

Sorbonne Université
Safran Aircraft Engines

École doctorale **École Doctorale Sciences Mathématiques de Paris Centre**
Unité de recherche **Laboratoire de Probabilités, Statistique et Modélisation**

Thèse présentée par **Cyprien Ferraris**

Soutenue le **25 novembre 2024**

En vue de l'obtention du grade de docteur de Sorbonne Université

Discipline **Mathématiques Appliquées**

Spécialité **Statistique**

**Estimation de la structure de
dépendance en grande dimension via
des modèles de graphes aléatoires :
applications au suivi et à
l'optimisation des contrôles en
production**

Thèse dirigée par Michel BRONIATOWSKI directeur
Annick VALIBOUZE co-directrice
Frédéric GUILLOUX co-encadrant
Mohamed ACHIBI encadrant industriel

Rapporteurs Eugen PIRCALABELU chargé de cours à l'UC Louvain
Cristophe AMBROISE professeur à l'Université d'Évry

Composition du jury

<i>Rapporteur</i>	Eugen PIRCALABELU	chargé de cours à l'UC Louvain	
<i>Examineurs</i>	Tabea REBAFKA	professeure à l'AgroParisTech	présidente du jury
	Stéphane GIRARD	directeur de recherche à l'INRIA Grenoble Rhône-Alpes	
	Catherine DUVEAU	ingénieure chez Safran Aircraft Engines	
<i>Invités</i>	Frédéric GUILLOUX	MCF à Sorbonne Université	
	Mohamed ACHIBI	ingénieur chez Safran Aircraft Engines	
<i>Directeurs de thèse</i>	Michel BRONIATOWSKI	professeur émérite à Sorbonne Université	
	Annick VALIBOUZE	professeure à Sorbonne Université	

Cette thèse a été préparée au

Laboratoire de Probabilités, Statistique et Modélisation

Sorbonne Université
Campus Pierre et Marie Curie
4 place Jussieu
75005 Paris
France

☎ +33 1 57 27 93 16

Site <https://www.lpsm.paris/>



Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes encadrants de thèse. Merci Annick pour ta rigueur et tes précieux conseils de rédaction et de présentation. J'ai beaucoup apprécié nos discussions pendant lesquelles j'ai toujours appris quelque chose. Merci beaucoup M Broniatowski pour tout le support et l'autonomie que j'ai pu avoir. Pour chacune de mes questions, j'ai toujours eu une réponse rapide et qui pousse à la réflexion. Un grand merci à toi Frédéric, pour nos très nombreux échanges tout au long de cette thèse. Tu as toujours eu des remarques qui ont amélioré ce travail et encouragé à aller plus loin. Je te remercie aussi pour nos discussions sur le monde d'aujourd'hui et de m'avoir fait réfléchir sur des questions que je ne m'étais jamais vraiment posé. Enfin, Mohamed, je te témoigne toute ma gratitude pour avoir misé sur moi et ce même avant cette thèse. Merci de t'être battu pour que cette thèse ait lieu malgré le contexte compliqué de l'époque. Merci de m'avoir accompagné dans la compréhension des problématiques industrielles et d'avoir apporté ton œil d'expert pour que cette thèse ait des applications concrètes.

Je remercie également Safran Aircraft Engines pour m'avoir permis de faire une thèse dans de super conditions, ce qui n'est pas donné à tout le monde. Merci à tous ceux qui ont rendu cela possible Mohamed, Augustin, Frédéric V., Frédéric B., Matthieu et Philippe. Merci à Otmane, Laurent, Marie, Mathieu et Omar de m'avoir aidé à mieux cerner les problématiques et particularités des problèmes industriels étudiés. Je remercie aussi tous mes collègues de chez Safran, qui participent à rendre chaleureuse l'ambiance de travail, ce qui aide beaucoup à travailler.

Je remercie grandement Christophe Ambroise et Eugen Pircalabelu d'avoir rapporté ma thèse. Merci d'avoir passé du temps pour relire mon manuscrit. Vos commentaires très pertinents vont me permettre d'améliorer ces travaux et de proposer de nouvelles pistes. Merci beaucoup Eugen d'avoir pris le temps de me faire des remarques pour améliorer la rédaction de cette thèse. Je remercie Catherine Dureau, Tabea Rebafka et Stéphane Girard d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Merci aussi à Stéphane Robin, Gérard Biau et Sylvain Le-Corff d'avoir fait partie de mon comité de suivi de thèse. Je souhaite aussi saluer le personnel administratif de Sorbonne Université qui m'a accompagné tout au long de cette thèse.

Merci à tous les doctorants du LPSM que j'ai pu rencontrer lors de cette thèse, Alexis, Ariane, Camila, Iqraa, Joseph, Ludovic, Miguel, Pierre et tant d'autres, et je remercie aussi ceux que j'ai pu croiser en conférence ou en séminaire tout au long de ces 3 années de thèse. J'ai été ravi de partager ces trois années avec vous.

Je tiens à remercier chaleureusement mes amis qui m'ont bien aidé à penser à autre chose que la thèse durant ces dernières années (et oui cela arrive) et qui m'ont encouragé tout au long de cette période! J'ai une pensée particulière pour Keanu, Paul et Raphael qui connaissent bien cette période aussi ardue qu'enrichissante.

Merci aussi à ma famille qui m'a toujours soutenue durant cette thèse et surtout qui m'a permis d'en arriver là.

Enfin, Camille, ma pacstenaire, comment te remercier pour tout ce que tu as fait pour moi durant ces années! Merci de m'avoir raisonné quand je passais mes soirées à travailler et merci de m'avoir motivé dans les moments où ma motivation était en berne. Sans toi cette thèse n'aurait pas été la même!

Estimation de la structure de dépendance en grande dimension via des modèles de graphes aléatoires : applications au suivi et à l'optimisation des contrôles en production

Résumé

L'usinage des pièces de moteurs d'avion nécessite des procédés de fabrication complexes. En effet, ces pièces doivent être conformes vis-à-vis de nombreuses spécifications. Pour s'en assurer, elles sont contrôlées une fois la fabrication terminée. Cette étape de contrôle est coûteuse, mais permet de récolter de nombreuses données dites de production.

L'objectif de cette thèse est d'exploiter ces données de production. D'une part, nous cherchons à mieux comprendre les procédés de fabrication et, d'autre part, à exploiter les dépendances au sens statistique entre les mesures afin d'optimiser le contrôle des pièces.

Pour cela, cette thèse propose différentes méthodes d'analyse de données pour modéliser et estimer la structure de dépendance des données de production. Ces analyses permettront alors de comprendre quels sont les facteurs à faire évoluer pour améliorer la production.

La première partie de la thèse est consacrée à l'étude de méthodes de classification pour des graphes aléatoires par blocs. Nous justifions l'application de cette catégorie de méthodes sur des matrices de corrélation pour mieux comprendre les liens entre les caractéristiques mesurées. Nous comparons aussi différentes méthodes de la littérature avec les nouvelles méthodes présentées. Ces dernières reposent sur l'utilisation de divergences à la place de la vraisemblance.

La seconde partie de la thèse est dédiée à l'utilisation de copules arborescentes afin d'estimer la probabilité de produire une pièce conformément à ses exigences. Nous développons une méthode innovante, utilisant les réseaux de neurones, pour estimer les paramètres des copules.

La troisième partie de cette thèse se fonde sur les deux précédentes pour proposer une méthode d'optimisation des contrôles effectués lors de la production.

Les différents résultats théoriques de cette thèse sont illustrés sur des pièces de moteurs d'avion, en particulier sur l'aube fan.

Mots clés : maîtrise statistique des procédés, modèle à blocs stochastiques, estimation robuste, copule, indice de capacité.

Abstract

The machining of aircraft engine parts requires complex manufacturing processes. Indeed, these parts must comply with numerous specifications. To ensure this, they are inspected once the manufacturing is completed. This inspection stage is costly but allows for the collection of numerous production data.

The objective of this thesis is to exploit these production data. On the one hand, we seek to better understand the manufacturing processes and, on the other hand, to exploit the dependencies, in a statistical sense, between the measurements in order to optimize part inspection.

To achieve this, this thesis proposes various data analysis methods to model and estimate the dependency structure of production data. These analyses will then help understand which factors need to be modified to improve production.

The first part of the thesis is dedicated to the study of classification methods for random block graphs. We justify the application of this category of methods to correlation matrices to better understand the links between the measured characteristics. We also compare different methods from the literature with the new methods presented. The latter are based on the use of divergences instead of likelihood.

The second part of the thesis is dedicated to the use of Vine Copulas to estimate the probability of producing a part in accordance with its requirements. We develop an innovative method using neural networks to estimate the Copula parameters.

The third part of this thesis builds on the previous two to propose a method for optimizing inspections carried out during production.

The various theoretical results of this thesis are illustrated on aircraft engine parts, particularly on the fan blade.

Keywords: statistical process control, stochastic block model, robust estimation, copula, capability index.

Table des matières

Remerciements	v
Résumé	vii
Table des matières	ix
Introduction	1
 I Résumé de la Thèse	 5
1 Contextes et Enjeux Industriels	7
1.1 Motivations industrielles	7
1.2 Types de données disponibles pour la thèse	11
1.3 Etat de l’art chez SAE	14
1.4 Exemples industriels récurrents	16
2 Outils Mathématiques	25
2.1 Graphes, modularité et modèles stochastiques par blocs	25
2.2 Divergence et robustesse	32
2.3 Copules et dépendance	38
3 Résumé des Résultats Obtenus	51
3.1 Modélisation mathématique	52
3.2 Estimation robuste dans les SBM	58
3.3 Etude des méthodes de la littérature : modularité et vraisemblance	62
3.4 Estimation de la capacité multivariée	67
3.5 Optimisation des contrôles en production	68
 II Travaux Effectués	 71
4 Divergence and Classification	73
4.1 Divergence in Discrete Graphs	73
4.2 Robust Estimation in Weighted Graphs	81
5 Fast and Efficient Block Model Classification	119
5.1 Modularity Clustering	119
5.2 Profile Likelihood on Dependent Graphs	144
6 Non-Conformity Rate of Several Characteristics	175
6.1 Non Conformity Rate and Copulas	175
6.2 Estimation of Simplified Vine Copulas	195

7 Application sur les Données Industrielles	209
7.1 Classification des Caractéristiques en Production	209
7.2 Optimisation des Contrôles en Production	214
Conclusion	225
Les apports	225
Les perspectives	225
Bibliographie	227
Graphes Déterministes et Aléatoires	227
Statistique	230
Indices de Capabilité	232
Copules	232
Optimisation et Algorithmique	234
Autres	235
III Annexes	237
Copyright	239
Acronymes et notations	241

Introduction

Cette thèse est le résultat d'un travail dans le domaine de la maîtrise statistique des procédés (MSP), domaine à mi-chemin entre la statistique et le génie industriel et très lié aux problèmes de contrôle qualité.

Elle est le fruit d'une collaboration entre le Laboratoire de Probabilité Statistique et Modélisation (LPSM) de Sorbonne Université et l'équipe MSP et Traitement des Données à la direction industrielle de Safran Aircraft Engines.

Le LPSM est une unité mixte de recherche dédiée aux mathématiques de l'aléatoire et des données. Il rassemble de nombreux chercheurs et chercheuses de Sorbonne Université, l'Université Paris Cité et du CNRS. Son personnel chercheur travaille sur des thématiques variées incluant notamment les probabilités : les structures et modèles aléatoires, ainsi que la statistique : les méthodes d'analyse de données et les algorithmes associés.

Safran Aircraft Engines est une entreprise aéronautique spécialisée dans la production de moteurs d'avion. Elle équipe en moteurs à la fois des avions civils et militaires. De plus, c'est une des entreprises les plus innovantes¹ en France avec environ 1000 demandes de brevet par sur les trois dernières années. L'équipe MSP et Traitement des Données est une équipe pluridisciplinaire responsable du développement et de la mise à disposition des différentes usines, d'un système de collecte et d'analyse des données de production. Elle est aussi responsable du développement de nouvelles méthodes pour le suivi des données de production et l'optimisation des contrôles en production.

Cette thèse contribue à la modélisation des dépendances entre variables aléatoires notamment à l'aide de méthodes de classification de grands graphes. Elle est motivée par l'étude des dépendances, entre les mesures de différentes caractéristiques sur les pièces de moteurs d'avion. Pour cela, des résultats sur le partitionnement de graphes aléatoires et sur les copules sont mis en œuvre et approfondis.

La connaissance des dépendances entre les différentes caractéristiques contrôlées sur une pièce de moteur est primordiale. En effet, elle permet d'une part, de produire des indicateurs de suivi de production adaptés et d'autre part, d'optimiser au mieux les contrôles. Ce problème industriel est très intéressant d'un point de vue statistique. La détection de dépendances entre les différentes caractéristiques fait souvent intervenir des problèmes de grande dimension, car certaines pièces comme les carters sont fabriquées en très petite série, mais comportent plusieurs centaines de caractéristiques. De plus, les procédés de fabrication s'améliorant constamment, il est difficile de récupérer des jeux de données avec beaucoup de pièces. Ainsi, contrairement à la littérature de la MSP, où l'on suppose souvent disposer de beaucoup de données et peu de caractéristiques, c'est l'inverse qui se produit ici. Deux approches sont souvent utilisées en analyse de données pour résoudre les problèmes en grande dimension :

- 1) une méthode dite de réduction de la dimension est utilisée pour réduire le nombre de variables. L'étude du nombre réduit de caractéristiques n'est alors plus un problème de grande dimension ;
- 2) le problème général est divisé en sous problèmes.

Ici l'approche 2) sera considérée. L'idée principale étant de séparer les caractéristiques en groupes indépendants les uns des autres.

La démarche statistique mise en place a été pensée de manière à ce qu'elle puisse s'adapter à un maximum de situations pouvant apparaître dans l'industrie aéronautique. Cela implique des jeux de données comprenant plusieurs centaines de variables, avec un nombre d'observations pouvant aller de quelques dizaines à plusieurs milliers. L'objectif a donc été de proposer des méthodes assez générales, dont les applications ne se limitent pas à l'industrie aéronautique. De plus, elles ont été choisies de manière à répondre au besoin de rapidité d'exécution, propre au déploiement à grande échelle d'applications dans un grand groupe tel que Safran.

1. James, O. (2023, 20 mars) Pourquoi Safran est le champion tricolore des dépôts de brevets. L'Usine Nouvelle.

Ce travail ayant avant tout pour vocation d'être de nature statistique, une introduction détaillée de la problématique industrielle des sujets est présentée. Celle-ci explique l'intérêt, dans le domaine industriel, d'apporter une telle attention aux pièces produites et pas seulement au moteur.

Dans le chapitre 1, le contexte industriel particulier lié à l'aviation et à ses normes est présenté. Les enjeux industriels de cette thèse à l'ère du Big data et de l'usine 4.0 sont énoncés et des exemples de pièces de moteurs illustrant les gains potentiels de cette thèse sont donnés.

Le chapitre 2 fournit les concepts sur lesquels cette thèse se base. Cela commence par des modèles de graphes aléatoires ayant une structure de blocs ainsi que les outils pour estimer ces modèles. Des notions sur l'estimation robuste, en particulier en lien avec la famille des φ -divergences, sont données. Le chapitre se conclut par des fondamentaux sur l'estimation de la dépendance entre plusieurs caractéristiques à l'aide de copules.

Le chapitre 3 utilise les informations contenues dans les deux précédents chapitres pour résumer les travaux de cette thèse. Cela comprend la modélisation statistique considérée dans cette thèse, les différentes contributions aux domaines de la classification et l'estimation robuste sur des graphes aléatoires. Des applications industrielles pour le suivi et l'optimisation des contrôles en production y sont aussi présentées.

Le chapitre 4 résume les résultats obtenus sur la classification et l'estimation robuste pour des modèles de graphes aléatoires. L'idée novatrice de ce chapitre, est de remplacer le maximum de vraisemblance classiquement utilisé dans la littérature, par une méthode basée sur les divergences. Les divergences étant une famille de critères dont certaines possèdent des propriétés de robustesse à des erreurs de modélisation, comme la présence de valeurs aberrantes. Nous proposons de nouveaux critères dont nous étudions les propriétés théoriques et pour lesquels nous proposons un critère pour le choix du nombre de paramètres dans le modèle, ainsi qu'une méthode d'estimation.

Le chapitre 5 continue sur l'étude des méthodes de classification pour des graphes aléatoires. Mais cette fois-ci, pour des méthodes basées sur la vraisemblance. Bien que moins robuste aux mauvaises spécifications du modèle en général, elles présentent l'avantage d'être très rapides même appliquées à de très grands graphes. Le chapitre est découpé en deux parties. Dans la première partie, la méthode dite de la modularité est étudiée en utilisant son lien avec la vraisemblance d'un modèle de graphe aléatoire particulier. Cela permet alors de mieux comprendre ses avantages et ses limites, tout en proposant des solutions pour rendre le critère plus performant. La seconde partie considère l'étude de la vraisemblance de modèles aléatoires classiques dans le cadre de mauvaises spécifications du modèle. Sous certaines conditions, nous montrons théoriquement que ces mauvaises spécifications n'ont pas d'impact pour l'estimation des blocs dans le graphe. De plus, ce chapitre inclut une justification pour l'application de ces méthodes à la classification de matrices de corrélations. Ces matrices de corrélation représentent la dépendance entre les paires de caractéristiques.

Le chapitre 6 permet une modélisation plus fine des liens entre les caractéristiques à l'aide des copules, et en particulier, de la famille des copules arborescentes. Ces dernières sont utilisées pour estimer la probabilité de produire une ou plusieurs caractéristiques, voire la pièce elle-même, conformément du premier coup. Sur plusieurs centaines de caractéristiques, cette méthode prend plusieurs heures de calcul. Pour diminuer ce temps, nous proposons une borne inférieure utilisant une inégalité du type inclusion-exclusion, adaptée à la structure arborescente de la copule. Une application de ces méthodes à des données industrielles est aussi présentée. Ce chapitre contient aussi une nouvelle manière de procéder à l'estimation des paramètres d'une copule arborescente en réécrivant le problème comme celui de l'estimation des paramètres d'un réseau de neurones. Cela permet de tirer avantages des outils d'estimation extrêmement rapides, même avec beaucoup de paramètres, ainsi que des différents critères de la littérature. En particulier, les paramètres du modèle peuvent être appris en utilisant une méthode similaire à celle utilisée pour l'apprentissage des réseaux antagonistes génératifs.

Le chapitre 7 est une application d'une des méthodes de classification étudiée sur différentes pièces produites chez Safran Aircraft Engines. Ces exemples permettent d'illustrer le fait que, regrouper les caractéristiques ensemble avec une méthode purement statistique, permet tout de même de retrouver des informations physiques sur le procédé de fabrication de la pièce; et parfois de mettre en avant des corrélations inattendues par les experts métier. Enfin, une méthode pour la réduction du nombre de contrôles en présence de caractéristiques redondantes, d'un point de vue statistique, est proposée via une approximation de la structure de dépendance. La pertinence de cette approche est illustrée sur des données de production.

Contributions de la thèse

Chaque section de ce manuscrit présente des travaux, souvent indépendants les uns des autres. Les notations sont unifiées, exceptées pour les deux sections qui ont fait l'objet de publications. Les preuves des différents résultats sont données dans la même section que le résultat associé. Un résumé des travaux effectués est donné ci-dessous :

- la section 4.1 est un article présenté à la conférence *Stochastic Modeling Technics and Data Analysis* qui a eu lieu à Athènes en 2022,
- la section 4.2 présente un approfondissement des travaux présentés à Athènes. Une partie de ces résultats a été présentée à Florence lors de l'*IMS International Conference on Statistics and Data Science* en 2022 et à CAEN en 2024 lors du colloque EDMSA,
- les sections 5.1 et 5.2 sont des travaux en cours de finalisation,
- la section 6.1 est un article publié dans *Journal of Manufacturing Science and Engineering*,
- la section 6.2 est un travail en cours,
- la section 7.1 correspond à un travail réalisé dans le cadre d'un dépôt de demande de Brevet,
- la section 7.2.4 correspond à un travail industriel en cours.

Première partie

Resumé de la Thèse

Contextes et Enjeux Industriels

1.1 Motivations industrielles

La priorité de Safran Aircraft Engines (SAE) est de s'assurer que les produits fabriqués sont fiables. Cela concerne en particulier les moteurs d'avion. La fiabilité des moteurs passe avant même leurs performances, bien qu'elles restent un enjeu majeur. Afin de garantir la fiabilité des moteurs, de nombreuses étapes de contrôles ont lieu tout au long de la production. Cet accent sur la fiabilité, fait de l'avion le moyen de transport le plus sûr du monde¹.

Un moteur SAE doit répondre à un cahier des charges strict. Pour le tester avant sa livraison et sa mise en service, le moteur subit un test dit de réception. Il permet notamment de vérifier que le moteur atteint les performances du cahier des charges. Ce test de réception s'effectue en deux temps (Mourer, 2022). La première étape consiste en une vérification du comportement mécanique du moteur ; par exemple, on augmente progressivement la vitesse de rotation des aubes. La seconde étape consiste à vérifier que les objectifs fixés dans le cahier des charges sont bien respectés. Si ce n'est pas le cas, une analyse est menée afin d'appliquer les correctifs adaptés pour que le moteur les atteigne.

Dans le but de s'assurer qu'un moteur va passer le test de réception sans que des corrections soient nécessaires, les ingénieurs et experts des bureaux d'études mettent en place des modèles de simulations complexes pour être capables de modéliser le fonctionnement d'un moteur. Grâce à ces modèles, il est possible d'évaluer sa fiabilité et ses performances théoriques. Néanmoins, en pratique, chaque moteur est un concentré de technologies et est construit via un assemblage d'un très grand nombre de pièces. Il est donc très difficile de produire le moteur directement à partir du modèle de simulation. C'est pourquoi, les bureaux des méthodes ont pour travail de construire un plan de production, afin que les moteurs produits soient au plus proche du moteur théorique. Ainsi, les différentes exigences sur un moteur (que ce soit pour sa fiabilité ou sa performance) sont listées et exprimées à l'aide de différentes conditions, plus simples à vérifier lors de la production. On parle de **Condition Fonctionnelle Géométrique** (CFG). La plupart du temps, une CFG correspond à ce qu'une certaine quantité physique soit dans un intervalle, dit de spécification. Par exemple, une des CFG est le jeu entre une aube fan et le carter fan. Si le jeu est trop grand, alors les performances aérodynamiques du moteur en seront diminuées. A contrario, s'il est trop faible, l'aube risque de frotter contre le carter, ce qui risque d'endommager le moteur.

Une des difficultés, pour la vérification de ces CFG, est que sur le plan fourni pour la production, les pièces sont a priori 'parfaites'. Par exemple, une pièce circulaire sera un cercle parfait sur le plan (c.f. Figure 1.1). Seulement, la pièce, pouvant intégrer une forte complexité, n'aura jamais une forme parfaite (c.f. Figure 1.2). La prise en compte de ces imperfections dans la conception est primordiale pour garantir que les différentes pièces produites répondront aux exigences du cahier des charges. Cela consitue une tâche difficile, mais néanmoins importante. En effet, il est estimé qu'entre deux moteurs, la part de variabilité de leurs performances assignables à la production peut aller jusqu'à 30% (Mourer, 2022). De fait, un des objectifs de SAE est d'essayer de prédire les performances d'un moteur en test de réception à partir des données de production (Rejeb, 2023). L'idée pour parvenir à vérifier la conformité des CFG est de définir une **fermeture géométrique** pour chaque CFG. Cette fermeture géométrique consiste à lister tous les éléments du moteur qui ont un effet sur la CFG et à définir pour chacun d'eux un intervalle de tolérance. Ces intervalles permettent de s'assurer que, si toutes les mesures sont dans les intervalles de tolérance associés, alors la CFG associée sera conforme. Chaque pièce peut exercer une influence sur plusieurs CFG. De plus, il se peut que seulement une partie d'une pièce influe sur la CFG. Dans ce cas, seule la partie impliquée sera prise en compte dans la fermeture géométrique. Un élément d'une fermeture géométrique est appelé caractéristique ou cote.

1. Gates, D. (2022, 1 septembre). Global air travel last year : 22 million jet flights, just one fatal accident. The Seattle Times.

