X = x] = 0 \text{ ou } 1 - p/(2 - p) \end{aligned}$$

et le prédicteur de Bayes s'exprime de la façon suivante :

$$g^*(x) = \mathbb{1}_{[\eta^*(x) > 1/2]}$$

La fonction  $\phi(p) = p/(2 - p)$  est croissante de 0 à 1 lorsque  $p$  varie de 0 à 1 et l'on voit facilement que  $\phi(p) > 1/2$  dès que  $p > 2/3$ . Ainsi,

$$g^*(x) = \begin{cases} \begin{cases} 0 & \text{si } p < 1/3 \text{ et } x \leq 1/2 \\ 1 & \text{si } p > 1/3 \text{ et } x \leq 1/2 \end{cases} \\ 1 & \text{si } x \geq 1/2 \end{cases}$$

7°. On utilise la formule de Bayes

$$\eta(x) = \mathbb{P}[Y = 1 | X = x] = \frac{\mathbb{P}[X = x | Y = 1] \mathbb{P}[Y = 1]}{\mathbb{P}[X = x]}$$

avec

$$\mathbb{P}[X = x] = \mathbb{P}[X = x | Y = 1] \mathbb{P}[Y = 1] + \mathbb{P}[X = x | Y = 0] \mathbb{P}[Y = 0]$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{k=0}^x \frac{(2\theta)^k}{k!} e^{-2\theta} p + \sum_{k=0}^x \frac{\theta^k}{k!} e^{-\theta} (1 - p) \\ &= \sum_{k=0}^x \frac{\theta^k}{k!} e^{-\theta} \times (e^{-\theta} 2^k p + (1 - p)) \end{aligned}$$

en remplaçant dans l'expression initiale de  $\eta(x)$ , on obtient le résultat.

## Minimisation de l'erreur stochastique

1°.  $g^*$  est par définition le minimiseur de  $R$  (sur  $\mathcal{G}$ ), d'où la première inégalité. De la même façon,  $\hat{g}_n$  est par définition le minimiseur de  $R_n$ , d'où la seconde inégalité.

2°. Il est clair que

$$R(\hat{g}_n) - R_n(\hat{g}_n) \leq \sup_{g \in \mathcal{G}} |R(g) - R_n(g)|$$

puisque  $\hat{g}_n$  est une fonction de  $\mathcal{G}$ . Et de la même façon,

$$R_n(g^*) - R(g^*) \leq \sup_{g \in \mathcal{G}} |R(g) - R_n(g)|$$

puisque  $g^*$  est également une fonction de  $\mathcal{G}$ .

3°. D'après la question 1°,  $R(\hat{g}_n) - R(g^*) \geq 0$ . Par ailleurs,

$$R(\hat{g}_n) - R(g^*) = R(\hat{g}_n) - R_n(\hat{g}_n) + R_n(\hat{g}_n) - R_n(g^*) + R_n(g^*) - R(g^*)$$

La différence du centre  $R_n(\hat{g}_n) - R_n(g^*)$  est négative par définition de  $\hat{g}_n$ . Donc

$$\begin{aligned} R(\hat{g}_n) - R(g^*) &\leq R(\hat{g}_n) - R_n(\hat{g}_n) + R_n(g^*) - R(g^*) \\ &\leq 2 \sup_{g \in \mathcal{G}} |R(g) - R_n(g)| \end{aligned}$$

d'après la question précédente.

## Inégalité oracle pour un dictionnaire fini

1°. L'interprétation a été vue en cours : l'écart de risque augmente avec  $M$ , mais à  $M$  fixé, il tend vers 0 lorsque  $n$  tend vers l'infini à la vitesse  $1/\sqrt{n}$ . L'inégalité ne fait absolument aucune hypothèse sur la loi  $\mathbb{P}$ . Le terme majorant dépend de  $M$  de façon logarithmique. Donc on peut prendre  $M$  assez grand (modèle riche) sans sur-apprentissage (par rapport à  $n$ ). L'inégalité représente un contrôle de l'erreur stochastique pour un dictionnaire fini, qui sert souvent dans les inégalités d'oracle; on peut comparer les performances de l'estimateur à celles du « meilleur » élément du dictionnaire, avec un terme de pénalisation dépendant de  $n$  et  $\ln M$ .