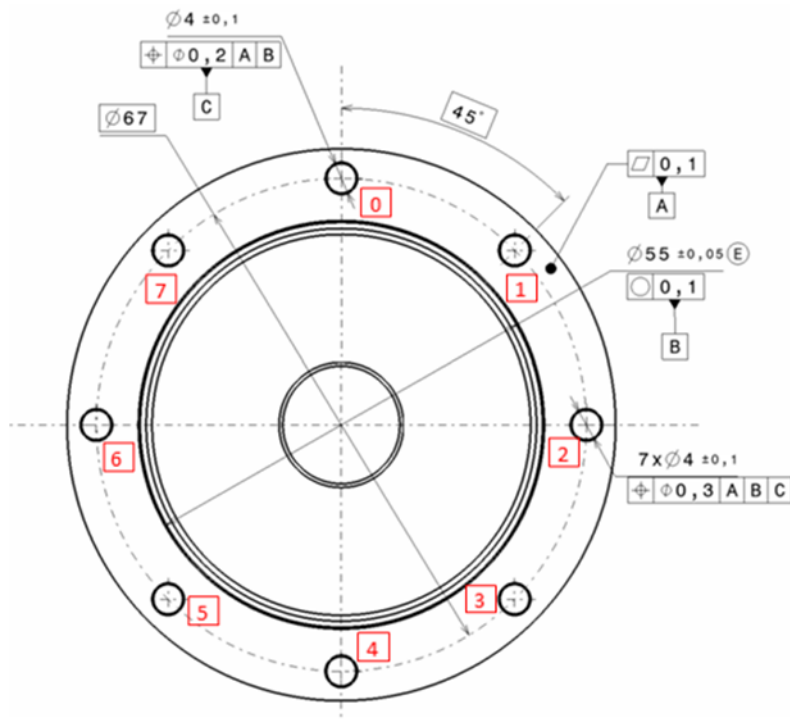
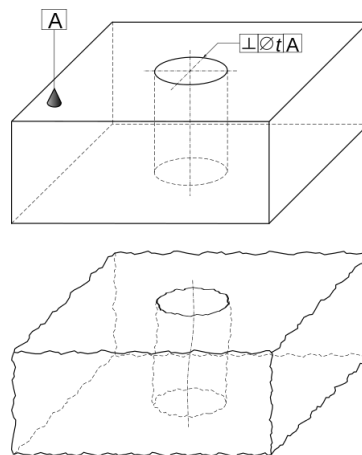


FIGURE 1.1 – Exemple de la cotation d’une pièce

FIGURE 1.2 – Exemple de la différence entre le plan théorique d’une pièce (a) et une réalisation de ce plan (b).
(© Wikipedia tolérancement géométrique)

Les caractéristiques peuvent être de nature variée. Par exemple, pour celle de la figure 1.1, pour une pièce basique, on a des diamètres $\varnothing$, une enveloppe (E), des localisations $\oplus$, une planéité $\square$ et une circularité $\bigcirc$.

La caractéristique “enveloppe” correspond à la forme parfaite qui contient la pièce réelle. Par exemple sur la figure 1.3, pour l’exigence d’enveloppe portant sur un cylindre, il faut que le diamètre d_i de la pièce réelle soit inclus dans le domaine de spécification ($D \pm t$).

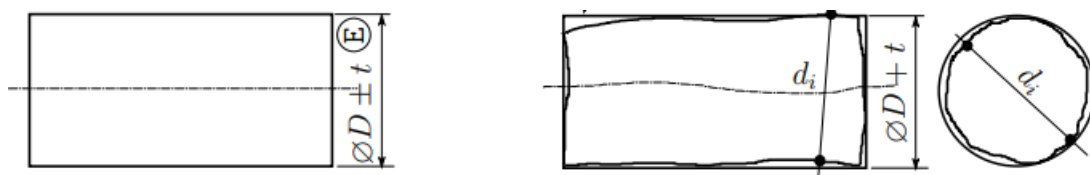


FIGURE 1.3 – Exemple de la définition d’une enveloppe pour le diamètre d’un cylindre (© (Mesnier, 2018))

La caractéristique de localisation correspond à un écart entre la position d’un élément par rapport aux

surfaces de références associées. Par exemple sur la figure 1.1, la localisation du trou n°0 est liée aux références A et B.

La liste des caractéristiques est nomenclaturée. Une présentation des différentes caractéristiques, est présente, par exemple, dans le cours de (Mesnier, 2018).

Les caractéristiques se divisent en deux catégories :

- les caractéristiques mécaniques, dites aussi structurantes ;
- les caractéristiques aérodynamiques.

Les caractéristiques ne sont pas toujours de même criticité. En effet, celles qui touchent à la fiabilité du moteur sont extrêmement importantes et nécessitent une attention particulière. D'autres, qui peuvent par exemple être liées uniquement au rendu visuel du moteur le sont moins. Pour chacune des caractéristiques, des spécifications sont formulées afin de garantir la conformité du produit final. Ces spécifications dépendent de plusieurs facteurs. Elles découlent d'une part, de l'implication de chaque caractéristique dans les différentes fermetures géométriques, et d'autre part, de la facilité à produire et à contrôler la caractéristique sur la pièce. Ces exigences prennent le plus souvent la forme d'intervalles de tolérance. On parle de limite de spécification bilatérale. Si l'on reprend la figure 1.2, on va notamment demander à ce que les diamètres des trous de la couronne soient compris entre 3,9 et 4,1 mm. Parfois, il arrive que la valeur doive seulement être comparée à une tolérance supérieure ou inférieure. On parle de limite unilatérale. Par exemple, une localisation étant bornée en valeur absolue, la spécification associée est composée uniquement d'une limite de tolérance supérieure. Sur la figure 1.2 le trou 0 a une tolérance supérieure de localisation à 0.2 mm et les trous 1 à 7 ont une tolérance supérieure de localisation à 0.3 mm.

Une pièce est dite **conforme** si toutes ses caractéristiques sont conformes. Cependant, il arrive parfois que la conformité d'une pièce découle de critères plus compliqués à vérifier. On parle alors de **critères complexes**. Deux cas classiques de critères complexes sont : les caractéristiques dites répétées et la condition du maximum/minimum matière, MMC (ISO, 2021b). On parle de caractéristiques répétées lorsqu'une pièce comporte plusieurs spécifications identiques, par exemple les diamètres sur une couronne de trous. Sur l'exemple explicatif en figure 1.1, il n'y a que 8 caractéristiques diamètre de spécification identique. Mais sur des pièces réelles, le nombre de diamètres avec une même spécification peut atteindre plusieurs dizaines. Dans cette situation, il arrive dans certains cas particuliers que l'on ne cherche pas la conformité de tous les diamètres en autorisant certains à dépasser raisonnablement des limites de spécification.

Cependant, avec la recherche de moteurs toujours plus performants et fiables, les pièces à produire sont de plus en plus complexes. Par exemple, il arrive que, par rapport à d'anciens moteurs, des fonctionnalités qui étaient remplies par plusieurs pièces différentes se retrouvent maintenant remplies par une seule. Cette complexité implique une augmentation substantielle du nombre de caractéristiques sur chaque pièce fabriquée. À titre d'exemple, sur une aube fan ou une VCI, la pièce comporte plusieurs centaines de caractéristiques, dont la conformité doit être absolument assurée pour déclarer la pièce conforme. Du point de vue de la fabrication de chaque pièce, cela complexifie la phase de production. Dès lors, il peut arriver que certaines pièces produites ne satisfassent pas les spécifications données.

Dans le cas où une pièce produite n'est pas conforme, trois situations sont possibles :

1. n°1 la pièce est rebutée,
2. n°2 la pièce est retouchée pour qu'elle soit conforme à la définition,
3. n°3 on demande au bureau d'étude (BE) si la pièce est acceptable en l'état. On parle de dérogation.

Le choix entre les options n°1 et n°2 se fait d'une part, s'il est possible ou non de la réparer et, d'autre part, suivant le coût de production d'une nouvelle pièce par rapport au coût de la retouche.

Mais, d'un point de vue industriel, la situation n°3 est la plus avantageuse pour la production car elle ne nécessite pas d'action corrective. On parle alors de dérogation. Cependant, accepter de monter une pièce qui ne vérifie pas les exigences peut causer des problèmes de fiabilité ou de performance. Pour savoir si une pièce est acceptable en l'état, i.e. qu'elle ne causera pas de problèmes de performance ou de fiabilité au cours de la durée de vie prévue du moteur, des simulations à l'aide des modèles théoriques physiques doivent être effectuées. Le fait de pouvoir accepter des dérogations peut, à première vue paraître surprenant, mais cela se conçoit assez naturellement. En effet, comme expliqué précédemment le processus qui permet de construire les intervalles de tolérance est très complexe. Ainsi, afin de rendre possibles les calculs, et de produire des tolérances ayant une forme simple d'intervalle, les bureaux d'études font souvent des hypothèses conservatives. Ainsi, il est possible que certains cas de figure rejetés par la spécification sur le plan puissent en fait conduire à un moteur de la qualité attendue. Cependant, d'un point de vue pratique, cette simulation à partir des modèles physiques peut prendre du temps, jusqu'à plusieurs jours, ce qui rend cette approche inadaptée de manière systématique. C'est pourquoi des approches alternatives sont étudiées, comme la validation via une étude statistique pour essayer de corréler les performances et la fiabilité du moteur avec les données de production. Pour le cas des dérogations, il est nécessaire de connaître la valeur exacte de la mesure.

Pour tirer le meilleur parti du processus de mesures, il ne suffit donc pas d'avoir uniquement la conformité, mais il faut aussi avoir la valeur de la mesure. De plus, on a besoin d'avoir des productions toujours plus précises. Et cela au point qu'il faille utiliser des machines de pointe afin d'atteindre les précisions attendues. En effet, il arrive souvent qu'il faille contrôler des pièces avec une précision de l'ordre du micromètre afin de vérifier leur conformité. Du point de vue de la production, on peut ensuite utiliser ces données pour détecter les dérives dans les procédés de production. Une autre application possible, est la construction d'indicateurs précis de la capacité à produire chaque caractéristique conformément à sa définition. L'étude de ces données de production est appelée **MSP**, pour **maitrise statistique des procédés**. C'est une discipline assez ancienne. On peut trouver des documents à ce propos dès le début des années 1920. L'un des pionniers, Shewart, alors au BellLab aux Etats-Unis, produisit un rapport sur une méthode de carte de contrôles, qui porte aujourd'hui son nom. Cette méthode statistique permet de détecter notamment certains décentrages de production. L'étude de l'évolution de la production est souvent appelée **suivi de production**.

Mais là où il y a quelques années encore, la collecte, le stockage et l'accès aux données de production en vue d'une analyse statistique était une tâche complexe et fastidieuse, aujourd'hui, grâce aux technologies du numérique, cela ne l'est plus. En effet, de nos jours, ces nouvelles technologies font partie intégrante des processus de fabrication. Une avancée importante, est que les machines de mesures sont capables de renvoyer des fichiers structurés, contenant toutes les informations nécessaires, qui peuvent ensuite être lues de manière automatique et être rentrées dans des bases de données facilement accessibles. On parle alors d'**usine 4.0**. L'existence de ces nouvelles bases de données massives et structurées, ainsi que leur accès facile permettent de nouvelles applications des données qui étaient jusque-là impossibles ou très complexes.

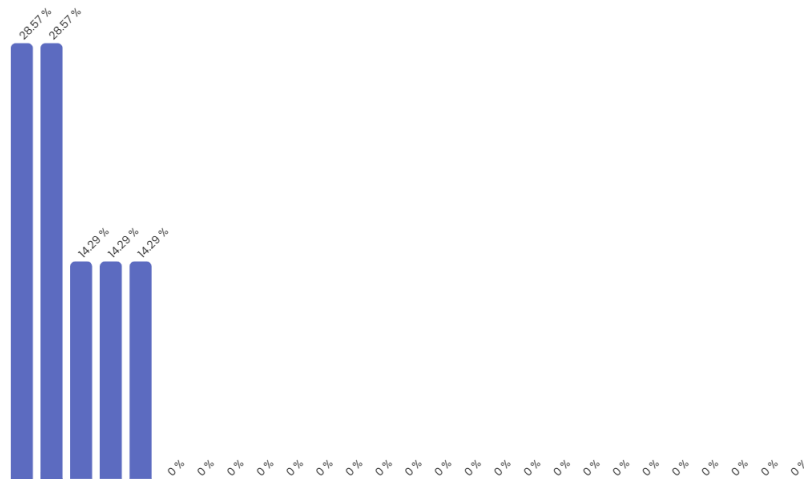


FIGURE 1.4 – Exemple d'un diagramme de Pareto

Par exemple, un des graphiques les plus utilisés en pratique s'appelle le diagramme de Pareto, souvent simplement appelé Pareto. Il consiste simplement en un diagramme à barres où chaque barre représente le nombre de défauts observés, ou leur proportion (c.f. Figure 1.4). Auparavant, cela pouvait prendre plusieurs jours pour construire ce type de graphique. Il fallait d'abord rassembler les différents rapports papier avec les mesures, puis rentrer les données et enfin, il était possible de construire le graphique. Alors qu'aujourd'hui, il suffit de deux minutes pour aller sur l'outil de MSP de SAE, choisir les données à visualiser et afficher le résultat. Mais cette abondance de données cause aussi des problèmes. En effet, les méthodes classiques de MSP ne sont pas adaptées au suivi de production pour des pièces avec un très grand nombre de caractéristiques ou des pièces avec de faibles cadences de production. La MSP a été beaucoup développée dans l'industrie automobile et électronique qui ont des cadences beaucoup plus importantes, contrairement à certaines pièces de moteurs d'avion. Une autre différence avec le contexte classique de la MSP, est que certaines pièces ont des centaines de caractéristiques. Alors, pour le suivi de production, il n'est pas possible de regarder une carte de contrôle pour chacune des caractéristiques de la pièce sans perdre beaucoup de temps. De la même manière, si on utilise simplement les méthodes statistiques usuelles qui envoient des alarmes de manière automatique, l'utilisateur risque de recevoir une avalanche d'alarmes dès qu'il y a un léger problème sur une pièce. Ce qui est contreproductif, car il risque de ne plus les regarder s'il y en a trop. Ainsi, le développement de méthodes permettant d'évaluer de manière synthétique la production est primordial. Cela conduit au premier objectif d'utilisation des données de la thèse :

A quel point la production fabrique-t-elle chaque pièce conformément au plan, sans retouches ?

(Objectif n°1)

Répondre à cette question nécessite une modélisation approfondie des données, qui porte sur le processus de production global. Un avantage pratique de cette modélisation pourrait être d'apporter une meilleure compréhension des liens entre les différentes caractéristiques d'une même pièce, et, plus généralement, une meilleure connaissance de la production. En effet, aujourd'hui il arrive que les procédés de fabrication soient trop complexes pour qu'on puisse dire avec certitude, à l'aide d'un modèle physique, si lors de la production une caractéristique est en relation avec une autre. La modélisation statistique, quant à elle, pourra alors permettre de mettre en avant ce type de relations. A terme, une autre retombée que l'on souhaite serait de pouvoir détecter des dérives de production à l'échelle de la pièce, ce qu'une meilleure connaissance de la production permettrait d'envisager. De plus, une modélisation statistique pourrait permettre de faciliter la priorisation des chantiers d'amélioration. En effet, si on connaît la capacité de produire chaque pièce conformément aux spécifications, on peut choisir de se concentrer sur l'amélioration des pièces les moins bien produites.

Une autre application d'une meilleure compréhension et modélisation de la production pourra être d'améliorer l'étape de contrôle. Il est aujourd'hui établi que le temps de mesure d'une pièce représente 25 à 30% de son temps de production. A cela, s'ajoute le fait que pour avoir des mesures aux précisions recherchées, il est nécessaire d'avoir des machines de haute technologie, très coûteuses. Ainsi, un des défis industriels actuel est l'optimisation des contrôles. Cela est d'autant plus vrai que ces dernières années (hors période COVID-19), les commandes d'avions ont considérablement augmentées. Le nombre de moteurs à produire augmente alors lui aussi et cela conduit à un accroissement des cadences de production (on parle aussi de ramp-up). Cette situation rend la recherche d'un processus de contrôle plus rapide encore plus importante. C'est le second objectif de cette thèse :

**Déterminer les redondances, en un sens statistique,
entre les mesures pour optimiser le temps de contrôle des pièces.** (Objectif n°2)

Pour résoudre cet objectif, l'idée est de ne mesurer qu'une partie bien choisie des caractéristiques d'une pièce. Cette optimisation des contrôles doit être réalisée tout en conservant la maîtrise du risque de non-conformité de la pièce. De plus, on veut que l'Objectif n°1 et l'Objectif n°2 puissent être faits en parallèle. C'est-à-dire que même sur une pièce où l'on ne mesurerait pas toutes les caractéristiques, on veut pouvoir estimer la capacité de la production à produire la pièce conformément aux exigences.

1.2 Types de données disponibles pour la thèse

Même si la première machine à mesurer tridimensionnelle (MMT) date des années 50, le contrôle des pièces a souvent été une étape manuelle. C'est-à-dire qu'un opérateur, à l'aide d'outils tels que des gabarits ou des comparateurs testait la conformité de la pièce. Ensuite, le résultat sur la conformité de la pièce était noté sur une feuille de papier. Ainsi, la récolte des données était une tâche longue et difficile. Cela était notamment dû au fait que beaucoup de données étaient au format papier ou stockées sur des fichiers différents. Aujourd'hui avec l'usine 4.0, les contrôles sont fait en majorité par des MMT ou d'autre outils de mesures, connectés à un ordinateur, qui peuvent remonter les données de contrôles dans un fichier informatique. Les nombreuses données ainsi récoltées peuvent alors facilement être mise dans des bases de données puis exportées sous forme de tableaux. Comme exemple de tableau de données que l'on peut extraire des bases, on a par exemple le tableau 1.1. Suivant les applications, toutes les informations alors disponibles ne sont pas toujours nécessaires.

Date de fabrication	-	-	-	-	-
Date de contrôle					
N° pièce	1	1	1	1	2
N° série					
Nom de la caractéristique	Diamètre 1	Diamètre 2	Diamètre min	Localisation max	Localisation max
Type de la caractéristique	Mesure (XML)	Mesure (XML)	Conformité (PLM)	Conformité (PLM)	Conformité (PLM)
Valeur mesurée	5.213	5.198	5.167	0.083	0.082
Nominal	5.2	5.2	5.2	0	0
Tolérance inférieure	5.1	5.1	5.1	-	-
Tolérance supérieure	5.3	5.3	5.3	0.1	0.1
Machine de production					
Usine de production					
Unité					
Description					

TABLEAU 1.1 – Exemple du format de données disponible

On fait l'hypothèse que la production n'évolue pas au cours du temps, car les procédés de fabrication et de contrôles sont stables, i.e. il n'y a pas de facteurs extérieurs, température, machines, opérateurs qui changent au fil de la production en l'impactant. Ainsi, par exemple, pour un diagramme de Pareto, la date n'est pas importante. A contrario, la date de production est primordiale pour regarder s'il y a des changements au fil du temps sur une carte de contrôle. Pour la carte de contrôle, il est souvent inutile de tenir compte des limites de tolérance.

Les données de production ne sont pas fondamentalement différentes de données qui pourraient être utilisées dans d'autres domaines. Mais il y a quand même quelques particularités. Une première chose importante est de comprendre la différence entre les types de caractéristique (Mesure et Conformité). Pour cela, reprenons l'exemple simplifié donné en Figure 1.1. Sur cet exemple, il y a une couronne de huit trous pour lesquels on s'intéresse à leur diamètre et leur localisation. Les limites de spécifications sont identiques pour les diamètres des huit trous et pour sept des localisations : ce sont les caractéristiques répétées évoquées plus haut. Pour juger de la conformité de la pièce par rapport aux exigences sur ces diamètres, il suffit de connaître la valeur du plus grand des diamètres et celle du plus petit. Ainsi, si les valeurs minimale et maximale sont dans les tolérances, alors tous les diamètres sont conformes, sinon au moins un des diamètres ne respecte pas ses spécifications et la pièce n'est pas conforme. Pour les valeurs individuelles des diamètres, on parle de caractéristiques mesurées dites XML. Pour les valeurs du minimum et du maximum des diamètres, on parle de caractéristiques de conformité dites PLM. Il peut arriver qu'une caractéristique soit à la fois mesurée et de conformité.

L'intérêt d'avoir les mesures XML en plus des mesures PLM est que, si l'on souhaite améliorer le procédé de fabrication de la caractéristique PLM, il est souvent nécessaire d'agir sur les caractéristiques XML liées à la caractéristique PLM. De plus, dans le cas de la surveillance de l'évolution de la production, il est plus logique de regarder les caractéristiques XML plutôt que les PLM. En effet, ces dernières peuvent être une combinaison complexe de caractéristiques. Alors, même si regarder les caractéristiques PLM peut permettre de détecter des dérives, il se peut qu'elles soient une combinaison de plusieurs caractéristiques usinées, et il ne sera pas possible de savoir quelles sont les usinages qui posent problèmes. Comme expliqué précédemment, les tolérances peuvent être bi/unilimites. Il est intéressant de noter que le cas unilimite peut être vu comme un cas bilimite où l'une des deux tolérances est une limite infinie. Dans la majorité de cette thèse, on fera l'hypothèse que les spécifications prennent la forme d'intervalles. Dans les autres cas, où les spécifications ne sont pas sous la forme d'intervalle, on parle de critères complexes.

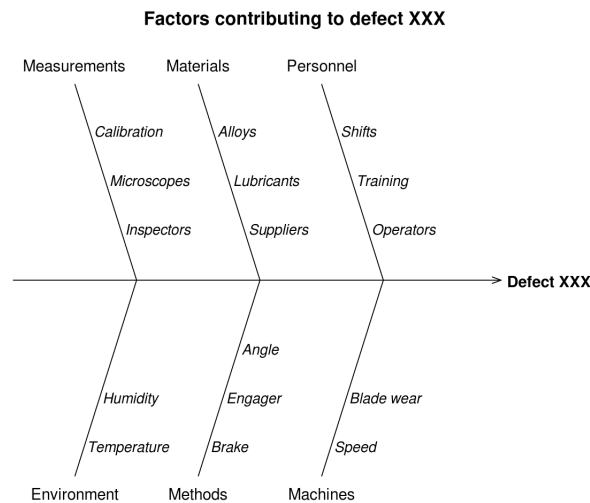


FIGURE 1.5 – Exemple de diagramme de causes et effets (Diagramme de causes et effets, Wikipedia ©)

Une autre hypothèse que l'on fait sur les données est qu'elles sont stables au sens dit 6M. Pour cela, l'approche la plus classique est de réaliser le diagramme de causes et effets, aussi appelé diagramme d'Ishikawa (c.f. Figure 1.5). La stabilité au sens 6M signifie qu'il n'y a pas de causes de variations « maîtrisables » non prises en compte, comme par exemple des usines différentes. C'est le cas pour les aubes Fan produites dans des usines différentes. Il arrive que, sur certaines caractéristiques, il y ait des différences entre les productions des différentes usines. Ce phénomène est illustré en figure 1.6, où la densité de probabilité de la production d'une caractéristique est affichée en fonction de l'usine d'origine des pièces. On voit alors très clairement deux populations différentes.