Cette inégalité est utilisée partout où un estimateur est choisi parmi un nombre fini de modèles. Elle est la base des méthodes de sélection de modèle, agrégation, apprentissage statistique, PAC-learning, etc.

2°. Une des versions de l'inégalité de Hoeffding est la suivante : si  $(V_i)_i$  est une suite de v.a.i.d. à valeurs presque sûrement dans  $[a, b]$ , alors  $\forall t > 0$ ,

$$\mathbb{P} \left[ \left| \bar{V}_n - \mathbb{E}[\bar{V}_n] \right| \geq t \right] \leq 2 \exp \left( -\frac{2nt^2}{(b-a)^2} \right)$$

la démonstration (que nous ne ferons pas maintenant) est très intéressante.

3°. On part de l'inégalité sur l'erreur stochastique : on sait que

$$R(\hat{g}_n) - R(g^*) \leq 2 \sup_{g \in \mathcal{G}} |R(g) - R_n(g)|$$

Donc,

$$\begin{aligned} \mathbb{P} [R(\hat{g}_n) - R(g^*) \geq 2t] &\leq \mathbb{P} \left[ 2 \sup_{g \in \mathcal{G}} |R(g) - R_n(g)| \geq 2t \right] \\ &= \mathbb{P} \left[ 2 \max_{m=1}^M |R(g_m) - R_n(g_m)| \geq 2t \right] \\ &= \mathbb{P} \left[ \bigcup_{m=1}^M [|R(g_m) - R_n(g_m)| \geq t] \right] \\ &\leq \sum_{m=1}^M \mathbb{P} [|R(g_m) - R_n(g_m)| \geq t] = \bullet \end{aligned}$$

Mais

$$R_n(g_m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(Y_i, g_m(X_i))$$

Posons alors  $V_i = h_m(X_i, Y_i) = l(Y_i, g_m(X_i)) \in [0, 1]$ . Ces  $V_i$  sont i.i.d. car les  $(X_i, Y_i)$  sont iid (et  $g_m$  est une fonction quelconque de  $\mathcal{G}$  qui ne dépend pas de l'échantillon). Par ailleurs, l'espérance de  $R_n(g_m)$  est égale à  $R(g_m)$ . On peut alors poser  $a = 0$  et  $b = 1$  et appliquer l'inégalité de Hoeffding :

$$\begin{aligned} \bullet &\leq \sum_{m=1}^M 2 \exp \left( -\frac{2nt^2}{(1-0)^2} \right) \\ &= 2Me^{-2nt^2} \end{aligned}$$

Pour avoir un majorant égal à  $\epsilon$ , il suffit alors de poser

$$\begin{aligned} \epsilon &= 2Me^{-2nt^2} \\ \iff t &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{n} \ln \left( \frac{2M}{\epsilon} \right)}. \end{aligned}$$

Finalement, pour obtenir l'inégalité demandée, il suffit de passer à l'évènement complémentaire.

## Arbres de décision

1°. C'est le premier arbre qui a le moins de risque de sur-apprendre, car il possède le moins de feuilles. C'est donc le modèle le moins riche.

2°.  $\mathcal{G}$  est la réunion des  $\mathcal{G}_i$ , donc  $\hat{g}_n \in \mathcal{G}$ . Supposons que  $\hat{g}_n \in \mathcal{G}_1$  ( $i = 1$ ). Alors le minimum est atteint sur  $\mathcal{G}_1 \subset \mathcal{G}$ , donc il coïncide avec celui de  $\mathcal{G}_1$ . On a alors

$$\begin{aligned} R_n(\hat{g}_1) &\leq R_n(\hat{g}_2) \text{ et } R_n(\hat{g}_1) \leq R_n(\hat{g}_3) \\ \Rightarrow R_n(\hat{g}_1) &= R_n(\hat{g}_n) \in \operatorname{argmin}_{g=\hat{g}_1, \hat{g}_2, \hat{g}_3} R_n(g) \end{aligned}$$

La démonstration est la même si l'on suppose  $i = 2, 3$ .