Ainsi, pour l'**Objectif n°1** de la thèse qui correspond à modéliser la conformité, il suffit de connaître les valeurs des caractéristiques de conformité, ainsi que les limites de tolérances. Cependant pour l'**Objectif n°2**, il est nécessaire d'avoir des informations supplémentaires. Typiquement, pour les diamètres, si on essaye de prédire le diamètre minimal à partir du diamètre maximal, on va probablement avoir une très bonne corrélation

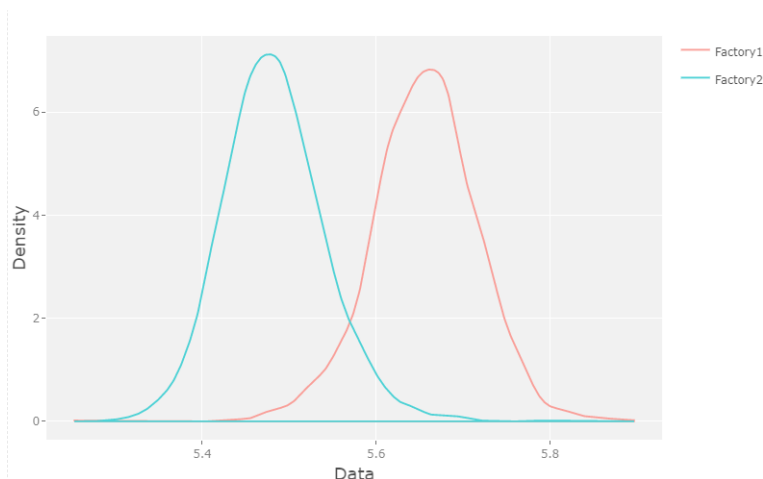


FIGURE 1.6 – Exemple de causes de variabilité de la production : l’usine de production

Numéro	Elément	Nature	Tolérance	Référentiel
001	B	Diamètre	t1	A, B
002	Cylindre 1	Diamètre	t2	
003	Cercle 1	Circularité	t3	
004	Position 1	Localisation	t4	
005	A	Planéité	t5	

TABLEAU 1.2 – Exemple d’une partie du tableau des caractéristiques sur un couvercle d’huile

entre les deux. En effet, s’il est produit avec le même outil, le diamètre va dépendre presque exclusivement du diamètre de l’outil d’usinage. Mais en terme de temps de mesure, on ne va pas en gagner puisque pour mesurer le diamètre maximal, il faut connaître le diamètre de chaque trou et donc tous les mesurer. C’est pourquoi il est nécessaire de prendre en compte toutes les données disponibles, i.e. les caractéristiques XML et pas seulement PLM. En plus de ces données, il est primordial d’avoir aussi des informations sur la manière dont la pièce est mesurée ainsi que sur les différents temps de mesures. Tout cela peut être représenté dans un graphe orienté dit **graphe de mesures**. A titre d’exemple, on peut regarder un sous-ensemble des caractéristiques du couvercle d’huile (c.f. Tableau 1.2). Sur cet exemple, 5 caractéristiques (001, 002, ... 005) sont “mesurées”. Cependant, il arrive parfois que la mesure d’une caractéristique ne puisse pas être obtenue sans avoir mesuré au préalable d’autres caractéristiques. Sur le couvercle d’huile, sont mesurées des éléments géométriques : axes, cylindres, plans, cônes, etc. On obtient alors le graphe de mesures donné en figure 1.7, où les caractéristiques sont en bleu et les éléments géométriques sont en orange. Et c’est ensuite, à partir de ces éléments géométriques, que sont déduites les caractéristiques. Ainsi, sur notre exemple, les mesures 005, 002, 003 et 001 ne dépendent que d’un seul élément géométrique. Cet élément géométrique peut aussi être commun à plusieurs caractéristiques, comme l’élément *B* pour les caractéristiques 003 et 001. De plus, une même caractéristique peut dépendre de plusieurs éléments, comme la caractéristique 004 qui dépend des trois éléments géométriques *A*, *B* et Cylindre 2.

Ainsi, par exemple, dans le cas où l’on pourrait justifier de ne mesurer que la caractéristique 004 et de prédire les autres, aucun gain de temps ne serait réalisé. En particulier, si une optimisation doit être faite sur cet exemple, pour qu’il y ait un gain de temps, la caractéristique 004 devra obligatoirement ne pas être mesurée. De plus, si l’on décide de mesurer les caractéristiques 001, 002, 003 et 005, alors cela nécessite de mesurer toutes les références et donc en particulier, on aura aussi la valeur de la caractéristiques 004. Donc à nouveau aucun gain de temps ne sera effectué.

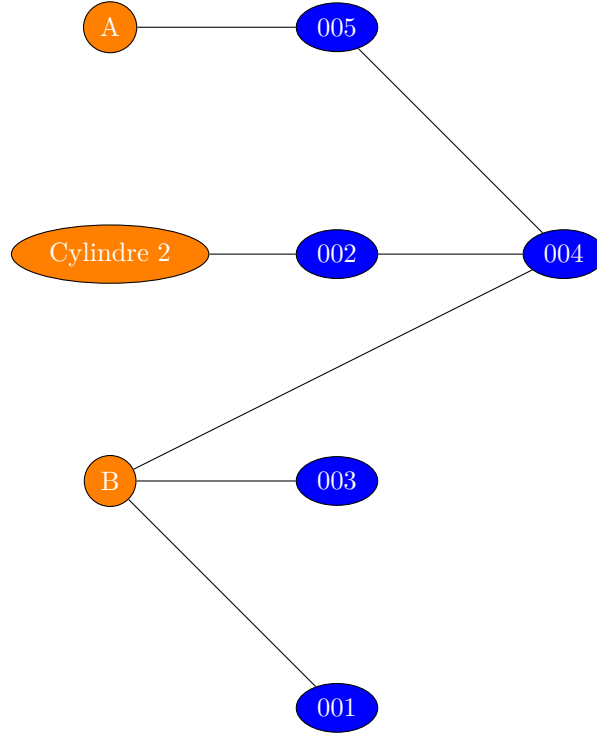


FIGURE 1.7 – Exemple de graphe de dépendance des mesures

1.3 Etat de l'art chez SAE

Aujourd'hui, plusieurs méthodes de MSP sont déjà appliquées chez SAE. Cependant, comme nous allons le voir, elles ne sont pas suffisantes pour résoudre les problèmes évoqués précédemment.

Commençons par regarder la manière dont la conformité est évaluée. Chez SAE aujourd'hui, la conformité des procédés de fabrication est évaluée individuellement pour chaque caractéristique des pièces. Pour ce faire, deux indices, dits de **capabilité**, sont particulièrement utilisés : le Cp et le Cpk . Ils ont été initialement définis dans le cas d'un procédé gaussien de moyenne μ et de d'écart-type σ (Kane, 1986) :

$$Cp = \frac{USL - LSL}{6\sigma} \quad (1.1)$$

$$Cpk = \min \left\{ \frac{USL - \mu}{3\sigma}, \frac{\mu - LSL}{3\sigma} \right\} \quad (1.2)$$

pour une caractéristique qui a pour intervalle de spécification $[LSL, USL]$

Dans le cas où il n'y a qu'une seule limite de spécification, le Cp n'est pas défini. Le Cpk reste quant à lui défini en prenant $LSL = -\infty$, s'il n'y a pas de limite inférieure ou $USL = +\infty$, s'il n'y a pas de limite supérieure. De plus, le Cp suppose implicitement que la loi de la production est centrée sur le milieu de l'intervalle de spécification. Or ce n'est pas toujours le cas. Ainsi, chez SAE, le Cpk est particulièrement utilisé. Cependant, chez SAE plus de 50% des lois de probabilité des procédés de fabrication ne sont pas gaussiennes. De fait, ces critères ne sont pas adaptés pour tous les cas de figure. Parmi les nombreuses généralisations de ces critères (sans hypothèse sur la loi des données), SAE a choisi d'utiliser les indices suivants (Croquelois et al., 2022) :

$$Cp = \frac{\Phi^{-1}(P_u) + \Phi^{-1}(P_l)}{6} \quad (1.3)$$

$$Cpk = \frac{1}{3} \Phi^{-1}(\min\{P_u, P_l\})$$

où $P_u = \mathbb{P}(X \leq USL)$ et $P_l = \mathbb{P}(X \geq LSL)$ sont appelées **probabilités de conformité** et Φ est la fonction de répartition de la loi Gaussienne centrée réduite.

Cette généralisation a l'avantage de coïncider avec la définition du Cp et du Cpk dans le cas gaussien. Elle permet aussi des comparaisons entre les productions. En effet, comme ces indices sont définis en fonction des probabilités de conformité, si une production a des probabilités de conformité plus importantes, alors ses indices de capabilités seront meilleurs. Ainsi, deux productions, même de lois différentes, ont le même Cpk si et seulement si, elles ont le même taux de conformité (on entend ici taux de conformité comme $\min\{P_l, P_u\}$). Pour

Nombre de caractéristiques	Ppm par caractéristiques	Cpk par caractéristiques	Corrélation de Pearson entre les caractéristiques	Ppm pièce
100	520	1.16	0	25 588
100	2700	1	0	127 143
100	2700	1	0.9	10 444

TABEAU 1.3 – Exemple de l'importance de la corrélation sur la capacité d'une pièce en terme de Ppm (pièces par million non conformes)

ces indices, il est donc nécessaire d'estimer P_u et P_l . Usuellement, les valeurs de non conformité $1 - P_u$ et de $1 - P_l$ devraient être inférieures à 0.00135, ce qui correspond à $Cpk \geq 1$. Pour certaines caractéristiques critiques, cette limite est abaissée à 0.000032, ce qui équivaut à $Cpk \geq 1.33$. L'estimation d'un point de vue statistique correspond alors à un problème d'estimation d'évènements rares. Or, le nombre d'observations disponibles dans les jeux de données ne permet que rarement d'appliquer les méthodes statistiques adaptées aux évènements rares. Pour obtenir des estimations raisonnables, même pour de faibles tailles de jeux de données, une méthode basée sur un mélange de lois de Student a été développée (Croquelois et al., 2022).

Cependant, ce qui est important n'est pas seulement de savoir de manière individuelle la probabilité que chaque caractéristique soit conforme. En effet, l'objectif de la production est que la pièce entière soit conforme. C'est-à-dire que toutes les caractéristiques soient conformes en même temps. Ou, dans certains cas plus complexes, la conformité de la pièce est définie comme une fonction des caractéristiques. Pour rappel, cela peut être le cas sur certaines couronnes de trous qui seront déclarées conformes même si individuellement, tous les trous ne sont pas conformes à leurs spécifications individuelles. Mais, sauf mention contraire, on ne se placera pas dans un cas avec des critères complexes et on se limitera donc au cas où on souhaite que toutes les caractéristiques soient conformes simultanément. Dans ce cas, il est nécessaire de prendre en compte la structure de dépendance entre les différentes caractéristiques pour calculer les probabilités de conformité. En effet, si l'on considère une pièce avec 100 caractéristiques, que la production a pour distribution une loi normale multivariée centrée sur le nominal, les taux de conformité de chaque caractéristique peuvent ne pas refléter celui de la pièce (c.f. Tableau 1.3). En effet, même si individuellement le premier cas a de meilleurs Cpk , en terme de conformité de la pièce, c'est le dernier cas avec une présence de dépendance qui présente le moins de pièces non conformes au final.

De fait, pour développer un estimateur de la conformité et répondre à l'Objectif n°1, il est nécessaire d'avoir une méthode d'estimation de loi multivariée.

Intéressons nous maintenant au problème d'optimisation qui correspond à notre Objectif n°2. Chez SAE, deux approches statistiques pour l'optimisation des contrôles ont été développées.

La première est appelée optimisation par capacité et est basée sur le taux de non-conformité. Elle permet, lorsque le taux de non-conformité est plus faible que sa valeur cible, par exemple 0.00135, de ne pas mesurer toutes les pièces. Plus exactement, il est possible de définir une fréquence d'échantillonnage f , telle que si l'on mesure seulement $(100 \cdot f)\%$ de la production, on aura la garantie que le taux de non-conformité (en moyenne) de la population échantillonnée soit inférieur à celui de sa valeur cible. Néanmoins, la limite de cette approche est qu'elle ne peut s'appliquer aujourd'hui qu'à une seule caractéristique par pièce, alors que ces dernières peuvent en comporter plusieurs centaines. Le gain de temps produit peut alors être négligeable par rapport au temps de mesure globale de la pièce. C'est pourquoi une amélioration à apporter pourrait être de généraliser cette méthode dans le cas où l'on échantillonnerait plusieurs caractéristiques par pièce, voire une pièce entière si la production le permet.

La deuxième méthode d'optimisation, dite par corrélation, consiste contrairement à l'optimisation par capacité à mesurer en partie toutes les pièces. L'idée est que si les caractéristiques d'une pièce sont fortement corrélées entre elles alors il est possible, à partir d'une caractéristique, d'en prédire une autre. Dans ce cas, en réduisant la taille de l'intervalle de spécifications, de sorte que la probabilité de rater un défaut soit faible (dans un sens à définir), on peut ne pas tout mesurer (c.f. Figure 1.8).

Actuellement, le principal défaut de cette approche est que le choix des caractéristiques à mesurer est fait manuellement, en se basant uniquement sur les corrélations bivariées. Une amélioration de la méthode actuelle serait de proposer une méthode qui consisterait, pour un nombre donné de caractéristiques, de choisir de manière automatique les caractéristiques à mesurer, pour obtenir un temps de contrôle de la pièce le plus faible possible.

Remarque 1.1. *On peut remarquer que cette approche a d'autres applications, notamment pour le suivi de production. En effet, parfois sur une pièce, plusieurs caractéristiques sont très fortement corrélées. Alors, si l'on veut suivre la production, il n'est pas forcément nécessaire d'afficher toutes les caractéristiques, mais en afficher une seule peut suffire à analyser les éventuelles dérives de production sur l'ensemble des caractéristiques dépendantes.*

Enfin, afin de mieux comprendre les procédés de fabrication et de détecter la présence de dépendance entre les caractéristiques, un outil de clustering a été développé chez SAE. Cet outil, basé sur la classification ascendante

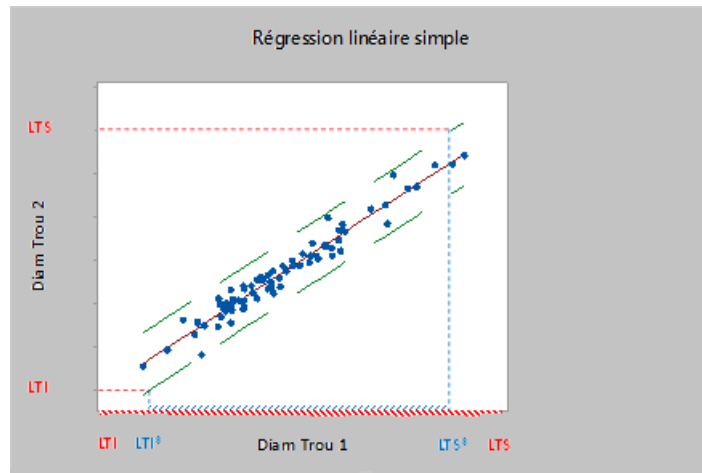


FIGURE 1.8 – Illustration du fonctionnement de l'optimisation par corrélation

hiérarchique (CAH) appliquée à la matrice de corrélation de Spearman, permet de construire des blocs de caractéristiques tels que les variables dans ces blocs soient fortement dépendantes. De plus, afin que la méthode puisse être utilisée de manière automatique, un critère de sélection pour le nombre de classes a été développé, comme une modification de l'indice de Silhouette. Cet indice représente, pour une partition donnée, une mesure moyenne de la cohésion d'un point par rapport aux autres membres de sa classe. La combinaison de la CAH et de l'indice de Silhouette permet d'effectuer des classifications sur des centaines caractéristiques en seulement quelques minutes.

Une fois ces groupes construits, il est notamment possible de regarder si on peut utiliser le principe d'optimisation des contrôles par corrélation.

Afin de proposer une méthode de résolution de ces objectifs, nous proposons une modélisation mathématique qui permet de prendre en compte les spécificités du problème. Cette modélisation est présentée en section 3.1.

Avant de voir les notions mathématiques nécessaires à la compréhension de cette thèse au chapitre 2 et les principaux résultats au chapitre 3, nous présentons deux pièces importantes pour cette thèse.

1.4 Exemples industriels récurrents

Au départ de la thèse, l'idée initiale était de travailler uniquement sur une pièce du moteur LEAP appelée virole de carter intermédiaire (VCI), présentée en section 1.4.1 et illustrée en figure 1.9. Cette pièce a l'avantage de représenter une grande partie des différentes particularités des pièces produites par SAE. Notamment, les faibles cadences (environ 3 pièces par semaine) et un très grand nombre de caractéristiques PLM (plus de 400). Néanmoins, à la suite de la crise du COVID-19, certaines chaînes de production ont été réorganisées. A la suite de ces changements, la VCI n'est plus produite sur le site SAE de Corbeil-Essones, ce qui a limité les échanges avec les experts métiers. C'est pourquoi, au cours de la thèse, il y a eu une réflexion sur la pertinence de l'étude de la VCI. Ainsi, on présentera quelques applications des méthodes sur cette pièce. Mais la majorité des illustrations des méthodes qui seront présentées sont basées sur une autre pièce du moteur : l'aube fan. Cette pièce, caractéristique du moteur, permet d'étudier des comportements propres à des pièces ayant des fonctions aérodynamiques. L'influence des caractéristiques géométrique sur les performances moteurs a notamment été étudiée par (Rejeb, 2023). D'autres pièces, qui ne seront utilisées que dans un cas particulier d'applications ne sont pas présentées ici.

1.4.1 VCI

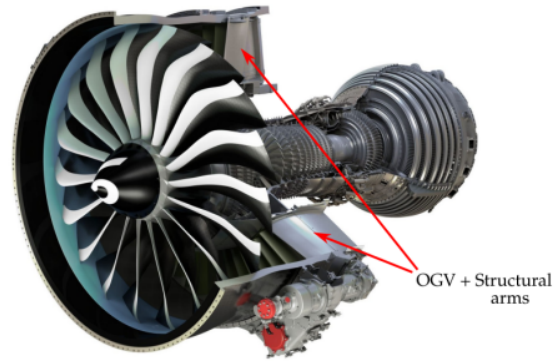
Présentation de la pièce

Pour cette thèse, on considère la VCI comme une des pièces de référence.

Cette pièce de près de deux mètres de diamètre est positionnée juste après les aubes du moteur. Elle a de nombreuses fonctionnalités. Elle sert notamment de pièce structurante pour soutenir les *outlet guide vanes* (OGV) (c.f. Figure 1.9), et contient des emplacements afin d'ajouter les pièces nécessaires à l'installation de la nacelle. Celle-ci est construite de telle sorte que deux arbres puissent passer dans le moteur, permettant ainsi à plusieurs câbles de le parcourir (par exemple, pour des capteurs), ainsi que différents équipements, comme ceux pour la gestion de l'aération.



(a) Photo d'une VCI



(b) Image d'une coupe moteur avec les OGV soutenues par la VCI

FIGURE 1.9 – Photo d'une VCI et illustration de son positionnement dans le moteur

La production d'une pièce prend entre 20 et 30 heures avec pas moins de 10 étapes de fabrications auxquelles fait suite un contrôle final de 8 heures. De plus, sa taille imposante présente plusieurs difficultés. D'une part, il est nécessaire de disposer d'une machine de mesure adaptée aux dimensions de la pièce. Il s'agit de la plus grande machine à mesurer chez SAE : 4,5 mètres de long, une hauteur de 2 mètres et une largeur légèrement inférieure à 3 mètres. D'autre part au repos, i.e. tant qu'elle n'est pas montée sur le moteur, la pièce se déforme et il est donc nécessaire d'ajouter un équipement de plus d'une tonne pour éviter ces déformations.

Lors de ce contrôle, pour s'assurer de sa conformité aux exigences, il est nécessaire de faire la mesure d'environ 11 000 caractéristiques XML. Ces mesures sont ensuite résumées en environ 400 caractéristiques de conformité, pour juger de la conformité de la pièce. Par exemple, la VCI est une pièce circulaire et on fait de manière répétée la même opération de perçage à différents endroits de la pièce. Alors pour juger de la conformité des diamètres de ces perçages, on peut synthétiser l'information en regardant le minimum et le maximum des diamètres, réduisant ainsi le nombre de caractéristiques à surveiller comme évoqué en section 1.3.

C'est donc une pièce idéale pour construire des méthodes de suivi de production qui doivent être adaptées à un grand nombre de caractéristiques. De plus, ses caractéristiques recouvrent un champ large de types de spécifications communes à l'ensemble des pièces produites par SAE : diamètres, enveloppes, localisations, etc.

Présentation des données

Pour la partie de la thèse sur l'étude d'un indicateur de capabilité multivarié (c.f. Section 6.1), on regardera donc les 400 caractéristiques de conformité. Mais pour concevoir une méthode d'optimisation des contrôles, l'étude de cet indicateur n'est pas suffisant. Il faut étudier les 11 000 caractéristiques de mesure afin de proposer une méthode de contrôle offrant un gain de temps substantiel. En effet, si l'on regarde une couronne de trous usinés avec un même outil, on observe que les diamètres de ces trous sont tous fortement dépendants entre eux. De plus, pour étudier la conformité de la pièce, ces valeurs de diamètres sont résumées en la valeur minimale et la valeur maximale (caractéristiques de conformité). Comme les diamètres sont fortement dépendants, ces deux caractéristiques de conformité le sont aussi. Or, si on applique une approche d'optimisation des contrôles par corrélation sur les caractéristiques de conformité uniquement, on risque d'obtenir comme résultat : on prédit le diamètre minimal à partir du diamètre maximal (ou inversement). Mais pour obtenir la valeur du diamètre minimal, il faut mesurer tous les diamètres. Cette approche n'apporte donc aucun gain de temps. A l'inverse, si on regardait aussi les caractéristiques de mesure, on pourrait par exemple prédire avec grande précision les diamètres minimal et maximal à partir des valeurs de quelques diamètres bien choisis. Sur une couronne de 10 trous, cela reviendrait alors à économiser le temps lié à la mesure de 8 trous.

Les données de production utilisées sont issues des données disponibles sur l'application MSP de SAE et ont été considérées sur la période d'octobre 2019 à mars 2020. Pour les caractéristiques, on ne regarde que celles pour lesquelles les données associées ont un écart type strictement positif. On dispose alors d'un jeu de données avec 91 observations et 454 caractéristiques. Il existe un nombre très faible de valeurs manquantes dans les données, i.e. où la base de données ne contient pas de valeurs. Ainsi, on utilisera des outils tolérants les valeurs manquantes sans utiliser de méthode particulière pour l'imputation de ces données.

De plus, on fait l'hypothèse que le procédé de fabrication est stable au sens de l'analyse 6M (c.f. Figure 1.5). C'est-à-dire qu'il n'y a pas de facteurs externes (plusieurs machines, température de l'usine, etc.) qui varient en ayant une influence sur les données que l'on observe.

Dans la littérature statistique des études de données multivariées, l'approche la plus classique est de consi-

TABLEAU 1.4 – Résultat des tests de normalité sur les caractéristiques PLM du jeu de données de la VCI.

Hypothèse de normalité	Acceptée	Rejetée
Nombre de tests	222 (49%)	232 (51%)

TABLEAU 1.5 – Résultat des tests de copule gaussienne sur les caractéristiques PLM du jeu de données de la VCI.

Hypothèse de normalité	Acceptée	Rejetée
Nombre de tests	10560 (11%)	82968 (89%)

dérer que les données sont gaussiennes. Pour vérifier cette hypothèse, on peut commencer par vérifier que la distribution marginale de chaque caractéristique est bien gaussienne. Pour cela, une méthode naïve serait de tester la normalité de chacune des caractéristiques. Mais comme on cherche à les regarder toutes en même temps, on est face à une procédure de tests multiples. Dans ce cas, la méthode classique est d'introduire une correction dite de Bonferroni. Elle consiste à diviser le niveau de chacun des tests de normalité par le nombre de tests que l'on veut faire. Ainsi, dans le cadre de la VCI, pour tester simultanément la normalité des 454 caractéristiques au niveau 5%, cela revient à tester la normalité de chaque caractéristique au niveau $(5/454)\%$. On utilise pour cela la fonction `shapiro.test` du logiciel R. On obtient alors les résultats en Tableau 1.4. Si l'hypothèse de normalité était vraie, alors on s'attendrait à avoir aucun test rejeté. Or ici environ 50% des hypothèses le sont. Et donc l'hypothèse de normalité globale des données est donc rejetée (au niveau 5%). Cela est assez logique, puisque l'on regarde des caractéristiques telles que des localisations et donc on sait qu'elles ne sont pas bien approximées par une loi gaussienne. D'ailleurs, on considère que chez SAE qu'au moins 50% des caractéristiques ne sont pas gaussiennes (ce sont notamment les caractéristiques ISO GPS). Ces résultats vont donc dans ce sens.

Au-delà de la normalité, une autre hypothèse souvent faite en pratique est, non plus que les données sont gaussiennes, mais que leur structure de dépendance est la même que celle d'une loi gaussienne. On parle alors d'hypothèse de copule gaussienne. Si cette hypothèse de copule gaussienne est vérifiée, on devrait avoir que chaque paire de caractéristiques vérifie elle-même cette hypothèse de copule gaussienne. Ainsi, de la même manière que pour les lois marginales, on va tester chacune des paires pour savoir si elles vérifient cette hypothèse. On utilise pour ce test la fonction `gofCopula` du package `copula` du logiciel R. Dans ce cas là, il y a environ 100000 paires de caractéristiques à tester. Appliquer la procédure de Bonferroni revient donc à faire un test au niveau $\approx(1/100000)\%$. Cela n'est pas possible à cause de la précision de la méthode. A défaut, on se contentera donc de réaliser un test au niveau 5% pour chacune d'entre elles. Les résultats sont présentés dans le tableau 1.5.

Il semble alors que l'hypothèse de copule gaussienne ne soit pas non plus adaptée, car presque 90% des tests d'hypothèse sont rejetés au niveau 5%. Bien qu'il soit souvent difficile de savoir a priori si la copule sera gaussienne ou non, ce sera cependant possible dans certains cas de figure.