3°. Pour chaque observation, on détermine à quelle feuille elle appartient. Notons-les  $F_1, \dots, F_4$  de gauche à droite. On a, dans l'ordre des cases,

$$F_2 - F_3 - F_2 - F_3 - F_3 - F_3 - F_2 - F_2 - F_2 - F_3$$

avec 0 observations dans  $F_1$  et  $F_4$ . On définit  $\hat{g}_1$  sur  $F_1$  et  $F_4$  par tirage à pile ou face équitale.  $F_2$  contient 5 observations de labels : 0, 1, 1, 0, 1 donc  $\hat{g}_1 = 1$  est majoritaire.  $F_3$  contient 5 observations de labels : 0, 0, 1, 1, 0 donc  $\hat{g}_1 = 0$  est majoritaire sur cette feuille. Ainsi,

$$\hat{g}_1(x) = \mathbb{1}_{F_2}(x) + \epsilon \mathbb{1}_{F_1}(x)$$

où  $\epsilon$  est le résultat d'un tirage à pile ou face.

## Adaboost

Soit  $h_0 \in \mathcal{F}(\mathbb{X}, \mathbb{R})$ ,  $\phi(x) = e^x$  la perte boosting et  $A_n$  le  $\phi$ -risque. On cherche le couple  $(\hat{\alpha}, \hat{h})$  qui minimise ce  $\phi$ -risque :

$$(\hat{\alpha}, \hat{h}) = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0, h \in \mathcal{H}} A_n(h_0 + \alpha h) \quad (6)$$

L'expression à minimiser s'écrit

$$A_n(h_0 + \alpha h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \exp(-Y_i h_0(X_i) - \alpha Y_i h(X_i)) \quad (7)$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i e^{-\alpha Y_i h(X_i)} \quad (8)$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i e^{-\alpha Y_i h(X_i)} [\mathbb{1}_{[Y_i=h(X_i)]} + \mathbb{1}_{[Y_i \neq h(X_i)]}] \quad (9)$$

en posant (pour alléger les formules et sans perte de généralité) :

$$w_i = \phi(-Y_i h_0(X_i)) / \sum_{i=1}^n \phi(-Y_i h_0(X_i)) \quad (10)$$

qui ne dépend que de l'échantillon de données et de  $h_0$  (autrement dit on normalise les poids  $w_i$ ).

Puisque  $Y_i$  et  $h(X_i)$  sont à valeurs binaires ( $\pm 1$ ),  
 $Y_i = h(X_i) \iff Y_i h(X_i) = 1$  et de même,  
 $Y_i \neq h(X_i) \iff Y_i h(X_i) = -1$ . Ainsi,

$$\begin{aligned} (\hat{\alpha}, \hat{h}) &= \argmin_{\alpha \geq 0, h \in \mathcal{H}} \left( e^{-\alpha} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i \mathbb{1}_{[Y_i = h(X_i)]} + e^{\alpha} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i \mathbb{1}_{[Y_i \neq h(X_i)]} \right) \\ &= \argmin_{\alpha > 0} \left( (e^{\alpha} - e^{-\alpha}) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i \mathbb{1}_{[Y_i \neq h(X_i)]} + \frac{1}{n} e^{-\alpha} \right). \end{aligned}$$

$\forall \alpha \geq 0$ , le minimum est atteint quand

$$\hat{h} \in \argmin_h \sum_i w_i \mathbb{1}_{[Y_i \neq h(X_i)]}. \quad (11)$$

La forme de l'expression permet de minimiser séparément  $h$  et  $\alpha$ .  $\hat{h}$  étant choisi pour minimiser  $h$ , alors

$$\hat{\alpha} \in \argmin_{\alpha > 0} ((e^{\alpha} + e^{-\alpha})\epsilon + e^{-\alpha}) = \argmin_{\alpha} G(\alpha), \quad (12)$$

avec  $\epsilon = \sum_i w_i \mathbb{1}_{[Y_i \neq h(X_i)]}$ .

$G'(\alpha) = (e^{\alpha} - e^{-\alpha})\epsilon - e^{-\alpha}$  et  $G''(\alpha) = e^{\alpha}\epsilon + e^{-\alpha}(1 - \epsilon)$ .

Ainsi,  $G$  est convexe et sa dérivée s'annule en

$$\alpha = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - \epsilon}{\epsilon} \right) \quad (13)$$

que l'on choisit dans l'étape 3 de l'algorithme.