Pour illustrer un peu plus, il est possible de regarder quelle famille de copules est la plus adaptée pour les copules entre 454 paires de caractéristiques en terme de vraisemblance. Pour cela le package `rvinecopulib` est utilisée, il propose différentes familles de copules paramétrique avec un ou deux paramètres, ainsi qu'un estimateur non paramétrique (Geenens et al., 2017). Le critère BIC, voir par exemple (Lebarbier et Mary-Huard, 2004), est utilisé pour choisir entre les différentes familles. Nous obtenons alors le tableau 1.6. La famille `tll` est la famille non paramétrique. Les familles BB sont des familles avec 2 paramètres c.f. (Joe, 2014) pour des détails sur les différentes familles de copules. Souvent ces familles coïncident lorsque la valeur de corrélation vaut 0 (indépendance) ou 1 : les variables sont parfaitement dépendantes. Pour s'assurer que ce n'est pas le cas, on affiche en figure 1.10 les différentes valeurs du τ de Kendall, qui est une mesure de dépendance. On observe alors que les valeurs de dépendances sont, en général, différentes de 0 et 1, et donc qu'il y a une véritable distinctions entre les familles de copules.

Une autre particularité des données que l'on étudiera dans cette thèse, est la présence de blocs de variables fortement corrélées. En effet, si on applique une méthode de classification sur la matrice de corrélation, on voit apparaître des blocs assez homogènes (c.f. Figure 1.11).

Cette thèse s'intéresse à la détection des groupes de variables indépendants les uns des autres, afin de se concentrer sur ces blocs et de ne pas modéliser leurs interactions quand elles sont négligeables.

TABLEAU 1.6 – Type de familles de copules estimées par BIC sur le jeu de données de la VCI.

BB1	BB7	BB8	Clayton	Frank	Gaussienne	Gumbel	Indépendance	Joe	t	tll
4	32	18	41	81	61	133	20	27	36	1

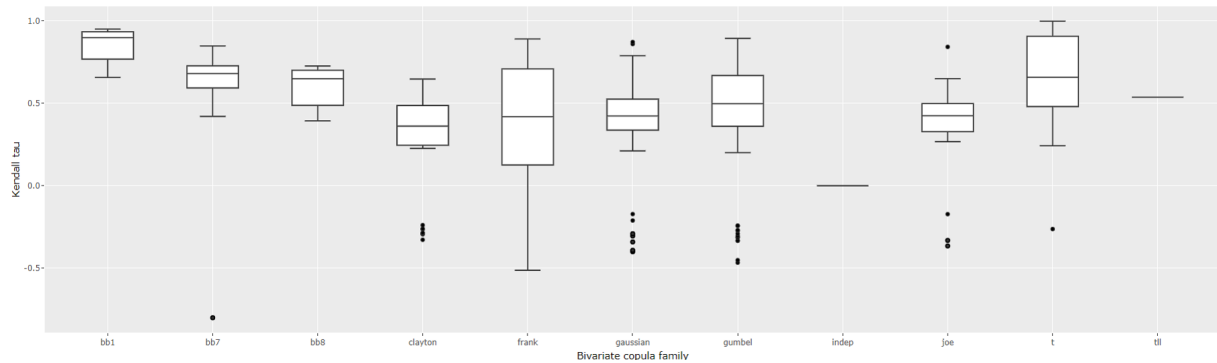
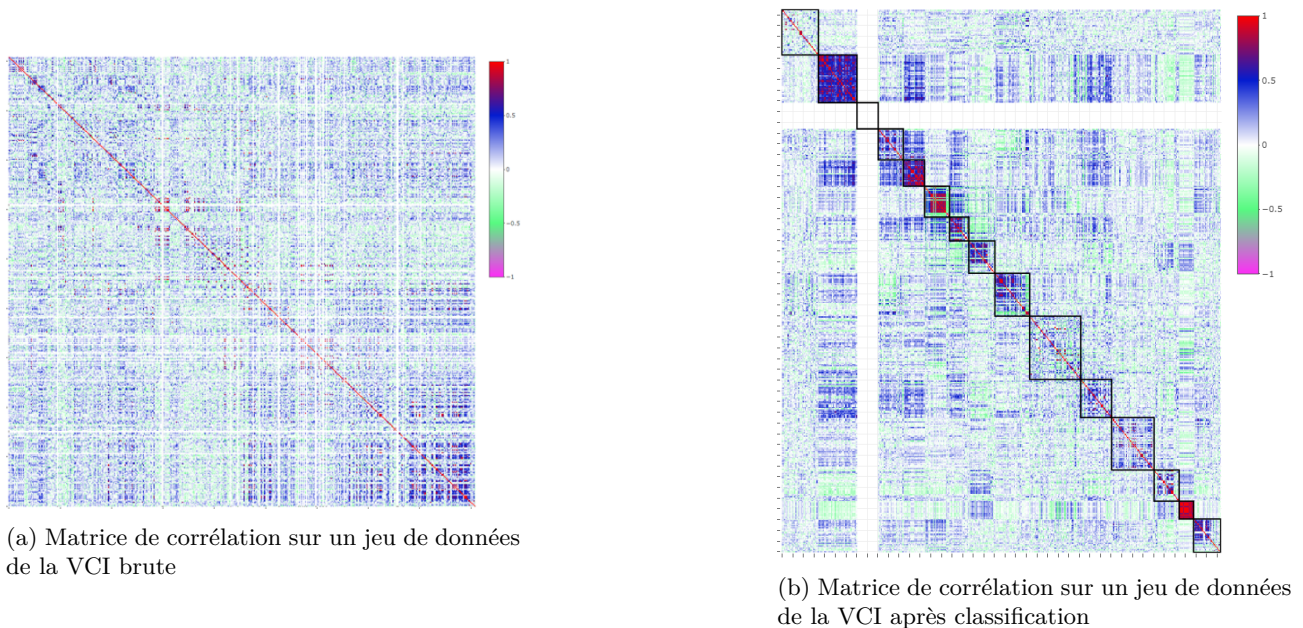
FIGURE 1.10 – Boîtes à moustaches de la valeur du τ de Kendall en fonction de la famille de copules pour 454 paires de caractéristiques.

FIGURE 1.11 – Matrice de corrélation sur le jeu de données de la VCI avant et après classification.

1.4.2 Aube Fan

Présentation de la pièce

Une aube fan (c.f. Figure 1.12) est une pièce située à l'entrée du moteur et qui assure d'obtenir le débit d'air adapté au bon fonctionnement du moteur.

Sur cette pièce, on dispose de deux jeux de données distincts appelés jeu de données n°1 et jeu de données n°2.

Une particularité des aubes fan est que la pièce est découpée en sections (c.f. Figure 1.12) et que ces sections comportent des caractéristiques du même type. D'autres pièces comme les OGVs partagent cette particularité d'être découpées en différentes sections.

Jeu de données n° 1

On dispose d'une part, d'un jeu de données (n°1) de plusieurs milliers d'observations sur environ 430 caractéristiques. Ces mesures ont été faites par une MMT. Parmi elles, on retrouve des mesures d'angles, des épaisseurs

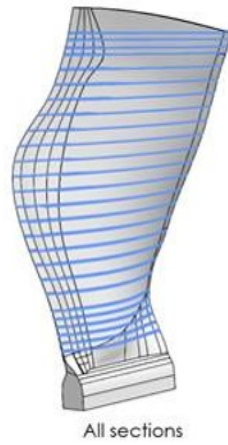


FIGURE 1.12 – Exemple d’une aube fan avec ses différentes sections

et des localisations. Ce jeu de données est issu de la production d’aubes fan du moteur LEAP en 2019. Il rassemble la production de deux usines, que l’on appellera usine A et usine B. Sur ce jeu de données, il est possible d’observer le fait que parfois on mesure des caractéristiques en valeur absolue, par exemple des localisations. De fait, si jamais la copule entre deux caractéristiques était proche de la copule gaussienne, mais qu’on ne dispose en terme de données que des données en valeurs absolues, alors la copule que l’on va estimer ne sera clairement pas gaussienne mais plutôt en forme de V (c.f. Figure 1.13).

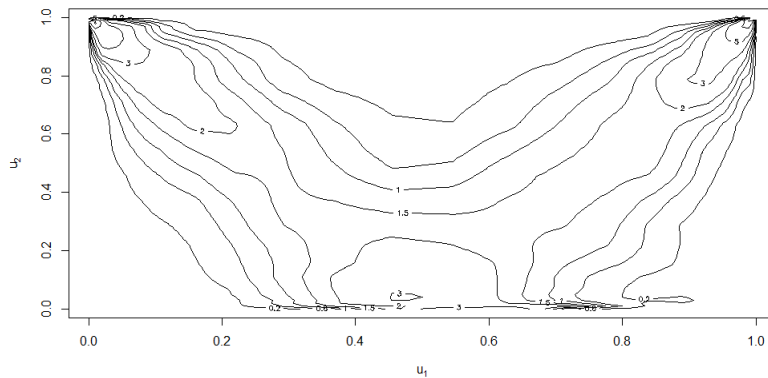


FIGURE 1.13 – Densité (estimation à noyau) d’une copule en forme de V.

Un cas de figure similaire se produit par exemple sur les aubes. En effet, dans ce cas, on vient regarder, pour une caractéristique donnée, ses coordonnées X et Y ainsi que la norme Z de ses coordonnées. On a alors aussi une forme de dépendance asymétrique en entre la coordonnée Y de la caractéristique et la norme Z (voir Figure 1.14).

Afin de se conformer aux hypothèses du 6M, on ne regarde que les mesures des 1000 dernières pièces produites dans l’usine A.

Jeu de données n° 2

Sur cette pièce, l’aube Fan, on dispose aussi d’un deuxième jeu de données. Il correspond à 800 mesures de deux caractéristiques Balloon 26 et Balloon 36 sur des bruts de fabrication de l’aube. Ces deux caractéristiques sont mesurées sur 26 sections de la pièce. Pour le Balloon 26, on dispose aussi de mesures sur deux sections supplémentaires.

Ce jeu de données a été séparé en un jeu d’apprentissage de 500 pièces et un jeu de test avec 300 pièces dans le but de réaliser une étude d’optimisation des contrôles par corrélation.

Dans le jeu de données, on ne considère que 498 pièces du jeu d’apprentissage, car il y a deux valeurs manquantes (on supprime toute la ligne pour les pièces associées).

Le test de normalité (Shapiro-Wilks) rejette l’hypothèse Gaussienne pour une bonne partie des caractéristiques au niveau 5% (c.f. Tableau 1.7).

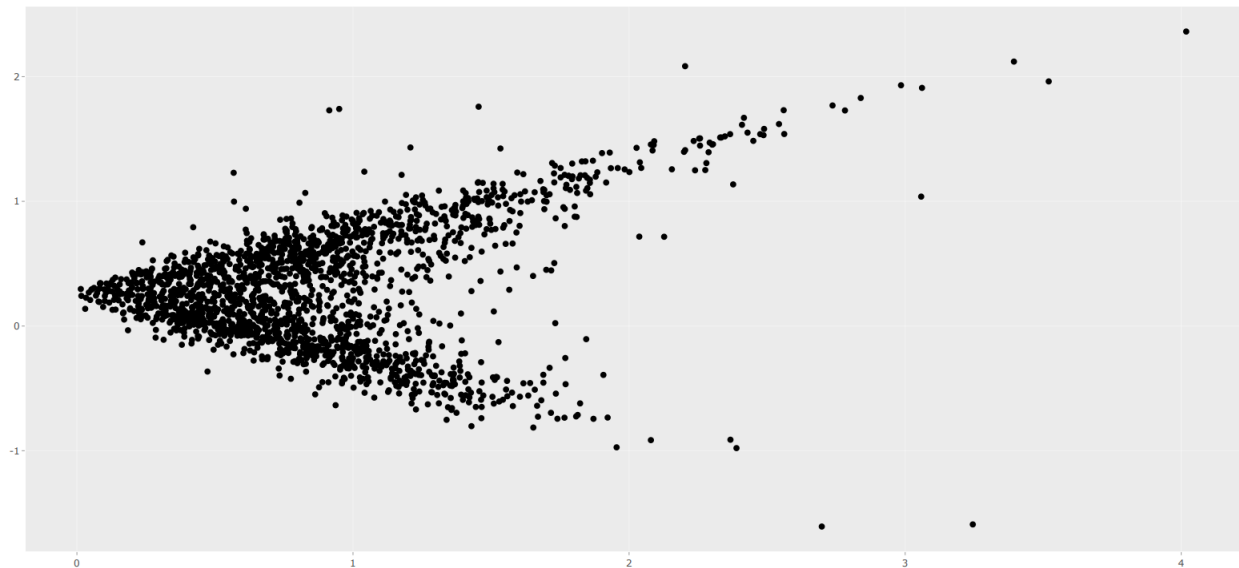


FIGURE 1.14 – Exemple de données sur aubes LEAP ayant une structure de dépendance asymétrique (en ordonnée la norme Z et en abscisse la coordonnée Y).

TABLEAU 1.7 – Résultat du test de normalité sur le jeu de données d'apprentissage des aubes

	pvalue < 0.05	pvalue $\geq$ 0.05
Balloon 26	12	16
Balloon 36	10	16

De plus, les caractéristiques dont la normalité est rejetée présentent uniquement une légère asymétrie. Pour expliciter cela, on affiche en Figure 1.15 la caractéristique avec la p-valeur la plus faible (0.0035).

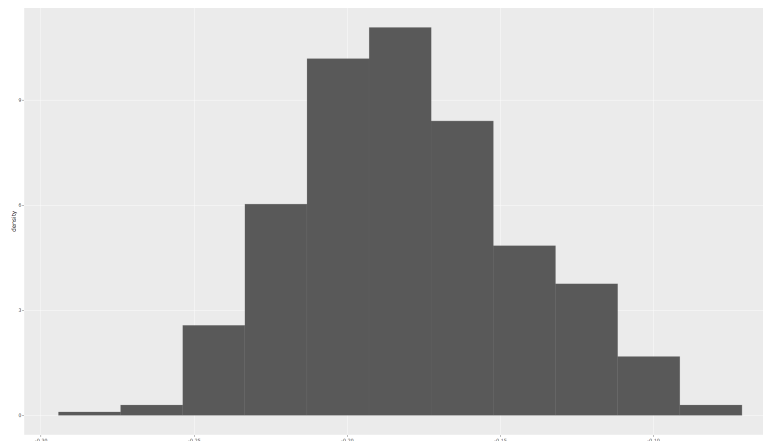


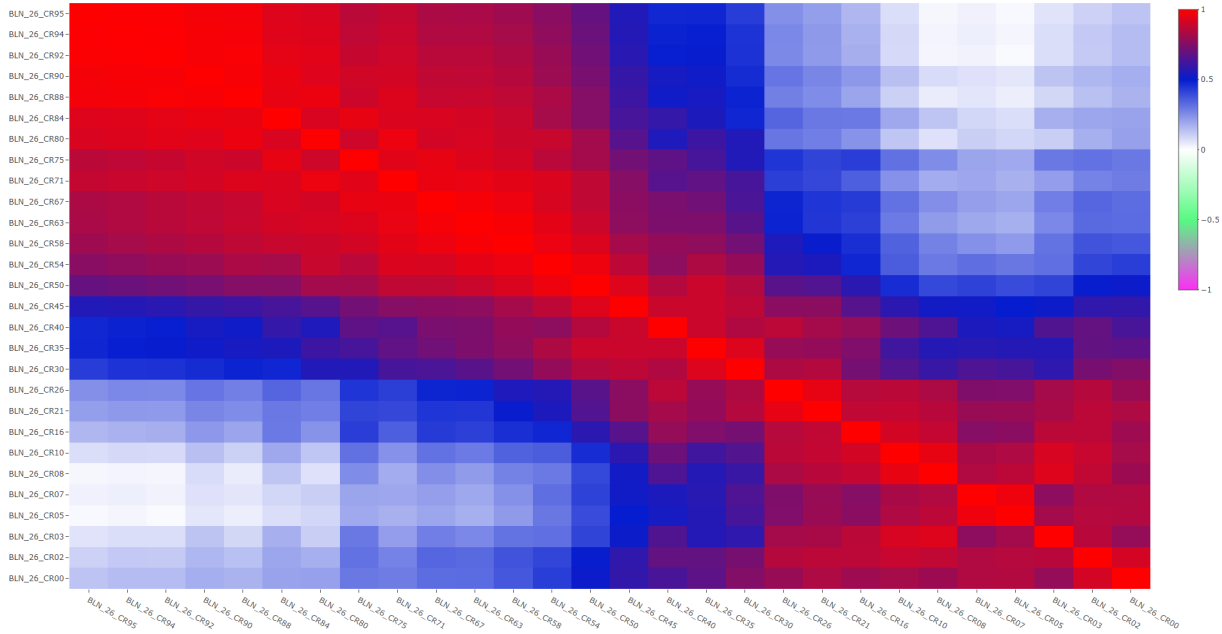
FIGURE 1.15 – Histogramme de la caractéristique avec la plus faible p-valeur pour un test de normalité

On peut aussi regarder la corrélation entre les caractéristiques. Pour cela, on distingue la corrélation pour les caractéristiques d'un même ballon affichée en figure 1.16 et celle entre les ballons affichées en figure 1.17. On observe que la corrélation pour un même Balloon diminue à mesure que les deux sections s'éloignent. De plus, on observe aussi de la corrélation entre les deux ballons pour une même section.

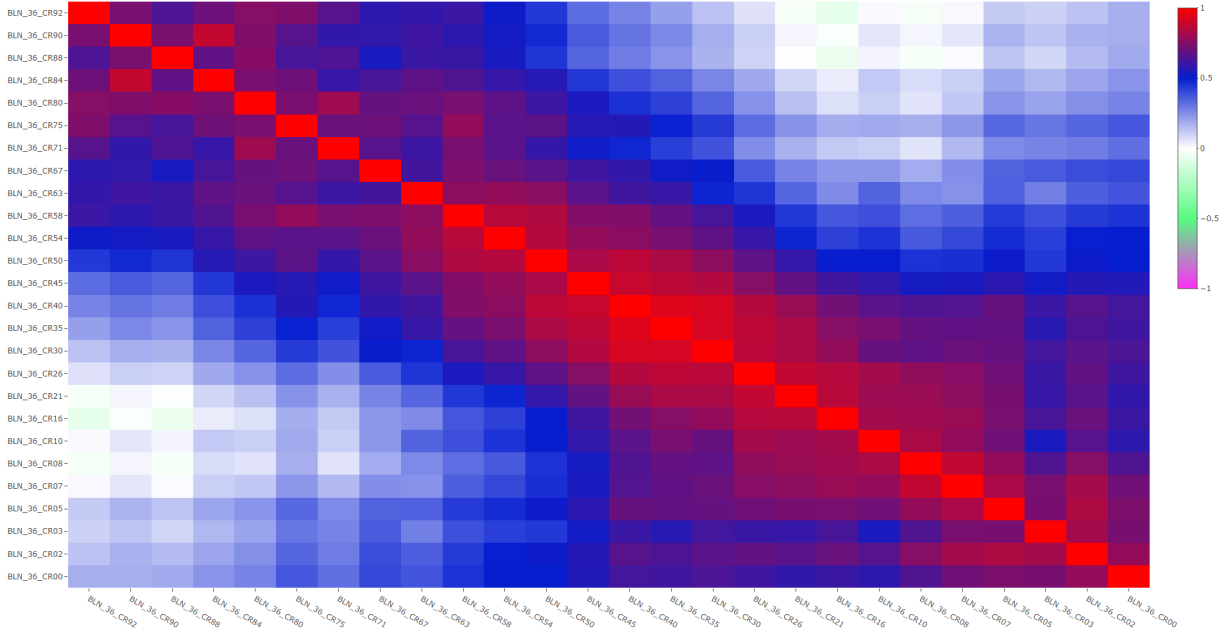
Sur ce jeu de données, on peut aussi regarder la capabilité. On obtient la figure 1.18.

Ainsi les données sont bien capables ($Cpk \geq 1$). De plus, on peut voir que la production du ballon 36 est plus capable que celle du ballon 26. Cela peut être dû au fait, que bien que les ballons soient de nature comparable, les limites de tolérances supérieures du ballon 36 sont plus grandes que celle du ballon 26. Si les deux étaient les mêmes, les capabilités seraient équivalentes.

Dans la prochaine section, nous allons présenter les outils mathématiques qui serviront de base aux travaux de cette thèse.



(a) Matrice de corrélation sur le jeu de données du balloon 26.



(b) Matrice de corrélation sur le jeu de données du balloon 36.

FIGURE 1.16 – Matrices de corrélation sur les jeux de données n°2 de l'aube

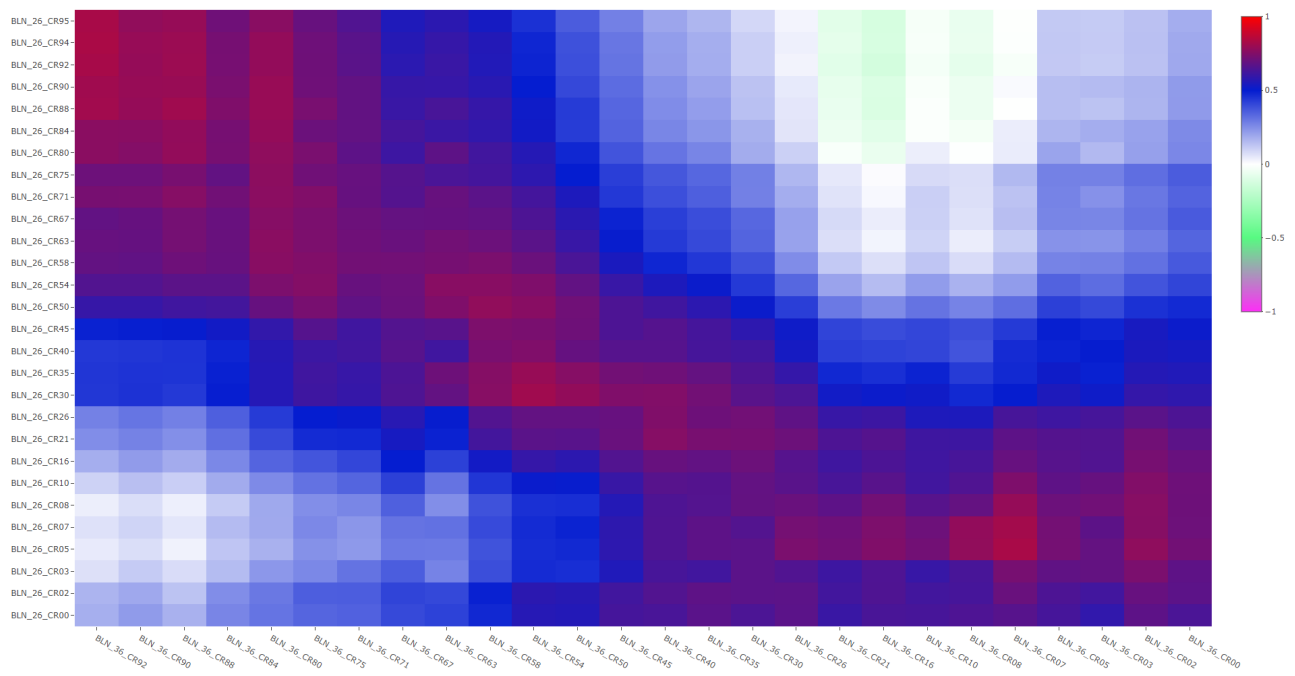


FIGURE 1.17 – Matrice de corrélation sur le jeu de données n°2 de l'aube entre les balloons 26 et 36.

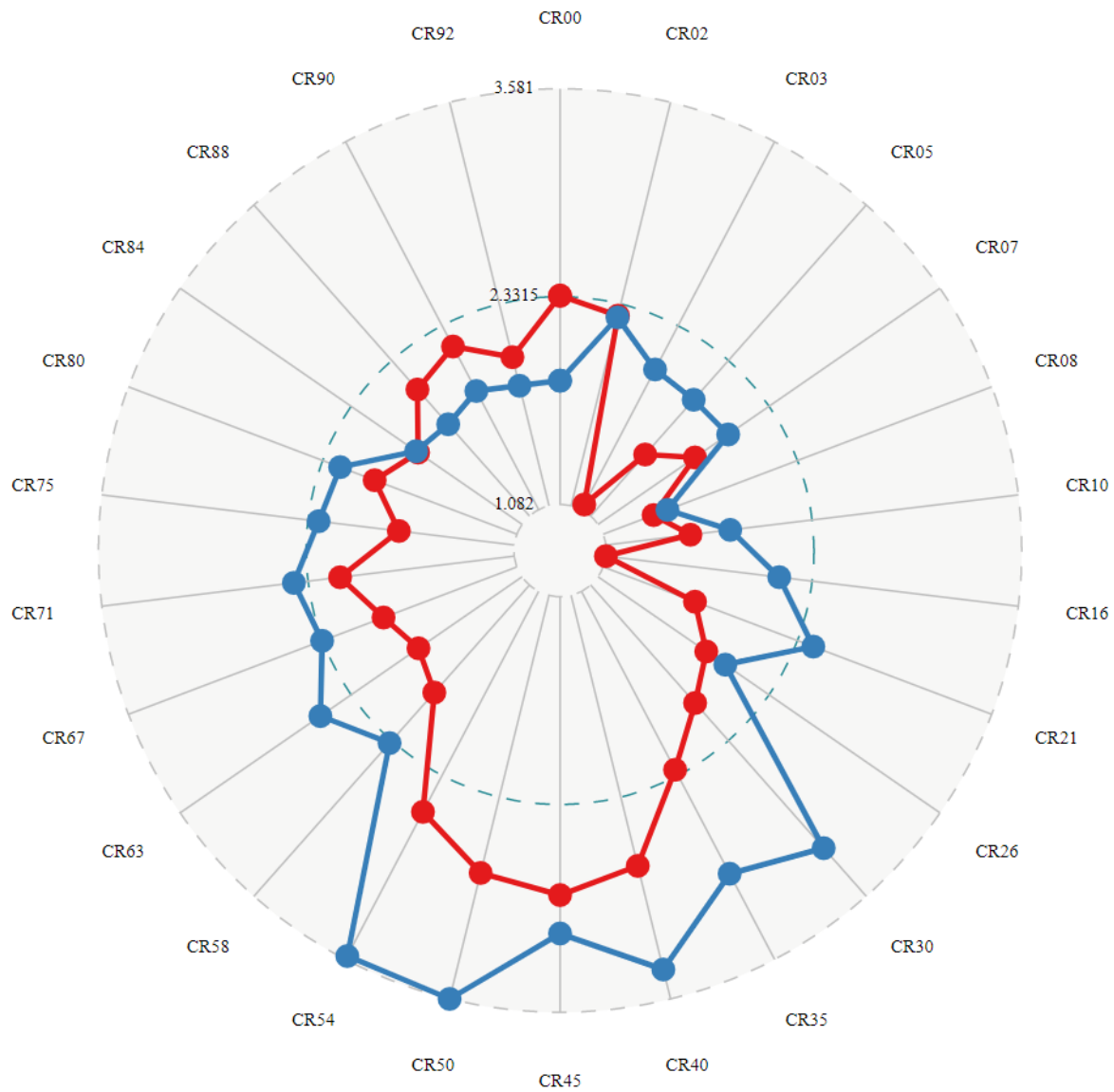


FIGURE 1.18 – Radar des capacités (C_{pk}) sur les données des aubes LEAP pour les sections communes aux ballons 26 (rouges) et 36 (bleues)

Outils Mathématiques

2.1 Graphes, modularité et modèles stochastiques par blocs

Les graphes jouent un rôle central dans la compréhension des systèmes complexes. Les graphes sont présents dans de nombreux domaines d'applications comme les systèmes de particules (Hopfield, 1982), les navigateurs web (Page, 1998), l'analyse de données (Breiman et al., 2017), la fiabilité (Donat et al., 2008) ou encore, pour ne citer qu'eux, la biologie (Jeong et al., 2000 ; Meunier, 2009).

Parfois, les situations modélisées par ces graphes comportent des communautés. C'est à dire que plusieurs individus (noeuds du graphe) ont un comportement similaire. C'est par exemple le cas dans des réseaux sociaux où des groupes de personnes partagent les mêmes goûts ou centres d'intérêts, ou encore en biologie où les liens entre des gènes et certaines maladies sont mis en évidence.

Ainsi dans cette section nous présentons la notion de graphes et quelques modèles, qu'ils soient déterministes ou aléatoires. Nous présenterons aussi des méthodes permettant de retrouver une structure de blocs (aussi appelées communautés) sur ces modèles.

2.1.1 Graphes et modularité

Définition 2.1 (Graphe (pondéré)). Un **graphe** G est une paire (V, E) , où V est appelé ensemble des noeuds (ou sommets) et $E \subset V \times V$ ensemble des arêtes.

Un graphe est **pondéré**, s'il existe une matrice $\mathbf{W} = (W_{ij})_{1 \leq i, j \leq |V|} \in \mathbb{R}^{|V| \times |V|}$ qui associe un poids $W_{ij} \in \mathbb{R}$ si l'arête $(i, j) \in E$ et qui vaut 0 sinon.

Etant donné un graphe $G = (V, E, \mathbf{W})$ pondéré avec n noeuds, on note

- $2m = 2m(\mathbf{W}) := \sum_{ij} W_{ij}$ le **poids total** du graphe,
- $d_i = d_i(\mathbf{W}) := \sum_j W_{ij}$ le **degré** du noeud i .

Définition 2.2 (Modèle de configuration). Pour un graphe pondéré $(V, E, \mathbf{W})$, le **modèle de configuration** se définit comme le graphe $(V, E, \overline{\mathbf{W}})$, où la matrice de poids $\overline{\mathbf{W}}$ est définie comme

$$\overline{W}_{ij} = \frac{d_i(\mathbf{W})d_j(\mathbf{W})}{2m(\mathbf{W})} . \quad (2.1)$$

Ce modèle de configuration représente en quelque sorte une répartition uniforme des poids des arêtes dans $\mathbf{W}$, sous la contraintes que les degrés de $\overline{\mathbf{W}}$ soient égaux à ceux de $\mathbf{W}$.

Définition 2.3 (Partition). Pour un graphe (V, E) , tel que $|V| = n \in \mathbb{N}^*$, on appelle **partition** en K classes tout vecteur $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$. Et pour tout noeud i , c_i le i -ème coefficient de $\mathbf{c}$ s'appelle **classe** ou **bloc** du noeud i .

Etant donnée, une partition des noeuds $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n)$, on note

$$s = s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} W_{ij} \delta_{c_i, c_j} \quad (2.2)$$

le poids relatif intra-classes.

Pour la suite de ce paragraphe, on considère un graphe pondéré $(V, E, \mathbf{W})$ et l'on suppose que pour toute arête (i, j) , $W_{ij} \geq 0$.

Définition 2.4 (Modularité). Pour un graphe $(V, E, \mathbf{W})$, la **modularité** d'une partition $\mathbf{c}$, se définit comme

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = Q_\gamma(\mathbf{W}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} (W_{ij} - \gamma \overline{W}_{ij}) \delta_{c_i c_j} = s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) - \gamma s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c}) \quad (2.3)$$

où $\gamma \in \mathbb{R}^+$ est appelé paramètre de résolution.

Initialement, la modularité a été introduite par (Newman et Girvan, 2004) dans le cas où $\gamma = 1$. La modularité peut aussi s'écrire comme une somme sur les blocs, i.e.

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{1 \leq k \leq K} \left[\left(\sum_{ij} W_{ij} I(c_i = k, c_j = k) \right) - \frac{\gamma}{2m} \left(\sum_{ij} W_{ij} I(c_j = k) \right)^2 \right] \quad (2.4)$$

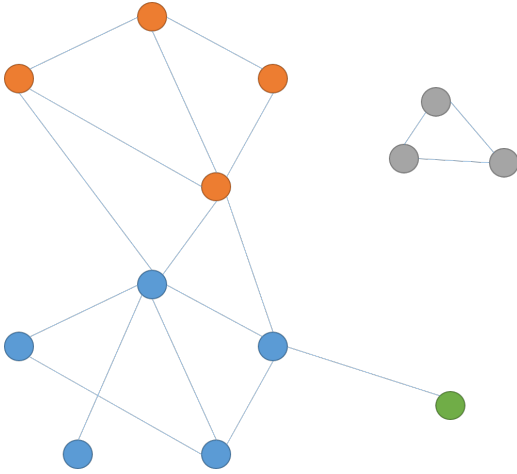
Une manière de considérer la modularité est en tant qu'une comparaison entre le comportement dans un bloc avec le comportement des arêtes dont au moins un noeud appartient à ce bloc. Dans ce cas, au lieu de regarder au graphe en lui même, on peut regarder une version agrégé de ce graphe, c.f. 2.1. Cette transformation peut s'écrire simplement en terme mathématique. Elle décrit une transformation pour une partition $\mathbf{c}$ de n noeuds en K blocs :

$$\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n} \mapsto {}^c\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{K \times K} \quad (2.5)$$

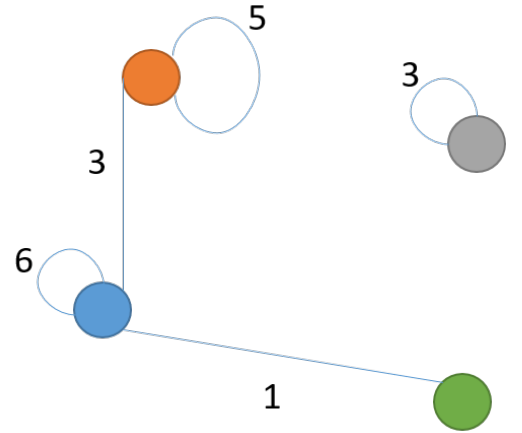
où ${}^cW_{k,l} = \sum_{i,j} W_{ij} I(c_i = k, c_j = l)$.

De plus, en notant ${}^cW_k = \sum_l {}^cW_{k,l}$, la modularité peut se réécrire comme

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_k \left[{}^cW_{k,k} - \frac{\gamma}{2m} {}^cW_k^2 \right] \quad (2.6)$$



(a) Graphe initial $(\mathbf{W})$ avec les blocs ayant une couleur différente.



(b) Graphe agrégé par bloc, avec les poids de chaque lien.

FIGURE 2.1 – Exemple d'aggrégation d'un graphe $({}^c\mathbf{W})$ en bloc en fonction d'une partition.

Plusieurs variantes de la modularité existent. Parmi elles, certaines consistent simplement à remplacer le modèle de configuration par une autre transformation du graphe.

Définition 2.5 (Déviation à l'uniformité). Pour un graphe $(V, E, \mathbf{W})$ on appelle **déviation à l'uniformité** d'une partition $\mathbf{c}$ le critère

$$Q_\gamma^U(\mathbf{c}) = Q_\gamma^U(\mathbf{W}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left(W_{ij} - \gamma \frac{2m}{n^2} \right) \delta_{c_i c_j} \quad (2.7)$$

avec $\gamma \in \mathbb{R}^+$.

Ce critère est aussi appelé CPM (pour *Constant Potts Model*) (Traag et al., 2011) et est équivalent au critère de (Owsinski et Zadrozny, 1986).

Maximiser en $\mathbf{c}$ la modularité et la déviation à l'uniformité fait partie d'une classe de méthodes qui consiste à considérer l'écart entre le graphe observé et un modèle de graphe appelé **modèle nul**. Ce modèle nul représente en quelque sorte le comportement moyen du graphe sous l'hypothèse qu'il n'y a pas de structure dans ce dernier.

La maximisation de la modularité est un problème NP-difficile (Brandes et al., 2008). De fait, pour de grands graphes, des méthodes approximatives sont souvent utilisées. L'une des plus utilisées d'entre elles est l'algorithme de Louvain (Blondel et al., 2008). Il consiste, à partir d'une partition donnée, à sélectionner un nœud et à regarder pour chacune des classes du graphe le gain de modularité associé à ce changement. La nouvelle classe du nœud est ainsi choisie comme celle qui maximise le gain. La méthode s'arrête lorsque plus aucun gain n'est possible. Cette approche a été généralisée pour d'autres critères, comme la déviation à l'uniformité et à l'indétermination par (Campigotto et al., 2014).

D'autres approches existent. Par exemple, des méthodes de type *label-switching* (Stephens, 2000). Une autre approche proposée par (Hollocou et al., 2019), consiste à considérer une relaxation convexe du problème de maximisation de la modularité et ces derniers démontrent que leur approche converge vers un maximum local de la modularité.

2.1.2 Modèles de graphes aléatoires par blocs

Dans ce paragraphe, nous présentons différents modèles de graphes aléatoires classiques admettant une structure de communauté. L'un des plus classiques est le *Degree Corrected Stochastic Block Model* (DCSBM). Ce modèle a l'avantage de présenter à la fois une structure de blocs mais aussi de prendre en compte une certaine hétérogénéité à l'intérieur de ces blocs, grâce à des coefficients appelés **facteurs correctifs des degrés**.

Définition 2.6 (DCSBM). Etant donnés les paramètres suivants :

- $n \in \mathbb{N}^*$ le nombre de nœuds,
- $K \in \mathbb{N}^*$ le nombre de classes,
- $M \in \mathbb{N}^*$ le nombre de valeurs possibles des facteurs correctifs des degrés,
- Π une loi de probabilité sur $\{1, \dots, K\} \times \mathcal{X}$, où $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^M$,
- $(P(\psi))_{\psi \in \mathbb{R}}$ une famille paramétrique de loi de probabilité sur $\mathbb{R}$,
- θ une matrice de paramètres de taille $K \times K$.

On dit que $\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W}$ suit un **DCSBM** de paramètres $n, \Pi, (P_\psi), \theta$ et on note

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \theta) \quad (2.8)$$

si $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n)$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ et $\mathbf{W} = (W_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ ont la même loi que le procédé :

$$(c_i, x_i) \stackrel{iid}{\sim} \Pi \quad (2.9)$$

et

$$W_{ij} | (\mathbf{c}, \mathbf{x}) \stackrel{\perp}{\sim} P_{x_i x_j \theta_{c_i, c_j}}. \quad (2.10)$$

On appelle $\mathbf{c}$ partition latente et $\mathbf{W}$ la matrice de poids du graphe.

On note de plus $\pi_k = \Pi(\{k\} \times \{1, \dots, M\})$, la probabilité qu'un nœud appartienne à la classe k .

Remarque 2.1. Souvent en pratique, la partition $\mathbf{c}$ et les facteurs $\mathbf{x}$ sont inconnus et seule la matrice $\mathbf{W}$ est observée.

Remarque 2.2. Pour avoir un modèle identifiable, il est courant de rajouter une hypothèse sur les facteurs correctifs des degrés. Par exemple (Zhao et al., 2012) considèrent l'hypothèse $E[x_1] = 1$.

Hypothèse A1. Le DCSBM vérifie $E[x_1] = 1$.

Le DCSBM a été introduit par (Karrer et Newman, 2011). L'un des premier modèle de graphe aléatoire par blocs a été introduit par (Holland et al., 1983) et est appelé SBM (*Stochastic Block Models*). C'est simplement un DCSBM où $M = 1$ (il n'y a qu'un seul facteur correctif des degrés x_1). En particulier sous l'hypothèse A1, x_1 est égale à 1.

Définition 2.7 (SBM). On dit que $\mathbf{c}, \mathbf{W}$ suit un **SBM** de paramètres $n, \pi, (P_\psi), \theta$ et on note

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{SBM}(n, \pi, (P_\psi), \theta) \quad (2.11)$$

si

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \theta) \quad (2.12)$$

où $|\mathcal{X}| = 1$ (dans ce cas, l'unique valeur de $\mathcal{X}$ n'a pas d'importance est peut être choisie égale à 1).

Remarque 2.3. Dans le cas d'un SBM, il est évidemment possible de prendre une matrice de lois $\mathbf{P}$ quelconque, sans avoir besoin de se restreindre à une famille paramétrique et à une matrice de paramètres. On note alors

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{SBM}(n, \pi, (P_{k,l})) \quad . \quad (2.13)$$

Les graphes réels présentent souvent beaucoup de parcimonie (Airoldi et al., 2008), au sens où dans un graphe observé, un grand nombre d'arêtes ont un poids égal à 0. Ainsi, on dira qu'un graphe est généré selon un DCSBM avec parcimonie $\rho_n \in (0, 1]$ si

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi(\rho_n P_\psi + (1 - \rho_n)\delta_{\{0\}})_\psi, \boldsymbol{\theta}) \quad . \quad (2.14)$$

Pour simplifier les notations, on utilisera dans ce cas le terme sDCSBM pour *sparse* DCSBM et on le note

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{sDCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}, \rho_n) \quad . \quad (2.15)$$

Remarque 2.4. Le cas des graphes binaires, i.e. lorsque le modèle paramétrique considéré est le modèle de Bernoulli, est un peu particulier puisque le mélange du modèle et du dirac en 0 appartient encore au modèle. On a alors

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{sDCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}, \rho_n) \iff \mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \rho_n \boldsymbol{\theta}) \quad . \quad (2.16)$$

Dans ce cas, la parcimonie du graphe peut donc être directement liée à la valeur des paramètres de la matrice $\boldsymbol{\theta}$. Cela n'est a priori pas le cas de manière générale. Par exemple, dans le cas d'un modèle gaussien avec variance fixée, avoir une moyenne nulle n'implique pas que le bloc associé dans le graphe soit parcimonieux.

Parmi ces modèles, on distingue deux cas particuliers : les modèles d'affiliation et assortatif.

Définition 2.8 (Modèles d'affiliation et assortatif). Pour un DCSBM de paramètres $n, \Pi, (P_\psi)_\psi, \boldsymbol{\theta}$ (et donc aussi pour un SBM), on parle de **modèle d'affiliation** (*planted model* en anglais), s'il existe deux paramètres θ_{in} et θ_{out} tels que

$$\theta_{k,\ell} = \theta^{\text{pl}}(\theta_{\text{in}}, \theta_{\text{out}})_{k,\ell} := \begin{cases} \theta_{\text{in}} & \text{si } k = \ell \\ \theta_{\text{out}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.17)$$

De plus, on dit que le modèle est **assortatif** si

$$E_{X \sim P_{\theta_{\text{in}}}}(X) > E_{X \sim P_{\theta_{\text{out}}}}(X) \quad (2.18)$$

En pratique, il est parfois observé que les blocs dans un graphe peuvent être petits et nombreux (Rohe, Qin et al., 2014). Dans ce cas-là, il est classique de faire dépendre le nombre de blocs K du nombre de nœuds n (plus il y a de nœuds dans le graphe, plus il y a de blocs). De fait, la matrice de paramètres $\boldsymbol{\theta}$ peut dépendre de n . Cela peut être à travers sa taille qui dépend de K , mais aussi simplement des paramètres θ_{kl} qui eux-mêmes dépendent de n . De même le nombre de facteurs correctifs des degrés peut dépendre de n et donc la probabilité Π peut elle aussi dépendre de n .

Dans le cadre des graphes aléatoires, on ne dispose en général que d'une seule observation issue d'un modèle de graphe aléatoire. Dans ce cas, l'asymptotique considérée est que le nombre de nœuds n tend vers l'infini.

La modélisation des graphes aléatoires par blocs, donnée en définition 2.6, a l'avantage d'être simple à comprendre et de facilement pouvoir simuler des graphes sous ce modèle. Cependant, cette définition n'est pas constructive et la notion d'asymptotique (i.e. un nombre croissant de nœuds) n'est pas très claire, car la définition se fait pour un nombre de nœuds n donné. Pour donner un sens à cette notion d'asymptotique en n , nous considérons les arguments de (P. J. Bickel et A. Chen, 2009a). En considérant qu'il existe un graphe de très grande taille (potentiellement infinie), le graphe observé peut être vu comme un sous ensemble de ce grand graphe. Dans ce cas, par un théorème analogue à celui de de Finetti pour les suites de variables aléatoires échangeables, la distribution des poids W_{ij} peut s'écrire comme un mélange de distributions (Kallenberg, 2005). De fait, rajouter un nœud au graphe revient à tirer de nouveaux poids selon ce mélange.

2.1.3 Estimation et convergence dans les modèles par blocs

Afin d'estimer les paramètres dans les modèles par blocs, la méthode la plus classique est le maximum de vraisemblance (et ses variantes). Dans cette section, on présente quelques résultats importants de la littérature en lien avec la vraisemblance. De nombreuses autres méthodes existent comme le clustering spectral (Rohe, S. Chatterjee et al., 2011), qui ne seront pas détaillées ici. Une présentation plus globale est donnée par exemple par (Fortunato, 2010).

Un des critères le plus considéré dans la littérature est (avec K connu)

$$\text{plk}(\mathbf{c}; \mathbf{W}, (P_\psi)) = \max_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}} \prod_{i < j} P_{\theta_{c_i c_j} x_i x_j}(W_{ij}) \quad (2.19)$$

Cette quantité est souvent appelée dans la littérature **vraisemblance profilée**. Si les paramètres $\mathbf{c}$ et $\mathbf{x}$ n'étaient pas générés aléatoirement, alors $\prod_{i < j} P_{\theta_{c_i c_j} x_i x_j}(W_{ij})$ correspondrait à la vraisemblance d'un certain modèle. On parle aussi parfois de vraisemblance conditionnelle (e.g. page 234 de (McCulloch et Searle, 2000)).

Dans le cas d'un SBM, l'équation (2.19) se simplifie en

$$\text{plk}(\mathbf{c}; \mathbf{W}, (P_\psi)) = \max_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i < j} P_{\theta_{c_i c_j}}(W_{ij}) \quad (2.20)$$

Lorsque l'on cherche à comparer deux partitions, une difficulté est que le problème n'est souvent pas identifiable. En effet, souvent, les critères considérés (typiquement la modularité ou la vraisemblance) sont invariant à une permutation des communautés $\{1, \dots, K\}$. De fait, lors de la comparaison de deux partitions, on considère la comparaison entre les classes d'équivalence de la partition.

De plus, parmi les manières de mesurer la différence entre deux partitions $\mathbf{e}$ et $\mathbf{c}$, une des plus classiques est le nombre de nœuds mal classifiés, i.e.

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \sum_{i=1}^n I(e_i \neq c_i) \quad (2.21)$$

Si on veut l'écrire sans considérer la comparaison entre les classes d'équivalence, on aurait

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \min_{\sigma} \sum_{i=1}^n I(\sigma(e_i) \neq c_i) \quad (2.22)$$

où σ est une permutation sur $\{1, \dots, K\}$.

Ce genre de situation où les classes ne dépendent pas des labels arrive pour de nombreux critères. C'est notamment la cas de la modularité ou de la vraisemblance profilée d'un DCSBM.

Il arrive souvent que les critères soient complexes à optimiser à cause de la recherche sur l'ensemble des partitions. Une méthode alternative souvent utilisée (X. Li et al., 2021) est de remplacer la partition par une matrice $\mathbf{c}$ de taille $n \times K$ telle que

$$c_{ik} \geq 0, \forall 1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq K \text{ et } \sum_k c_{ik} = 1, \forall 1 \leq i \leq n \quad (2.23)$$

En particulier, pour une partition $\mathbf{c}$ donnée, on peut l'écrire de manière équivalente avec la matrice telle que $c_{ik} = \delta_{c_i, k}$. Le problème d'optimisation est alors continu et la recherche d'une solution est alors plus simple. Dans ce cas, il est possible pour deux matrices $\mathbf{e}$ et $\mathbf{c}$ de mesurer leur écart comme

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K |e_{ik} - c_{ik}| \quad (2.24)$$

Dans le cas où les deux matrices $\mathbf{e}$ et $\mathbf{c}$ correspondent toutes deux à des partitions, les équations (2.24) et (2.21) sont égales.

Définition 2.9 (Convergence). Soit (K_n) une suite d'entier strictement postivifs, $Q_n : \{1, \dots, K_n\}^n \times \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ une suite de fonctions (critères) et BM_n une suite de graphes aléatoires, i.e. de distributions sur $\{1, \dots, K_n\}^n \times \mathbb{R}^{n \times n}$.

On dit que (Q_n) est **faiblement convergent** (pour (BM_n)) si

$$\forall n, \mathbf{c}_n^*, \mathbf{W}_n \sim \text{BM}_n, \forall \hat{\mathbf{c}}_n \in \text{argmax } Q_n(\cdot, \mathbf{W}_n) \implies \mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}}_n - \mathbf{c}_n^*\|_{P_n} > \epsilon \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0 \quad .$$

On dit que (Q_n) est **fortement convergent** (pour (BM_n)) si

$$\forall n, \mathbf{c}_n^*, \mathbf{W}_n \sim \text{BM}_n, \forall \hat{\mathbf{c}}_n \in \text{argmax } Q_n(\cdot, \mathbf{W}_n) \implies \mathbb{P} (\|\hat{\mathbf{c}}_n - \mathbf{c}_n^*\|_{P_n} \neq 0) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0 \quad .$$

Dans la suite de la thèse, on appellera **convergence** la convergence faible.