Il est important de noter que la perte Boosting  $l_b(x) = e^x$  est convexe et que  $l_b(x) \geq l_{b-1}(x)$ . Adaboost minimise cette perte en minimisant l'expression  $\sum_i w_i \mathbb{1}_{[\cdot]}$ .

## Bagging

On note  $(X, Y)$  une variable aléatoire suivant la loi théorique inconnue, et

$$f(x) = \mathbb{E}[Y | X = x]$$

la fonction de régression. Pour un estimateur  $h$  évalué en un point  $x$ , on rappelle la décomposition biais-variance :

$$\mathbb{E}[(h(x) - Y)^2] = \underbrace{(\mathbb{E}[h(x)] - f(x))^2}_{\text{biais}^2} + \underbrace{\mathbb{V}(h(x))}_{\text{variance}} + \sigma^2(x).$$

1°. Cas de  $M$  échantillons indépendants.

On dispose de  $M$  échantillons indépendants  $\mathcal{D}_{n,1}, \dots, \mathcal{D}_{n,M}$ , tous de taille  $n$ . Chaque échantillon sert à entraîner un estimateur de régression au sens des moindres carrés :  $h_1, \dots, h_M$ . On définit la moyenne empirique

$$\hat{h}_M(x) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M h_m(x).$$

Comme les  $h_m$  sont i.i.d.,

$$\mathbb{E}[\hat{h}_M(x)] = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \mathbb{E}[h_m(x)] = \mathbb{E}[h_1(x)],$$

d'où

$$\mathbb{B}(\hat{h}_M(x)) = \mathbb{B}(h_1(x)).$$

Le biais de  $\mathbb{B}(\hat{h}_M)$  est identique à celui d'un estimateur individuel.

Variance. Par indépendance :

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(\hat{h}_M(x)) &= \mathbb{V}\left(\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M h_m(x)\right) \\ &= \frac{1}{M^2} \sum_{m=1}^M \mathbb{V}(h_m(x)) \\ &= \frac{1}{M} \mathbb{V}(h_1(x)). \end{aligned}$$

La variance de  $\hat{h}_M$  décroît comme  $1/M$ .

2°. Cas bootstrap : un seul échantillon

On ne dispose plus que d'un seul échantillon

$$\mathcal{D}_n = \{(X_i, Y_i)\}_{i=1}^n.$$

On construit  $M$  échantillons bootstrap  $\mathcal{D}_{n,1}^*, \dots, \mathcal{D}_{n,M}^*$  en tirant  $n$  observations *avec remise* dans  $\mathcal{D}_n$  avec la loi uniforme. Pour chaque échantillon bootstrap, on calcule un estimateur  $h_m^*$  et on définit

$$h_M^*(x) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M h_m^*(x).$$

Analyse conditionnelle : conditionnellement à  $\mathcal{D}_n$ , les échantillons bootstrap  $\mathcal{D}_{n,m}^*$  sont i.i.d. suivant la loi empirique. Ainsi :

$$\mathbb{E}^*[h_M^*(x) | \mathcal{D}_n] = \mathbb{E}^*[h_1^*(x) | \mathcal{D}_n],$$

et

$$\mathbb{V}^*(h_M^*(x) | \mathcal{D}_n) = \frac{1}{M} \mathbb{V}^*(h_1^*(x) | \mathcal{D}_n),$$

où  $\mathbb{E}^*$  et  $\mathbb{V}^*$  désignent les espérances et variances prises uniquement par rapport au mécanisme de bootstrap.

Conclusion conditionnelle : pour un jeu de données fixé, moyenner les estimateurs bootstrap réduit la variance conditionnelle par un facteur  $1/M$ , sans modifier le biais conditionnel.

Comparaison avec le cas idéal : lorsque  $n$  est grand, la loi empirique est proche de la vraie loi : les propriétés biais-variance du bootstrap miment alors celles obtenues dans la question 1°. En pratique :

- le biais global de  $h_M^*$  reste proche de celui de  $h_1^*$  ;
- la variance décroît avec  $M$ , ce qui réduit l'erreur de généralisation pour des estimateurs instables (par exemple les arbres de régression).

Nom de la méthode : la procédure décrite (tirages bootstrap + moyenne des estimateurs) est le bagging.