On définit la convergence pour une suite de matrices de partitions $(\mathbf{c}_n^*)_{n \in \mathbb{N}^*}$ de la même manière.

Dans le cas d'un SBM avec des poids binaires (i.e. des lois de Bernoulli), (Choi et al., 2012) donnent un résultat de convergence.

Théorème 2.1 (Choi et al., 2012). *Soit $\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, \text{Bernoulli}(\psi), \boldsymbol{\theta}^*)$. Sous les conditions*

- $K = O(\sqrt{n})$,
- pour tout $1 \leq k, l \leq K, \frac{1}{n^2} \leq \theta_{kl}^* \leq 1 - \frac{1}{n^2}$,
- $2m(\mathbf{W}) = \omega(n(\log(n))^{3+\delta})$ pour un $\delta > 0$,
- $\min_k \pi_k = \Omega(n/K)$ et
- une condition portant sur la matrice $\boldsymbol{\theta}^*$, m et K assurant l'identifiabilité du modèle,

le critère plk défini en équation (2.20) avec des lois de Bernoulli est convergent pour l'estimation de $\mathbf{c}$.

Parfois, plutôt que de chercher à estimer la partition du graphe, on peut chercher à estimer uniquement les paramètres des blocs (P. Bickel et al., 2013). Dans ce cas, la maximisation de la vraisemblance peut être considéré. Dans le cas d'un SBM, la vraisemblance s'écrit

$$g(\mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi) = \sum_{\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}} g(\mathbf{c}, \mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi) = \sum_{\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}} \left(\prod_{i=1}^n \pi_{c_i} \right) \left(\prod_{i < j} P_{\theta_{c_i c_j}}(W_{ij}) \right) \quad (2.25)$$

Dans ce cas-là, maximiser directement cette quantité n'est en général pas possible à cause de la somme sur l'ensemble des partitions. C'est pourquoi, (P. Bickel et al., 2013) proposent de maximiser à la place la quantité

$$J(q, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{W}, \pi) = \log g(\mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi) - D_{KL}(q \mid g_{\mathbf{c}} \mid \mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi) \quad (2.26)$$

avec une distribution q sur $\{1, \dots, K\}^n$ telle que sa densité se factorise sous la forme $\prod_{i=1}^n q_i$ et $g_{\mathbf{c}} \mid \mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}$ est la vraisemblance de $\mathbf{c}$ conditionnellement à $\mathbf{W}$ et $\boldsymbol{\theta} : g_{\mathbf{c}} \mid \mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi = \frac{g(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{W})}{g(\mathbf{W}; \boldsymbol{\theta}, \pi)}$.

On parle alors d'**approximation variationnelle** ou d'**ELBO** (*Evidence Lower Bound*). En réécrivant la distribution q comme sa matrice de probabilité $\mathbf{q}$, le critère devient alors pour une matrice $\mathbf{q} \in [0, 1]^{n \times K}$ telle que $\sum_{k=1}^K q_{ik} = 1$ pour tout i ,

$$J(\mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}, \pi; \mathbf{W}) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K q_{ik} (-\log(q_{ik}) + \log(\pi_k)) + \sum_{1 \leq i, j \leq n} \sum_{1 \leq k, l \leq K} q_{ik} q_{jl} P_{\theta_{kl}}(W_{ij}) \quad (2.27)$$

Cela permet de faire disparaître la somme sur l'ensemble des partitions en échange de l'ajout de la matrice de paramètres $\mathbf{q}$. Cela présente aussi l'avantage que les paramètres peuvent alors être estimés via un algorithme de type EM comme détaillé par (Daudin, Picard et al., 2008). La maximisation de la vraisemblance est alors faisable en temps raisonnable même sur des graphes avec plusieurs centaines de noeuds. De plus, comme nous le verrons par la suite, en section 5.1.5, l'introduction de ces paramètres conduit à un critère proche d'une relaxation de la vraisemblance profilée.

Dans le cas où le nombre de classes K est fixé, indépendant du nombre de noeuds (contrairement au résultat de (Choi et al., 2012)), (P. Bickel et al., 2013) montrent le résultat suivant.

Théorème 2.2 (P. Bickel et al., 2013). *Soit $\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (\text{Bernoulli}(\psi)), \boldsymbol{\theta}^*)$, tel que $\min_{kl} \frac{n\theta_{kl}^*}{\log(n)} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} +\infty$, Π est constante en n et $\boldsymbol{\theta}^*$ n'a aucune colonne identique. Alors, les transformations logit des estimateurs de $(\pi_k)_{1 \leq k \leq K}$ et $\boldsymbol{\theta}^*$ issus de l'approximation variationnelle (2.27), sont asymptotiquement convergent et normaux.*

Dans le cas d'un modèle DCSBM de modèles paramétriques Bernoulli, dans la situation où K est fixé, (Zhao et al., 2012) démontre un résultat de convergence. Pour énoncer ce résultat, il est nécessaire de définir quelques notations. Le principe de leur résultat est de regarder un critère Q de la forme

$$Q(\mathbf{c}) = F_K \left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{n\rho_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n} \right) \right) \quad (2.28)$$

où $n_k(\mathbf{c}) = \sum_{i=1}^n I(c_i = k)$ correspond au nombre de noeuds dans la classe k de la partition $\mathbf{c}$. Cela inclue notamment la modularité ou la vraisemblance profilée d'un modèle DCSBM de loi de Poisson avec $\mathcal{X} = \{y_1, \dots, y_M\}$.

Pour un tenseur $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{K \times K \times M}$, soient

$$H_{kl}(\mathbf{S}) = \sum_{abuv} y_u y_v \theta_{ab} S_{kau} S_{lbv} \quad (2.29)$$

et

$$h_k(\mathbf{S}) = \sum_{au} S_{kau} \quad (2.30)$$

Pour $\mathbf{S}$ bien choisi, $\mathbf{H}$ peut être vu comme une version moyennée de $\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{n\rho_n}$.

Pour que le critère soit convergent, il faut s'assurer que la partition obtenue par maximisation du critère soit suffisamment proche de la partition latente. Dans ce but, (Zhao et al., 2012) proposent de regarder la condition suivante

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \mapsto F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) \text{ admet un unique maximum sur l'ensemble} \\ \mathbb{S} = \{\mathbf{S} \mid \mathbf{S} \in \mathbb{R}_+^{K \times K \times M}, \sum_k S_{kau} = \Pi_{au}\}, \text{ égal à } \mathbf{S} = \mathbb{D} \text{ où } \mathbb{D}_{kau} = \Pi_{au} E_{ka} \text{ et} \\ E_{ka} \text{ est la matrice identité de taille } K \times K \text{ à une permutation près de ses lignes.} \end{aligned} \quad (*)$$

L'idée derrière cette condition est de voir $\mathbf{S}$ comme le tenseur qui compte le nombre d'erreur entre la partition estimée $\hat{\mathbf{c}}$ et la partition latent $\mathbf{c}^*$:

$$S_{kau} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{c}_i = k, c_i^* = a, x_i = y_u) \quad . \quad (2.31)$$

Ainsi, lorsque $\hat{\mathbf{c}} \approx \mathbf{c}^*$, $S_{kau} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(c_i^* = a, c_i^* = k, x_i = y_u) \approx E_{ka} \Pi_{au}$.

Ils démontrent alors les résultats suivants,

Théorème 2.3 (Zhao et al., 2012). *Soit une suite*

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (\text{Bernoulli}(\psi)), \rho_n \boldsymbol{\theta}) \quad . \quad (2.32)$$

Soit $0 < \rho_n \leq 1$, une suite décroissante telle que $n\rho_n \rightarrow \infty$ lorsque $n \rightarrow \infty$, et soit Q_n une suite de critère de la forme (2.28) pour une fonction F_K qui est Lipschitz¹ et vérifie (*).

Alors, Q_n est convergent.

A partir de ce théorème, ils démontrent la convergence de plusieurs critères classiques et notamment la modularité et la déviation à l'uniformité.

Corollaire 2.3.1 ((Zhao et al., 2012)). *Sous les hypothèses du théorème 2.3, la condition pour que la modularité ($\gamma = 1$) soit convergente s'écrit comme*

$$\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} > 0 \text{ if } k = l \quad \text{and} \quad \tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} < 0 \text{ if } k \neq l \quad (M)$$

où $\tilde{\theta}_0 = \sum_{kl} \tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}$, $\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} = \frac{\tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}}{\tilde{\theta}_0}$, et $\tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} = (\tilde{\boldsymbol{\theta}}^{(\Pi)} \mathbb{1})(\tilde{\boldsymbol{\theta}}^{(\Pi)} \mathbb{1})^T$.

Si l'on se restreint au cas d'un SBM, la déviation à l'uniformité ($\gamma = 1$) est convergente si

$$\theta_{kk} > \tilde{\theta}_0, \quad \theta_{kl} < \tilde{\theta}_0 \quad \forall k \neq l \quad (U)$$

où $\tilde{\theta}_0 = \sum_{kl} \pi_k \pi_l \theta_{kl}$.

De plus, dans le cas où l'on prend la vraisemblance de profil, alors la condition supplémentaire sur les paramètres du modèle est toujours vérifiée.

Corollaire 2.3.2 (Zhao et al., 2012). *Sous les hypothèses du théorème 2.3, la vraisemblance de profile plk définie en (2.19) avec des lois de Poisson est convergente indépendamment des paramètres du modèle.*

Un autre résultat important dans le cas où K croît très vite avec n est donné par (Rohe, Qin et al., 2014), ce qui implique qu'il existe de nombreux blocs de très petites tailles. Pour cela, ils font l'hypothèse que les paramètres inter-blocs sont les mêmes.

Théorème 2.4 (Rohe, Qin et al., 2014). *Soit $\mathbf{c}^*, \mathbf{W} \sim \text{SBM}(n, \Pi, (\text{Bernoulli}(\psi))_\psi, \boldsymbol{\theta}^*)$ et soit s la taille de la plus petite classe de $\mathbf{c}^*$. Sous les hypothèses que $s = \omega(\log^\beta(n))$, $\beta > 4$ et qu'il existe un ensemble H tel que*

$$\theta_{kl}^* \in \begin{cases} (\log^{-1}(n), 1 - \log^{-1}(n)) & \text{si } k = l \text{ ou si } k < l \text{ et } \{k, l\} \in H \\ (1/n^2, Cf(n)/n) & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.33)$$

avec C est une constante et $f(n) = o(s/\log(n))$.

Alors, sous certaines hypothèses sur les paramètres $\boldsymbol{\theta}^*$ et l'ensemble H , le critère défini comme

$$\mathbf{c} \mapsto \max_{\boldsymbol{\theta} \in T} plk(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{W}, \text{Bernoulli}) \quad , \quad (2.34)$$

où $T = \{\boldsymbol{\theta} \in [0, 1]^{K \times K} \mid \forall 1 \leq k \neq l \leq K, 1 \leq k' \neq l' \leq K, \theta_{kl} = \theta_{k'l'}\}$, est convergent.

1. F est Lipschitz au sens où $|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_1 \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\max} + L_2 \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_2$.

Il existe aussi des résultats de convergence dans le cas de modèles avec des poids différents de 0 et 1. Par exemple, on peut citer le résultat de (Ng et Murphy, 2021), qui démontre sous certaines hypothèses, la convergence de l'estimateur du maximum de vraisemblance sous un modèle $\mathbf{SBM}(n, \Pi, (\text{Gamma}(\psi))_\psi, \theta^*)$.

La modélisation présentée ici suppose que conditionnellement à la partition latente, les poids du graphe sont indépendants. Cependant, cette hypothèse peut être limitante. C'est pourquoi (Schweinberger, 2020) considère des modèles par blocs où les poids à l'intérieur d'un même bloc peuvent être dépendants. Dans le cas de poids de loi discrète à support fini, sous certaines hypothèses, il montre que le maximum de vraisemblance est un critère convergent.

Les deux concepts précédents sont basés sur des modèles paramétriques particuliers. Cependant, notamment dans l'industrie il peut y avoir des valeurs aberrantes dues à des erreurs de mesures ou des erreurs d'arrondi dues à la précision des méthodes de mesures. Cela peut entraîner des mauvaises spécifications dans les modèles. Des méthodes particulières pour étudier et limiter l'influence de ces mauvaises spécifications ont été développées dans la littérature. Une présentation de certaines de ces méthodes fait l'objet de la prochaine section. Dans le chapitre 4 nous utilisons ces notions pour construire des estimateurs robustes sur des graphes.

2.2 Divergence et robustesse

Les modèles paramétriques sont très répandus en statistique. Ils sont très pratiques, car ils permettent de représenter un échantillon entier uniquement à partir d'un nombre réduit d'informations (moyenne, variance, ...) qui sont souvent des approximations des paramètres du modèle. Cependant, il est peu réaliste de considérer qu'un modèle paramétrique puisse correspondre exactement aux données réelles. Les déviations à un modèle paramétrique peuvent être de différentes natures (Hampel et al., 2011). Cela peut être dû à des erreurs d'arrondi, des erreurs de mesures/notations dans les données, le modèle peut être lié à une approximation (par exemple le théorème central limite), ou encore une structure d'indépendance entre les données qui ne serait pas vérifiée.

L'estimation robuste a de nombreuses applications. Par exemple, en agronomie, où (Daniel, 1976) étudie le nombre de plants de salades en fonction de différents fertilisants. (J. C. Duchi, Glynn et al., 2021) utilisent ces concepts pour faire des estimations robustes de quantités financières avec des applications à la gestion de portefeuille.

2.2.1 Robustesse et mauvaises spécifications

La robustesse est un concept complexe. En effet, on peut chercher à avoir des estimateurs robustes à différentes situations. Peut-être la situation la plus courante est la robustesse aux valeurs aberrantes (*outliers*). Dans ce cas-là, un exemple classique est la comparaison entre la moyenne et la médiane (c.f. Figure 2.2).

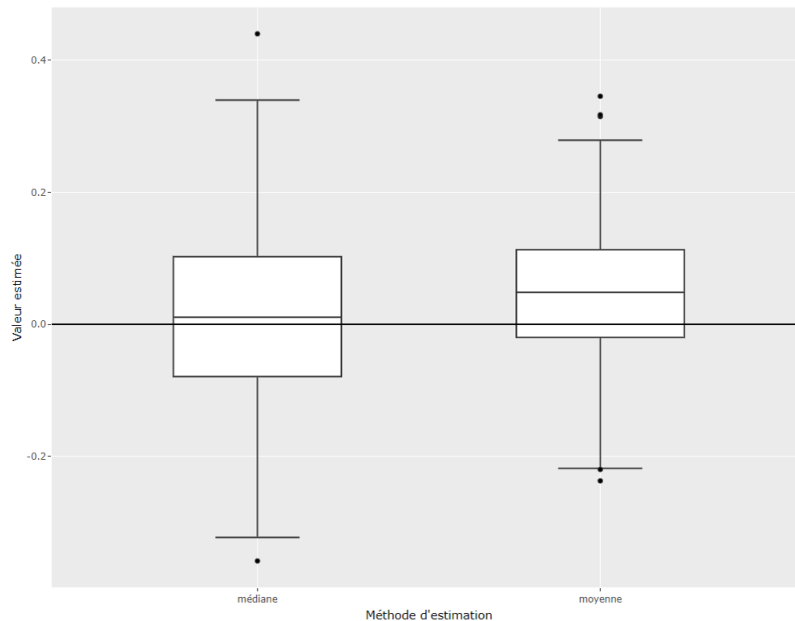


FIGURE 2.2 – Comparaison pour l'estimation de la moyenne entre l'estimateur empirique et de la médiane sur 500 réplifications d'un échantillon composé de 99 points tirés selon une loi normale centrée réduite et d'une valeur aberrante à 5

Cependant, on peut aussi vouloir de la robustesse aux *inliers*. Cela correspond souvent à des situations où les données récoltées sont “trop proche” des régions de haute densité de la loi sous-jacente. L’estimation conduit alors à sous estimer les queues de distribution ou la variabilité de la loi.

Enfin de manière générale, on peut aussi vouloir être robuste en terme de distribution. C’est à dire que l’on peut chercher un estimateur qui performant non seulement pour la loi des données observées, mais aussi pour n’importe quelle loi proche de la loi des données.

Pour étudier la robustesse aux valeurs aberrantes un des outils les plus classiques est la fonction d’influence (Huber et Ronchetti, 2009).

Définition 2.10 (Fonction d’influence). Soit $\mathbf{T}(F)$ un estimateur pour une distribution F . La **fonction d’influence** de l’estimateur $\mathbf{T}$ en F au point $\mathbf{x}$ est donnée par

$$IF(F, G) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathbf{T}((1-t)F + tG) - \mathbf{T}(F)}{t} \quad (2.35)$$

On dit aussi que la distribution F est **contaminée** par la distribution G .

Remarque 2.5. Bien que la fonction soit définie pour une loi G quelconque, elle est souvent associée au cas où G représente une valeur aberrante, i.e. $G = \delta_{\{x\}}$.

Définition 2.11 (B-robustesse). Un estimateur est dit **B-robuste** si avec les mêmes notations que dans la définition précédente, la fonction d’influence est bornée, i.e.

$$\sup_{x \rightarrow \infty} |IF(F, \delta_x)| < \infty \quad . \quad (2.36)$$

La fonction $\sup_{x \rightarrow \infty} |IF(F, \delta_x)|$ est appelée **erreur de sensibilité brute**.

Cependant, cette manière d’appréhender la robustesse n’est pas toujours la plus appropriée, en particulier dans le cas discret. En effet, (Lindsay, 1994) illustre, sur des données Binomiale(12,0.5) contaminées par un Dirac en 12 avec probabilité ϵ , que bien que le minimum de la distance d’Hellinger semble être très performant pour ϵ “petit”, il existe un seuil à partir duquel, cet estimateur est toujours égal à 1 et donc non robuste. Alors qu’à contrario, l’estimateur du maximum de vraisemblance a lui un biais linéaire en ϵ . Cet exemple est illustré sur la figure 2.3.

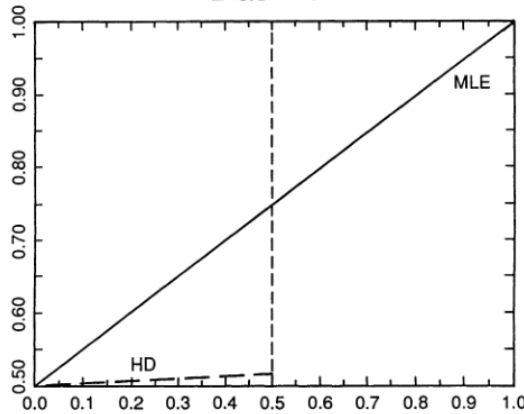


FIGURE 2.3 – Comparaison entre l’estimateur du maximum de vraisemblance (MLE) et celui du minimum de la distance de Hellinger (HD) pour différentes proportions de contamination dans un modèle binomial.

Ce genre de point limite est appelé *breakdown (point)* dans la littérature.

Définition 2.12 (Breakdown). On dit qu’un estimateur T a un *breakdown point* en F pour une contamination de niveau ϵ , s’il existe une suite K_n telle que $T((1-\epsilon)F + \epsilon K_n) - T(F) \rightarrow \infty$ pour $n \rightarrow \infty$.

On appelle *breakdown point* ϵ^* , la plus petite valeur de ϵ telle que c’est un *breakdown*.

Ainsi, (Lindsay, 1994) propose de regarder ce qu’il appelle les résidus de Pearson.

Définition 2.13 (Résidus de Pearson). Pour un modèle de densité p_θ et une distribution d , les résidus de Pearson, est la fonction définie comme

$$x \mapsto \delta(x) = \frac{d(x) - p_\theta(x)}{p_\theta(x)} \quad (2.37)$$

Remarque 2.6. Dans le cadre des divergences, cette fonction apparaît naturellement. En notant $\tilde{\varphi}(x) = \varphi(x + 1)$, on obtient

$$D_{\varphi}(P, Q) = \int \varphi\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right) dQ(x) = \int \varphi\left(\frac{p(x) - q(x)}{q(x)} + 1\right) dQ(x) = \int \tilde{\varphi}(\delta(x)) dQ(x) \quad (2.38)$$

En considérant la famille de critères de la forme

$$\sum_x A(\delta(x)) \nabla_{\theta} p_{\theta} = 0 \quad , \quad (2.39)$$

la fonction $A(\delta)$ est appelée **fonction d'ajustement résiduelle** (RAF pour *Residual Adjustment Function*).

Cette famille de critères inclut notamment les φ -divergences.

Définition 2.14 (Efficacité d'ordre 2). On appelle efficacité d'ordre 2, E_2 , d'un estimateur T comme

$$E_2 = \min_{a, \lambda} \text{Var} \left(U(\theta) - a(\theta)[T - \theta] - \lambda(\theta)[T - \beta]^2 \right) \quad (2.40)$$

et U est la fonction de score d'un échantillon *i.i.d.*.

Dans le cas d'un estimateur d'une φ -divergence de RAF $A(\delta)$,

Proposition 2.1 ((Lindsay, 1994)).

$$E_2[D_{\varphi}] = E_2[MLE] + A_2^2 D \quad (2.41)$$

où D est une constante dépendant uniquement du modèle et A_2 uncoefficient tel que $A(\delta) \approx \delta + A_2 \frac{\delta^2}{2}$.

L'étude de ce coefficient A_2 est intéressante car il représente une approximation quadratique plutôt qu'une approximation linéaire comme dans la fonction d'influence. Or, ces deux approximations peuvent être très différentes dans certains cas.

Remarque 2.7. Cette approche a été notamment étudiée dans le cas discret par (Lindsay, 1994) et (Jiménez et Shao, 2001). Cependant, dans le cas continu, (Toma et Broniatowski, 2011) notent que cette approche n'est pas évidente à utiliser en pratique et préfèrent donc la fonction d'influence.

Une autre propriété intéressante pour un estimateur que l'on peut rechercher, est la robustesse aux mauvaises spécifications. C'est à dire que l'on se donne un modèle paramétrique $(P_{\theta})_{\theta}$, mais l'on considère que la véritable distribution d'intérêt F peut ne pas en faire partie. Dans ce cas, on cherche à étudier la projection de F sur le modèle paramétrique. Cette projection peut être définie comme

$$\min_{\theta} D(P_{\theta} | F) \quad (2.42)$$

Dans ce cas l'objet que l'on regarde est $\theta^* = \text{argmin}_{\theta} D(P_{\theta} | F)$.

Ce problème est différent du problème de robustesse où on a une distribution P_{θ_0} contaminée par une distribution G et où l'on cherche des estimateurs qui permettent de retrouver θ_0 malgré cette contamination.

Plus généralement, une autre approche, notamment considérée par (J. C. Duchi et Namkoong, 2021), consiste à choisir un estimateur qui est performant sur toutes les distributions proches de la loi des données. Ainsi, l'estimateur est robuste à certaines mauvaises spécifications. D'un point de vue statistique, si on considère un problème d'estimation des paramètres d'un modèle, comme la minimisation pour $\theta \in \Theta$ de $E_F[l(\theta, \mathbf{X})]$, où F est la loi des données, alors une possibilité est de regarder à la place

$$\min_{\theta \in \Theta} \sup_{D_{\varphi}(G | F) \leq \rho} E_G[l(\theta, \mathbf{X})] \quad . \quad (2.43)$$

2.2.2 Divergences

Les divergences, aussi appelées φ -divergences représentent une famille de critères statistiques permettant d'évaluer l'écart entre deux distributions de probabilité. Introduites initialement par (Csiszár, 1963) et (Ali et Silvey, 1966) dans le but notamment de comparer un signal et une version bruitée, elle a depuis été utilisée dans des cadres plus larges. Par exemple, (Mohamad et Broniatowski, 2019) utilisent les divergences pour étudier le nombre de modes dans la distribution de la vitesse de 82 galaxies dans la région de la couronne boréale. (Qiao et Minematsu, 2010) utilisent les divergences en reconnaissance du langage pour avoir une robustesse à des variations non linguistiques, telles que les changements de voix des interlocuteurs ou de micros.

Pour une fonction φ convexe telle que $\varphi(1) = 0$, la φ -divergence associée entre deux mesures de probabilités P et Q admettant une dérivée de Radon, est définie comme

$$D_{\varphi}(P, Q) = \int \varphi\left(\frac{dP}{dQ}\right) dQ \quad (2.44)$$

En particulier, on a que $D_\varphi(P, Q) \geq 0$, avec égalité si et seulement si $P = Q$ Q -p.s. .

Cette classe de critères ne donne pas toujours des distances, car en général, $D_\varphi(P, Q) \neq D_\varphi(Q, P)$. Elle contient cependant de nombreux critères classiques en statistique :

- La divergence de Kullback-Leibler, $\varphi(x) = -\log(x)$

$$D_{KL}(P, Q) = \int \log \left(\frac{dQ}{dP} \right) dQ$$

- La divergence de Kullback-Leibler inverse, $\varphi(x) = x \log(x)$

$$D_\varphi(P, Q) = \int \log \left(\frac{dP}{dQ} \right) dP$$

- La divergence du χ^2 , $\varphi(x) = (x - 1)^2$

$$D_\varphi(P, Q) = \int \frac{(dP - dQ)^2}{dQ}$$

- La distance de Hellinger, $\varphi(x) = (\sqrt{x} - 1)^2$

$$D_\varphi = \int (\sqrt{dP} - \sqrt{dQ})^2$$

- La distance L_1 , $\varphi(x) = |x - 1|$

$$D_\varphi(P, Q) = \int |dP - dQ|$$

Parmi elles, il existe différentes familles de divergences (Ghosh et al., 2017). L'une des plus courantes est la famille de Cressie–Read qui est définie pour $\gamma \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$ par

$$\varphi(x) = \varphi_\gamma(x) = \frac{x^\gamma - \gamma x + \gamma - 1}{\gamma(\gamma - 1)} \quad (2.45)$$

De plus, les φ -divergences peuvent être aussi utilisées comme mesure de dépendance. Par exemple, (Y. Chang et al., 2016) considèrent la distance L_1 entre un estimateur de la copule des données et la copule d'indépendance.

De manière générale, les divergences sont intéressantes pour comparer des copules, car pour deux distributions F et G admettant une densité, si elles ont les mêmes loi marginales, alors $D_\varphi(F, G) = D_\varphi(C_F, C_G)$, où C_F et C_G sont les fonctions copules de F et G .

Les divergences font parties de la classe plus générale des mesures de disparités. Parmi elles, on peut aussi citer des familles importantes comme celle des disparités de Cramér-von Mises définies comme

$$CvM(F, G; w) = \int (F(x) - G(x))^2 w(x) dx \quad (2.46)$$

Où w est appelée fonction de poids.

Une autre de ces classes qui fait partie de la famille des divergences est la classe des divergences de BHHJ (Basu, Harris et al., 1998) (du nom de ses inventeurs Basu, Harris, Hjort et Jones) définies pour $\alpha > 0$ comme

$$d_\alpha(f, g) = \int \left[f^{1+\alpha}(\mathbf{x}) - \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) g(\mathbf{x}) f^\alpha(\mathbf{x}) + \frac{1}{\alpha} g^{1+\alpha}(\mathbf{x}) \right] d\mathbf{x} \quad (2.47)$$

et $d_0(g, f) = KL(g, f)$.

Ces divergences font partie de la famille des pseudo-distances.

Définition 2.15 (Pseudo-distance). Une fonction $D : (F, G) \mapsto D(F, G)$ est une **pseudo-distance** si D est positive et $D(F, G) = 0$ si et seulement si $F = G$.

2.2.3 Estimateurs des divergences et propriétés de robustesse

Il existe de nombreux estimateurs des divergences présents dans la littérature. On suppose pour cela qu'on dispose d'un échantillon *i.i.d.* $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n$. Suivant les hypothèses faites sur la loi des $(\mathbf{X}_i)_{1 \leq i \leq n}$, différents estimateurs ont été proposés.

Commençons par regarder le cas où les données sont continues avec un support fini, que l'on suppose sans perte de généralité être $\{1, \dots, M\}$. Dans ce cas-là, l'estimateur le plus classique sous un modèle $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$,

$\Theta \subset \mathbb{R}^d$ est donné par

$$\hat{\theta} \in \min_{\theta \in \Theta} D_\varphi(P_\theta, \hat{F}) \quad (2.48)$$

où $\hat{F}$ est simplement la fonction de répartition empirique $\hat{F}(j) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(X_i = j)$.

Cet estimateur est souvent appelé estimateur du minimum de la φ divergence, noté $M\varphi E$. Il a les propriétés suivantes :

Théorème 2.5 (Morales et al., 1995). *Soit un échantillon $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d.}{\sim} P_{\theta_0}$. Sous les hypothèses,*

1. θ_0 appartient à l'intérieur de Θ ,
2. la fonction $\theta \mapsto p_\theta$ est continument différentiable sur un voisinage ouvert de θ_0 et on a lorsque $\theta \rightarrow \theta_0$, pour tout $1 \leq j \leq M$

$$p_\theta(j) = p_{\theta_0}(j) + (\theta - \theta_0) p_{\theta_0}^T(j) + o(\|\theta - \theta_0\|)$$

3. La matrice d'information de Fisher $\mathbf{I}(\theta_0)$ est définie positive et $M - d - 1 > 0$
4. la fonction P_θ^{-1} définie comme l'inverse de

$$P_\theta : \Theta \rightarrow \left\{ (p(1), \dots, p(M)) \mid p(j) \geq 0, \sum_j p(j) = 1 \right\}$$

existe et est continue au point θ_0 .

alors

1. $\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\theta} = \theta_0$, p.s.
2. $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0) \approx N(0, \mathbf{I}(\theta_0)^{-1})$

Dans le cas où les données sont continues, il n'est plus possible de simplement utiliser la fonction de répartition empirique. En effet, dans ce cas-là, la divergence étant définie à travers une intégrale, et les deux fonctions n'étant pas absolument continues par rapport à une mesure commune, l'estimateur n'est pas défini.

Ainsi, un estimateur proposé par (Beran, 1977) dans le cas de la distance de Hellinger et dans le cadre plus général par (Park et Basu, 2004), est d'utiliser un estimateur à noyau pour la densité plutôt que la fonction de répartition empirique.

Considérons l'estimateur à noyau

$$f_n(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) \quad (2.49)$$

où $h = h_n > 0$ est la taille de fenêtre et K un noyau.

On note $T(F) = \operatorname{arginf}_{\theta \in \Theta} D(F, P_\theta)$.

Théorème 2.6 (Park et Basu, 2004). *Soit $\mathcal{F}$ l'ensemble des distributions admettant une densité par rapport à une mesure dominante. Soit $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ un modèle paramétrique inclus dans $\mathcal{F}$. Supposons que $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d.}{\sim} F = P_{\theta^*}$. Supposons que l'espace des paramètres Θ est compact, que pour tous $\theta_1 \neq \theta_2$, $p_{\theta_1} \neq p_{\theta_2}$ sur un ensemble de mesure strictement positive, $\theta \mapsto p_\theta(x)$ est une fonction continue pour presque tout x et $\varphi(0)$ ainsi que $\varphi'(\infty)$ sont finies. Alors*

1. pour toute loi $F \in \mathcal{F}$, il existe $\theta \in \Theta$ tel que $T(F) = \theta$;
2. pour tout P_θ , $\theta \in \Theta$, $T(P_\theta) = \theta$ est unique.

Théorème 2.7 (Park et Basu, 2004). *Soit $\mathcal{F}$ l'ensemble des distributions admettant une densité par rapport à une mesure dominante. Soit $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ un modèle paramétrique inclus dans $\mathcal{F}$. Supposons que $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d.}{\sim} F = P_{\theta^*}$. Supposons que l'espace des paramètres Θ est compact, que pour tous $\theta_1 \neq \theta_2$, $p_{\theta_1} \neq p_{\theta_2}$ sur un ensemble de mesure strictement positive, $\theta \mapsto p_\theta(x)$ est une fonction continue pour presque tout x et $\varphi(0)$ ainsi que $\varphi'(\infty)$ sont finies. Alors*

1. pour toute loi $F \in \mathcal{F}$, il existe $\theta \in \Theta$ tel que $T(F) = \theta$;
2. pour tout P_θ , $\theta \in \Theta$, $T(P_\theta) = \theta$ est unique.

De plus, si φ' est bornée sur $[-1, +\infty]$, alors $T(F)$ est unique et la fonctionnelle $T(F_n)$ est continue en $T(F)$ au sens où $T(F_n)$ converge vers $T(F)$ lorsque $f_n \rightarrow f$ dans L_1 .

Dans le cas où $f = p_{\theta^*}$, $T(F_n) \rightarrow \theta$ et $D_\varphi(P_{T(F_n)}, P_{\theta^*}) \rightarrow \infty$.

Théorème 2.8 (Kuchibhotla et Basu, 2015). Soit $\mathcal{F}$ l'ensemble des distributions admettant une densité par rapport à une mesure dominante. Soit $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ un modèle paramétrique inclus dans $\mathcal{F}$. Supposons que $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d.}{\sim} F$. En notant $\theta^* = T(F)$ et sous plusieurs conditions techniques, l'estimateur $\hat{\theta}$ de θ^* est asymptotiquement normal,

$$\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*) \xrightarrow{d} N(0, M(\theta^*)) \quad (2.50)$$

où $M(\theta^*)$ est une certaine matrice, qui dans le cas où $F = F_{\theta_0}$ est égale à $\mathbf{I}^{-1}(\theta_0)$, l'inverse de la matrice d'information de Fisher de F_{θ_0} .

L'utilisation d'un estimateur à noyau complique l'analyse du critère et de ses propriétés. Ainsi, (Basu et Lindsay, 1994) proposent d'appliquer le même lissage au modèle paramétrique que celui appliqué aux données, i.e. de regarder

$$\operatorname{arginf}_{\theta \in \Theta} D(F_n, K * P_\theta) \quad (2.51)$$

Dans un cas particulier, appelé *transparent kernel*, (Basu et Lindsay, 1994) démontrent que l'estimateur retrouve les propriétés classiques de l'estimation sans lissage.

Proposition 2.2 (Park et Basu, 2004). Soit $\mathcal{F}$ l'ensemble des distributions admettant une densité par rapport à une mesure dominante. Soit $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ un modèle paramétrique inclus dans $\mathcal{F}$. Supposons que $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d.}{\sim} F$. Alors, sous certaines conditions techniques, le breakdown point ϵ^* pour le modèle contaminé $(1-\epsilon)F + \epsilon G$ vérifie $\epsilon^* \geq 0.5$ pour tout $G \in \mathcal{F}$.

Une autre approche pour l'estimation à l'aide de divergences a été proposée par (Broniatowski et Keziou, 2006). Elle consiste à utiliser une représentation duale des φ -divergences. Pour un modèle paramétrique $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$, il est alors possible d'écrire la divergence entre les lois de paramètres θ et θ^* comme

$$D(P_\theta, P_{\theta^*}) = \sup_{\alpha \in \Theta} \left\{ \int \varphi' \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) dP_\theta - \int \left[\frac{p_\theta}{p_\alpha} \varphi' \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) - \varphi \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) \right] dP_{\theta^*} \right\} \quad (2.52)$$

En pratique, si l'on considère que les données sont générées selon le modèle de paramètre θ^* inconnu, (Broniatowski et Keziou, 2009) proposent comme estimateur

$$\hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*}) = \sup_{\alpha \in \Theta} \left\{ \int \varphi' \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) dP_\theta - \int \left[\frac{p_\theta}{p_\alpha} \varphi' \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) - \varphi \left(\frac{p_\theta}{p_\alpha} \right) \right] dF_n \right\} \quad (2.53)$$

où F_n est la fonction de répartition empirique de l'échantillon $X_1, \dots, X_n$.

Cet estimateur a les propriétés suivantes

Théorème 2.9 (Broniatowski et Keziou, 2009). Sous l'hypothèse que les $X_1, \dots, X_n$, sont i.i.d. de loi P_{θ^*} , alors sous certaines hypothèses de régularité du modèle et de la divergence,

- $\hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*}) \xrightarrow{\mathbb{P}} D(P_\theta, P_{\theta^*})$.
- $\frac{2n}{\varphi(1)''} \hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*})$ converge en loi vers un variable aléatoire de loi $\chi^2(d)$.
- Si $\theta \neq \theta^*$, alors $\sqrt{n} \left(\hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*}) - D(P_\theta, P_{\theta^*}) \right)$ converge en loi vers une loi normale centrée.
- L'estimateur $\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta \in \Theta} \hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*})$ existe, est convergent et $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta^*) \xrightarrow{d} N(0, \mathbf{I}_{\theta^*}^{-1})$.

Sous des modèles particuliers, (Toma et Broniatowski, 2011) démontrent des propriétés de robustesse des estimateurs pour la forme duale des divergences.

Proposition 2.3 (Toma et Broniatowski, 2011). Dans le cas des modèles d'échelle i.e. dont la densité s'écrit $p_\theta(x) = \frac{1}{\theta} p\left(\frac{x}{\theta}\right)$, si l'hypothèse $\int |up'(u)| du < \infty$ et une certaine hypothèse de régularité sont vérifiées, alors sous une hypothèse propre à chacun des deux cas,

- l'estimateur issu de la représentation duale des divergences de Cressie-Read avec $\gamma > 0$ est B-robuste,
- l'estimateur issu de la représentation duale des divergences de Cressie-Read avec $\gamma < 0$ est B-robuste.

Proposition 2.4 (Toma et Broniatowski, 2011). Dans le cas des modèles de position i.e. dont la densité s'écrit $p_\theta(x) = p(x - \theta)$, sous une hypothèse de régularité sur le modèle qui dépend de γ , l'estimateur issu de la représentation duale des divergences de Cressie-Read est B-robuste.

(Al Mohamad, 2018) note cependant que lorsque les données ne sont pas issues du modèle P_{θ^*} , l'estimateur $\hat{D}(P_\theta, P_{\theta^*})$ n'est pas convergent. Ainsi, l'idée qui est proposée est de remplacer la distribution p_α dans la

formulation duale par une distribution à noyau. En particulier en notant K_n , la densité d'un estimateur à noyau basé sur l'échantillon $X_1, \dots, X_n$, l'estimateur proposé par (Al Mohamad, 2018) est défini comme

$$\hat{D}_\varphi(p_\theta, F) = \int \varphi' \left(\frac{p_\theta}{K_n} \right) (x) p_\theta(x) dx - \int \varphi^\# \left(\frac{p_\theta}{K_n} \right) (x) dF_n(x) \quad (2.54)$$

où $\varphi^\#(x) = x\varphi'(x) - \varphi(x)$.

Sous certaines conditions, (Al Mohamad, 2018) démontre la convergence de l'estimation vers le paramètre cible (au sens de la projection de F sur $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$).

2.2.4 Divergence, classification et robustesse

Il existe différentes notions de mauvaises spécifications dans les SBM.

(Cai et X. Li, 2015) proposent une généralisation du modèle SBM (Bernoulli) en considérant que sur un graphe avec n nœuds, n_{in} sont effectivement générés selon un SBM et $n_{out} = n - n_{in}$ sont générés selon une loi quelconque (toujours avec des poids 0 ou 1). Alors, ils donnent une méthode basée sur une relaxation convexe de la formule de la vraisemblance du modèle particulier, qui permet sous certaines conditions, de retrouver correctement les paramètres et la partition de la partie SBM, et de différencier les nœuds selon une loi quelconque.

Une approche différente, considérée notamment par (Massoulié, 2014), consiste à générer un graphe selon un SBM puis à changer une certaine proportion d'arêtes. Ce changement peut être alors fait soit au hasard, soit de manière à rendre l'estimation des classes la plus difficile possible. (Massoulié, 2014) propose alors un algorithme spectral pour estimer les paramètres du modèle mal spécifié.

Les divergences ont été peu utilisées pour construire des critères de classification sur des graphes. L'un des rares travaux utilisant des divergences et des graphes est celui de (Makarychev et al., 2016). Ils utilisent alors le résultat suivant pour montrer que leur estimateur de la partition du graphe, sous un SBM de loi de Bernoulli, est robuste à quelques mauvaises spécifications du modèle en terme de distance de Kullback-Leibler.

Proposition 2.5. *Soient deux distributions P et Q sur le même espace Ω , pour tout événement $E \in \Omega$,*

$$Q(E) \leq \max \left\{ \frac{2KL(Q, P)}{1 - \log(P(E))}, e\sqrt{2P(E)} \right\} \quad (2.55)$$

(Makarychev et al., 2016) utilisent alors ce résultat pour exprimer des propriétés de robustesse de l'estimation sous un SBM de loi de Bernoulli.

Les modèles de graphes par blocs permettent de modéliser des liens entre deux caractéristiques. De plus, le fait de regrouper les caractéristiques en blocs permet de connaître les variables qui dépendent des mêmes facteurs lors de la production. La présence de ces blocs de variables ayant un comportement similaire, implique qu'une modification du procédé de fabrication de l'une d'elle va influencer, a minima, sur les autres caractéristiques du même bloc. Ainsi, d'un point de vue industriel, il est important de pouvoir modéliser non seulement des caractéristiques de manière individuelle, mais aussi des groupes de caractéristiques. Parmi les outils statistiques pour modéliser ces groupes, les copules sont particulièrement intéressantes. Elles sont particulièrement adaptées pour estimer la probabilité de produire une pièce conforme (c.f. Section 6.1).

2.3 Copules et dépendance

La structure de dépendance entre des variables peut être caractérisée à travers la fonction dite copule. Cette fonction est une version "uniformisée" de la loi des données. C'est-à-dire que les lois marginales des données sont transformées en loi uniforme, et la copule correspond à la loi de ces données transformées. Ainsi, il ne reste que la structure de dépendance sans les effets des lois marginales.

Les copules sont utilisées dans de nombreux domaines. Par exemple en finance (Kurowicka et Joe, 2010), le retour sur investissement sur d années d'un placement financier se définit comme $100 \times (1 + X_1) \times \dots \times (1 + X_d)$ où le taux d'intérêt sur l'année i est noté X_i . Ces taux $X_1, \dots, X_d$ n'étant pas indépendants, il est possible d'utiliser les copules pour modéliser cette dépendance et en déduire le retour sur investissement.

En fiabilité, les performances d'un système sont souvent modélisées par une fonction g d'un vecteur $\mathbf{X} = X_1, \dots, X_d$. On appelle alors domaine de fiabilité l'ensemble $\{\mathbf{X} | g(\mathbf{X}) > 0\}$. L'ensemble $\{\mathbf{X} | g(\mathbf{X}) \leq 0\}$ est l'ensemble des états défectueux. Il est alors important de connaître la probabilité qu'un événement $\mathbf{X}$ soit un état défectueux. Cela requiert de connaître la structure de dépendances entre les variables $X_1, \dots, X_d$. Les copules peuvent alors être utilisées pour modéliser cette structure (Jiang et al., 2015).

Les copules sont aussi utilisées par (Fatahi et al., 2011) pour modéliser la dépendance entre deux caractéristiques et ainsi construire une méthodologie pour détecter au plus tôt les dérives de production.

Dans cette section, nous rappelons quelques définitions classiques des copules ainsi que de mesures de dépendances. Nous accorderons une attention particulière à la famille de copules appelée copules arborescentes (*vine copula*).

Définition 2.16 (Copule). Une fonction C , de $[0, 1]^d$ dans $[0, 1]$ est appelée **copule** si

- $C(u_1, \dots, u_{i-1}, 0, u_{i+1}, \dots, u_d) = 0$, pour tout vecteur $\mathbf{u} \in [0, 1]^d$ et tout indice $i \in \{1, \dots, d\}$,
- $C(1, \dots, 1, u, 1, \dots, 1) = u$, pour tout $u \in [0, 1]$,
- C est d croissante, i.e. pour tout hyper-rectangle $B = \prod_{i=1}^d [x_i, y_i] \in [0, 1]^d$, le volume de B pour C est positif :

$$\int_B dC(\mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{z} \in \prod_{i=1}^d \{x_i, y_i\}} (-1)^{N(\mathbf{z})} C(\mathbf{z}) \geq 0 \quad (2.56)$$

Une manière plus probabiliste de définir une copule est de la définir comme la fonction de répartition d'un vecteur aléatoire sur $[0, 1]^d$ et dont les marges sont uniformes sur $[0, 1]$.

Un des intérêts d'introduire la fonction copule est qu'elle permet de séparer l'influence des lois marginales de la structure de dépendance. Cela est représenté par le théorème de (Sklar, 1959) :

Théorème 2.10 ((Sklar, 1959)). Soit $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$ un vecteur aléatoire de fonction de répartition F et tel que la loi marginale des variables X_i est F_i . Alors il existe une copule C telle que pour tout $\mathbf{x} \in [0, 1]^d$,

$$F(x_1, \dots, x_d) = C(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) \quad (2.57)$$

De plus, si les lois marginales $F_1, \dots, F_d$ sont continues, alors la copule est définie de manière unique.

Corollaire 2.10.1. Si elle existe, la densité du vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ peut s'écrire comme

$$f(\mathbf{x}) = c(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) \times f_1(x_1) \times \dots \times f_d(x_d). \quad (2.58)$$

où $c = \frac{\partial^d C}{\partial u_1, \dots, \partial u_d}(u_1, \dots, u_d)$ est la densité de la copule et les $f_1, \dots, f_d$ sont les densités des lois marginales $F_1, \dots, F_d$.

Définition 2.17 (Copule conditionnelle (Patton, 2004)). On appelle **copule conditionnelle** des variables U_i et U_j par rapport à un ensemble de variables $\mathbf{U}_D$, la copule définie comme

$$C_{i,j|D}(u, v|\mathbf{u}_D) = \mathbb{P}(U_{i|D} \leq u, U_{j|D} \leq v | \mathbf{U}_D = \mathbf{u}_D) \quad (2.59)$$

Ou de manière équivalente,

$$C_{i,j|D}(u, v|\mathbf{u}_D) = F_{i,j|D} \left(F_{i|D}^{-1}(u|\mathbf{u}_D), F_{j|D}^{-1}(v|\mathbf{u}_D) | \mathbf{u}_D \right) \quad (2.60)$$

Tout comme les copules classiques, il existe un théorème de Sklar pour les copules conditionnelles (Patton, 2004).

Les copules possèdent aussi la propriété d'être invariantes par transformation strictement croissante. On parle d'invariance.

Théorème 2.11. Soient $X_1, \dots, X_n$ des variables aléatoires continues de copule C . Alors pour toutes fonctions $g_1, \dots, g_d$ strictement croissantes, la copule du vecteur aléatoire $g_1(X_1), \dots, g_d(X_d)$ est aussi C .

Une autre des propriétés particulières des copules est qu'elles sont Lipschitz.

Proposition 2.6. Soit C une fonction copule, $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$, deux vecteurs de $[0, 1]^d$, alors

$$|C(u_1, \dots, u_d) - C(v_1, \dots, v_d)| \leq \sum_{i=1}^d |u_i - v_i| \quad (2.61)$$

2.3.1 Copules particulières

La littérature sur les copules est vaste et de nombreuses familles de copules ont été introduites. Dans cette section, nous en présentons quelques unes des plus classiques.

Définition 2.18 (Copule d'indépendance). La **copule d'indépendance** est la copule associée à un vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ dont les variables sont indépendantes. On a alors

$$C(u_1, \dots, u_d) = \prod_{i=1}^d u_i \quad (2.62)$$

pour tout vecteur $\mathbf{u} \in [0, 1]^d$.

De plus, on a que des variables $X_1, \dots, X_d$ sont indépendantes si et seulement si leur copule est la copule d'indépendance.

Définition 2.19 (Copule de survie). Soit $\mathbf{U}$ un vecteur aléatoire de copule C . On appelle **copule de survie** la fonction

$$\tilde{C}(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(U_1 > 1 - u_1, \dots, U_d > 1 - u_d) \quad (2.63)$$

Cette copule est utilisée dans beaucoup de domaines, par exemple en fiabilité ou en médecine, afin de modéliser des durées de vie.

Comme son nom l'indique, on peut vérifier que cette définition correspond bien à la définition d'une copule. De plus, il est possible de l'écrire directement en fonction de la copule.

Proposition 2.7 (Georges et al., 2001). Soit C une copule et $\mathbf{u} \in [0, 1]^d$. Alors on a la relation suivante entre la copule et la copule de survie

$$\tilde{C}(u_1, \dots, u_d) = \sum_{i=0}^d \left[(-1)^i \sum_{\mathbf{v}(1-u_1, \dots, 1-u_d) \in \mathcal{Z}(d-i, d, 1)} C(v_1, \dots, v_d) \right] \quad (2.64)$$

où $\mathcal{Z}(m, n, \epsilon)$ est l'ensemble $\{\mathbf{v} \in [0, 1]^n \mid v_i \in \{u_i, \epsilon\}, \sum_{i=1}^n I(v_i = \epsilon) = m\}$.

Dans le cas $d = 2$, cette équation devient simplement

$$\tilde{C}(u_1, u_2) = u_1 + u_2 - 1 + C(1 - u_1, 1 - u_2) \quad (2.65)$$

Parmi les familles générales de copules, l'une des plus connue est celle des copules elliptiques.

Définition 2.20 (Copule elliptique). Une **copule elliptique** est la copule d'un vecteur aléatoire $\mathbf{X}$ qui a une distribution elliptique, i.e. il existe une fonction g , un vecteur $\mu \in \mathbb{R}^d$ et une matrice semi-définie positive telle que la densité du vecteur aléatoire X au point $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ est proportionnelle à

$$g((\mathbf{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu)) \quad (2.66)$$

Une autre famille de copules très utilisée en pratique est la famille archimédienne.

Définition 2.21 (Copule archimédienne). Une copule C est dite **archimédienne** si pour tout vecteur $\mathbf{u} \in [0, 1]^d$,

$$C(u_1, \dots, u_d) = \psi^{[-1]}(\psi(u_1) + \dots + \psi(u_d)) \quad (2.67)$$

où ψ est une fonction appelée génératrice et est définie de $[0, 1]$ dans $\mathbb{R}^+$, continue, strictement décroissante convexe telle que $\psi(1) = 0$. Sa pseudo-inverse, $\psi^{[-1]}$, est définie par

$$\psi^{[-1]}(t) = \begin{cases} \psi^{-1}(t), & \text{si } 0 \leq t \leq \psi(0) \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.68)$$

Cette famille de copules est très courante en fiabilité notamment.

Une autre famille de copules ayant été beaucoup étudiée est celle des copules de valeurs extrêmes.

Définition 2.22 (Copules de valeurs extrêmes). Une copule C_* est dite de **valeurs extrêmes** s'il existe une copule C telle que pour tout $(u_1, u_2) \in [0, 1]^2$,

$$C_*(u_1, u_2) = \lim_{n \rightarrow +\infty} C^n(u_1^{1/n}, u_2^{1/n}) \quad (2.69)$$

Cette famille de copule arrive naturellement lorsque l'on regarde la dépendance entre les maximums de deux vecteurs aléatoires.

Bien que les copules peuvent être de nature très différentes, elles ne peuvent pas prendre n'importe quelles valeurs. En particulier, toute copule vérifie les bornes de Fréchet-Hoeffding.

Théorème 2.12 (Bornes de Fréchet-Hoeffding). *Pour toute copule $C : [0, 1]^d \rightarrow [0, 1]$, et tout point $(u_1, \dots, u_d) \in [0, 1]^d$, on a*

$$\max \left\{ 1 - d + \sum_{i=1}^d u_i, 0 \right\} \leq C(u_1, \dots, u_d) \leq \min \{u_1, \dots, u_d\} \quad . \quad (2.70)$$

De plus, la fonction $(u_1, \dots, u_d) \in [0, 1]^d \mapsto \min \{u_1, \dots, u_d\}$ définit une copule. La fonction $(u_1, \dots, u_d) \in [0, 1]^d \mapsto \max \left\{ 1 - d + \sum_{i=1}^d u_i, 0 \right\}$ ne définit une copule que lorsque $d = 2$.

2.3.2 Mesures de dépendance

Le fait que des variables soient indépendantes si et seulement si leur copule est la copule d'indépendance, rend les copules particulièrement intéressantes comme base pour construire des mesures de dépendance.

Aussi dans ce paragraphe, on rappelle quelques mesures classiques de dépendance et leur définition (quand c'est possible en fonction des copules).

Définition 2.23 (Corrélation de Pearson). La **corrélation de Pearson** est définie pour deux variables aléatoires X et Y comme

$$\rho^P(X, Y) = \frac{E[XY] - E[X]E[Y]}{\sqrt{V(X)V(Y)}} \quad (2.71)$$

Cette mesure de dépendance est sûrement la plus connue et la plus utilisée en pratique.

Cependant, un défaut de ce critère est qu'en général, $\rho^P = 0$ n'implique pas que les variables X et Y sont indépendantes.

Deux autres critères fréquemment utilisés sont respectivement la corrélation de Spearman et le τ de Kendall. Ces coefficients peuvent se définir directement à partir de la fonction copule.

Définition 2.24 (Corrélation de Spearman). Le coefficient de **corrélation de Spearman** entre deux variables aléatoires X, Y est donné par

$$\rho^S = 12 \int_{[0,1]^2} C(u_1, u_2) du_1 du_2 - 3 \quad (2.72)$$

où C est la copule du couple (X, Y) .

Définition 2.25 (τ de Kendall). Le **coefficient de Kendall** entre deux variables aléatoires X, Y est donné par

$$\tau = 4 \int_{[0,1]^2} C(u_1, u_2) dC(u_1, u_2) - 1 \quad (2.73)$$

où C est la copule du couple (X, Y) .

Ces indices ont notamment l'avantage d'être invariants par transformation strictement croissante des données (en tant que fonction de la copule). Néanmoins, ce n'est pas toujours suffisant pour capter les dépendances observées en pratique. A titre d'exemple, si l'on regarde les données illustrées en Figure 2.4, les coefficients (estimés sur les données) de corrélation de Pearson, Spearman et le τ de Kendall ne conduisent pas à un rejet de l'hypothèse d'indépendance avec une p-valeur supérieure à 0.1. A contrario d'autres indices permettent de détecter cette structure de dépendance. Parmi ces indices, on peut notamment citer la corrélation des distances (Székely et al., 2007) et le coefficient ξ_1 de (Junker et al., 2021) pour lesquels le test d'indépendance a une p-valeur inférieure à 0.005.

Ainsi, d'autres mesures de dépendance plus générales peuvent être considérées.

Définition 2.26 (Corrélation des distances). La **corrélation des distances** entre deux variables aléatoires continues X et Y de densité jointe $f_{X,Y}$ et densités marginales f_X et f_Y est définie comme

$$R(X, Y) = \frac{V^2(X, Y)}{\sqrt{V^2(X, X)V^2(Y, Y)}} \quad (2.74)$$

où $V^2(X, Y) = \int |f_{X,Y}(x, y) - f_X(x)f_Y(y)|^2 w(x, y) dx dy$ et $w(x, y) = (\pi^2 x^2 y^2)^{-1}$.

Remarque 2.8. (Székely et al., 2007) définissent de manière plus générale la corrélation des distances pour des variables aléatoires $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$, de dimension p et q potentiellement différentes et plus grandes que 1 et pour différentes fonctions w .

Une limite des coefficients présentés précédemment est qu'ils sont symétriques, i.e. $R(X, Y) = R(Y, X)$. Cependant lorsque l'on regarde par exemple les données en figure 2.4, on voit que la structure de dépendance n'est pas symétrique. Ainsi, suivant les applications, il peut être intéressant d'avoir un coefficient capable de mesurer cette asymétrie. Le coefficient ξ_1 de (Junker et al., 2021) permet de le faire.

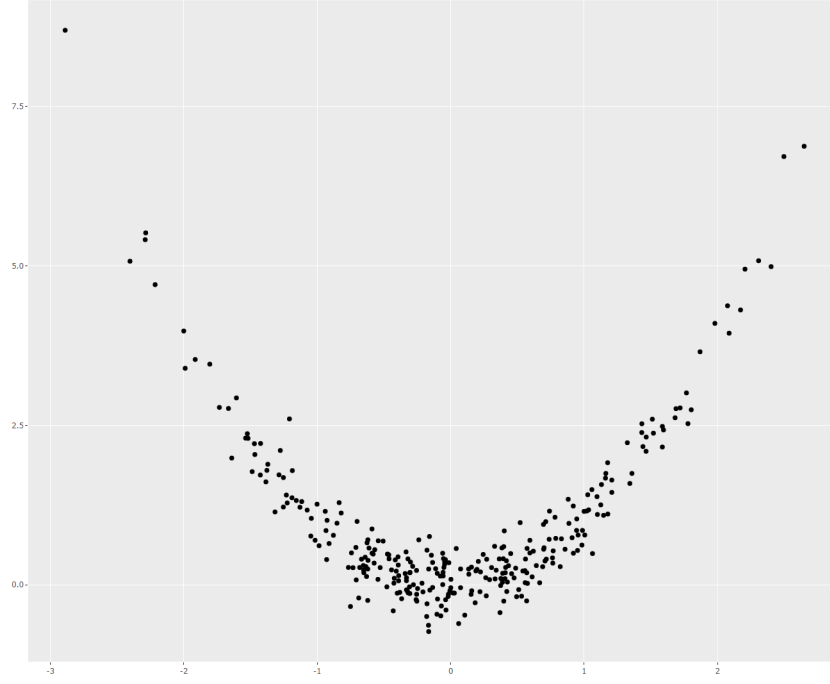


FIGURE 2.4 – Exemple de données avec une structure de dépendance asymétrique

Définition 2.27 (ξ_1). Soient deux variables aléatoires réelles X et Y et pour B un borélien de $\mathbb{R}$, $K_{X,Y}(X, B) = E[I_B \circ Y | X]$. Le coefficient ξ_1 est défini par

$$\xi_1(X, Y) = 3 \int_{[0,1]} \int_{[0,1]} |K_{X,Y}(x, [0, y]) - K_{\Pi}(x, [0, y])| dx dy \quad (2.75)$$

où $K_{\Pi} = K_{U,V}$ où U, V sont deux variables indépendantes.

2.3.3 Exemples de copules (bivariées)

Dans cette section nous présentons quelques fonctions copules classiques dans le cas bivarié. Nous en profitons pour illustrer la diversité des fonctions copules.

Copule Gaussienne

L'une des copules les plus utilisées est la copule de la loi Gaussienne appelée simplement copule Gaussienne. Elle admet pour densité au point $(u_1, u_2) \in [0, 1]^2$

$$c(u_1, u_2; \rho) = \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} \exp \left(-\frac{\rho^2(x_1^2 + x_2^2) - 2\rho x_1 x_2}{2(1 - \rho^2)} \right) \quad (2.76)$$

où $\rho \in [-1, 1]$ est le paramètre de dépendance et $x_1 = \Phi^{-1}(u_1)$, $x_2 = \Phi^{-1}(u_2)$.

Quand $\rho = 0$, alors on obtient la densité de la copule d'indépendance.

Copule de Hüsler-Reiss

La copule de Hüsler-Reiss est une copule de valeurs extrêmes.

Si l'on regarde un échantillon $(X_1^{(i)}, X_2^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$ de variables normales centrées réduites, de corrélations $\rho(n)$, En notant $M_n = (\max_{1 \leq i \leq n} X_1^{(i)}, \max_{1 \leq i \leq n} X_2^{(i)})$, alors si $(1 - \rho(n)) \log(n) \rightarrow \lambda^2 \in [0, \infty]$ lorsque $n \rightarrow \infty$, la copule de M_n tend vers la copule de Hüsler-Reiss de paramètre λ .

Sa densité étant complexe, le lecteur intéressé est invité à consulter, par exemple, la page 176 de (Joe, 2014).

Copule de Gumbel

La copule de Gumbel est la copule archimédienne de génératrice $\psi(s; \delta) = e^{-s^{1/\delta}}$, $\delta \geq 1$. C'est aussi la seule copule archimédienne à être aussi une copule de valeurs extrêmes.

Sa densité est donnée par

$$c(u_1, u_2; \delta) = e^{-(x_1^\delta + x_2^\delta)^{1/\delta}} \left[(x_1^\delta + x_2^\delta)^{1/\delta} + \delta - 1 \right] [x_1^\delta + x_2^\delta]^{1/\delta - 2} (x_1 x_2)^{\delta - 1} (u_1 u_2)^{-1} \quad (2.77)$$

avec $x_1 = -\log(u_1)$ et $x_2 = -\log(u_2)$.

Copule de Clayton

La copule de Clayton est définie pour un paramètre $\delta > 0$ via la densité

$$c(u_1, u_2; \delta) = (1 + \delta)(u_1 u_2)^{-\delta - 1} (u_1^{-\delta} + u_2^{-\delta} - 1)^{-2 - 1/\delta} \quad (2.78)$$

Elle fait partie de la famille Archimédienne avec $\psi(s; \delta) = (1 + s)^{-1/\delta}$.

Copule de Frank

La densité de la copule de Frank est donnée pour un paramètre $\delta \in \mathbb{R}^*$ comme

$$c(u_1, u_2; \delta) = \frac{\delta(1 - e^{-\delta})e^{-\delta(u_1 + u_2)}}{[1 - e^{-\delta} - (1 - e^{-\delta u_1})(1 - e^{-\delta u_2})]^2} \quad (2.79)$$

Cette copule membre de la famille archimédienne avec $\varphi(s; \delta) = -\delta^{-1} \log [1 - (1 - e^{-\delta})e^{-s}]$. Elle a la particularité que $C(u_1, u_2; \delta) = 1 - u_1 - u_2 + C(u_1, u_2; \delta)$.

Copule de Plackett

La copule de Plackett a pour densité au point $(u_1, u_2) \in]0, 1]^2$

$$c(u_1, u_2; \delta) = \frac{\delta [1 + \eta(u_1 + u_2 - 2u_1 u_2)]}{[(1 + \eta(u_1 + u_2))^2 - 4\delta\eta u_1 u_2]^{3/2}} \quad (2.80)$$

où $0 \leq \delta$ et $\eta = \delta - 1$.

Une des particularités de cette copule est que c'est la seule copule telle qu'un certain ratio est proportionnel à son paramètre δ :

$$\frac{C(u_1, u_2; \delta) [1 - u_1 - u_2 + C(u_1, u_2)]}{[u_1 - C(u_1, u_2; \delta)] [u_2 - C(u_1, u_2; \delta)]} \propto \delta \quad (2.81)$$

Afin d'illustrer les différences possibles entre les copules, on peut comparer les lignes de niveaux des 6 copules précédentes, pour une valeur de dépendance fixée, comme le même τ de Kendall. La figure 2.5 illustre cela pour $\tau = 0.7$. On peut alors voir des courbes bien distinctes suivant les familles.

Une autre manière de construire des copules différentes dans le cas bivarié peut se faire à l'aide de transformations appelées rotations.

Définition 2.28 (Rotations). Soit C une copule bivariée, on définit les copules suivantes :

1. $C_{90}(u, v) = v - C(1 - u, v)$ la copule tournée à 90° ,
2. $C_{180}(u, v) = u + v - 1 + C(1 - u, 1 - v)$ la copule tournée à 180° ,
3. $C_{270}(u, v) = u - C(u, 1 - v)$ la copule tournée à 270° .

Si on reprend l'exemple précédent, pour la copule de Gumbel, donnant alors la figure 2.6

La modélisation en copule peut être compliquée à utiliser lorsque la dimension d est grande. Afin de pallier ce problème, une écriture particulière des copules appelée copule arborescente peut être utilisées.

2.3.4 Copules arborescentes

Les copules bivariées jouent un rôle important dans la littérature des copules. En effet, en plus de leur simplicité d'utilisation, il est possible de réécrire la densité (si elle existe) de n'importe quelle copule comme un produit de copules bivariées (conditionnelles). On parle de copule arborescente, ou *Vine Copula* en anglais. Ce nom vient du fait que ce produit de copules a une structure particulière appelée vigne. Informellement, une vigne est une suite d'arbres telle que les nœuds de l'arbre au rang $t + 1$ sont les arêtes de l'arbre au rang t . La suite est de taille $d - 1$ où d est la dimension de la copule.

Avant de faire une présentation purement mathématique de l'écriture, nous commençons par donner un exemple d'une décomposition possible en dimension 6 ainsi que la structure de vigne associée.

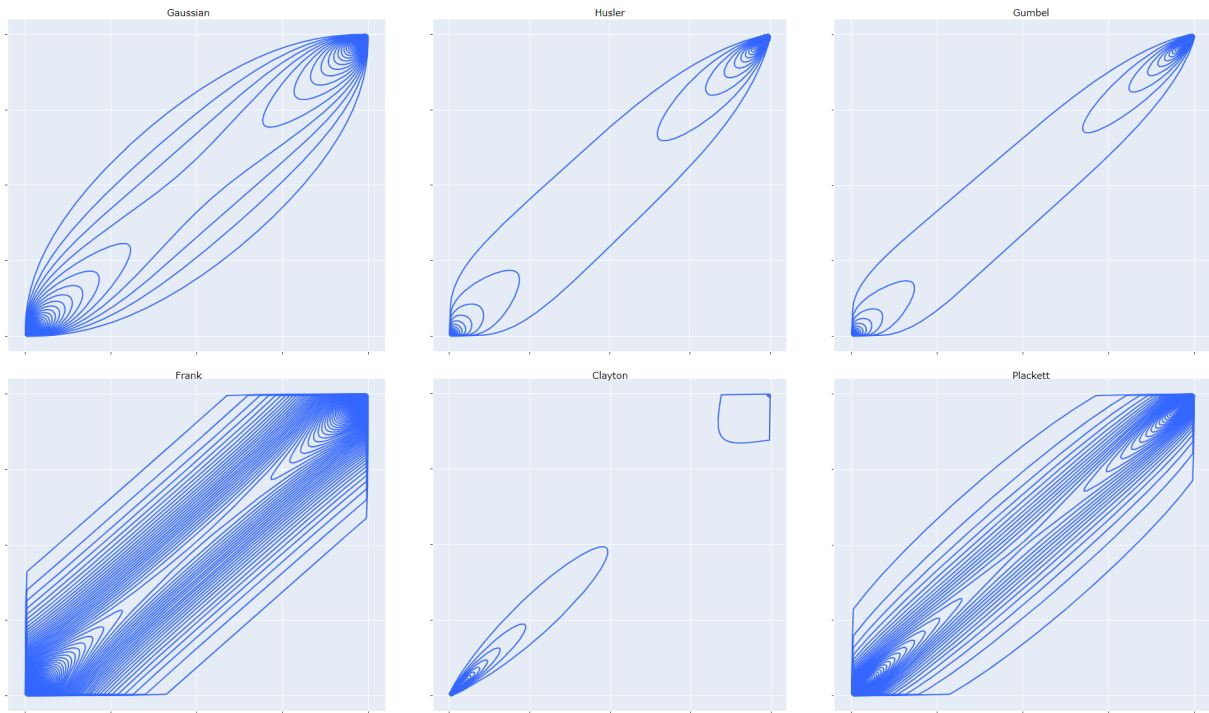


FIGURE 2.5 – Affichage des lignes de niveaux des densités de copules pour différentes familles de copules à 1 paramètre ayant une même mesure de dépendance (τ de Kendall de 0.7)

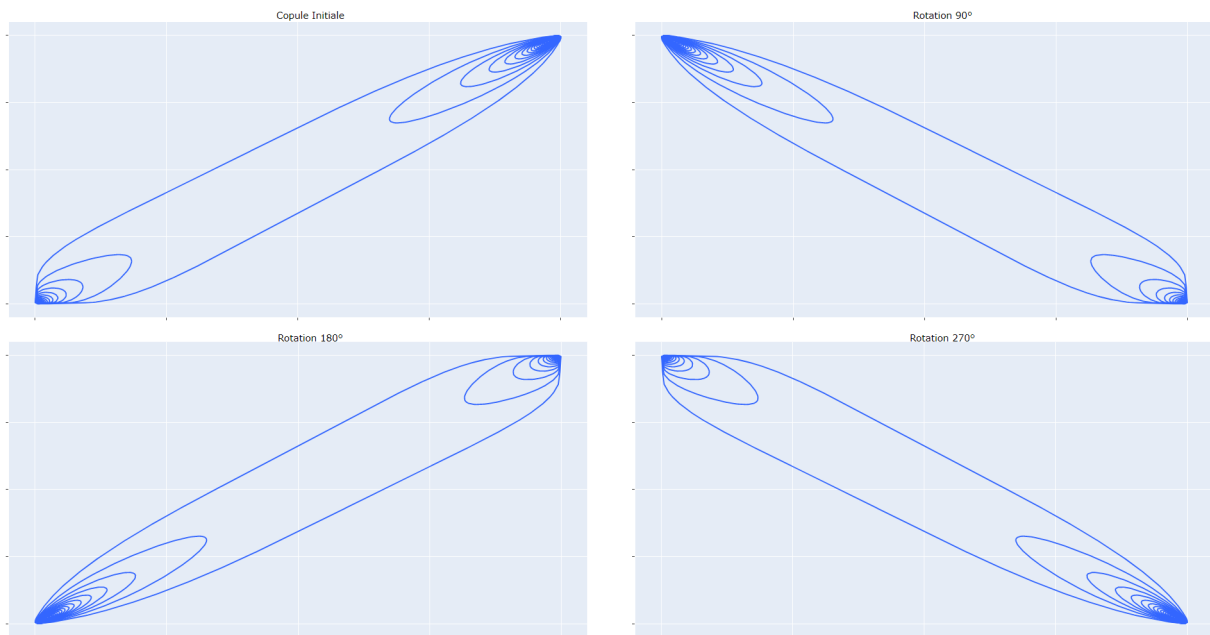


FIGURE 2.6 – Affichage des lignes de niveaux pour une copule de Gumbel et ses rotations à 90° , 180° et 270° (τ de Kendall de 0.7).

En dimension 6, une structure de vigne est donc composée de 5 arbres. Par exemple, les arbres présentés en figure 2.7 forment une structure de vigne.

On peut notamment observer que les arêtes deviennent des nœuds dans le graphe suivant.

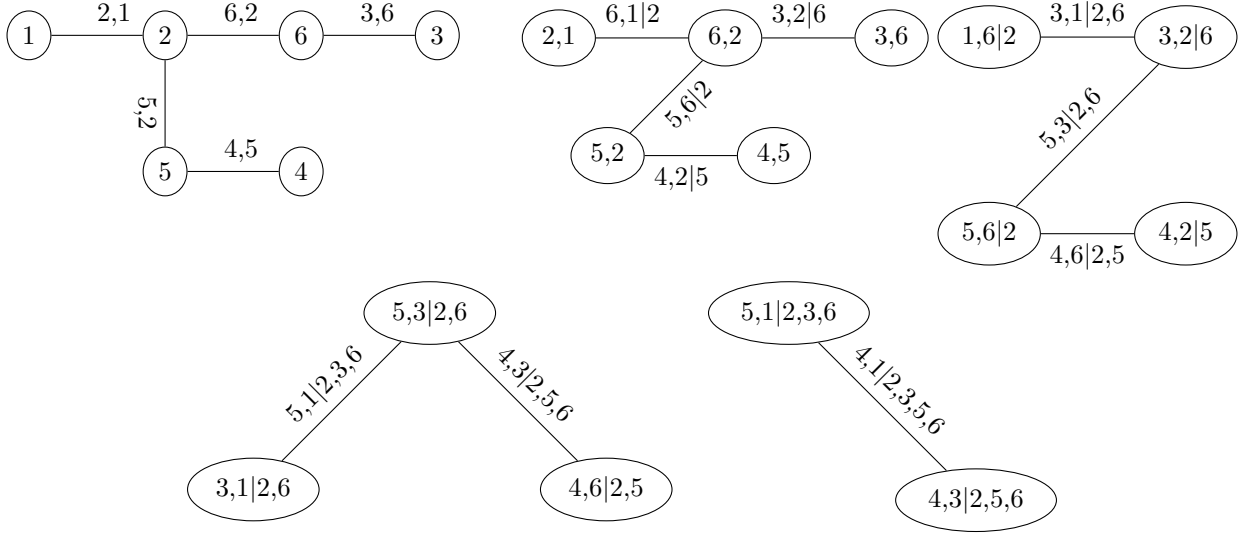


FIGURE 2.7 – Exemple de structure de vigne en dimension 6

Pour cette structure, on peut alors écrire la densité de la copule comme

$$\begin{aligned}
 c(u_1, u_2, \dots, u_6) = & c_{1,2}(u_1, u_2) c_{2,6}(u_2, u_6) c_{3,6}(u_3, u_6) c_{2,5}(u_2, u_5) c_{4,5}(u_4, u_5) \times \\
 & c_{1,6|2}(F_{1|2}(u_1 | u_2), F_{6|2}(u_6 | u_2) | u_2) c_{3,2|6}(F_{3|6}(u_3 | u_6), F_{2|6}(u_2 | u_6) | u_6) \times \\
 & c_{5,6|2}(F_{5|2}(u_5 | u_2), F_{6|2}(u_6 | u_2) | u_2) c_{4,2|5}(F_{4|5}(u_4 | u_5), F_{2|5}(u_2 | u_5) | u_5) \times \\
 & c_{3,1|2,6}(F_{3|2,6}(u_3 | \mathbf{u}_{2,6}), F_{1|2,6}(u_1 | \mathbf{u}_{2,6}) | \mathbf{u}_{2,6}) c_{5,3|2,6}(F_{5|2,6}(u_5 | \mathbf{u}_{2,6}), F_{3|2,6}(u_3 | \mathbf{u}_{2,6}) | \mathbf{u}_{2,6}) \times \\
 & c_{4,6|2,5}(F_{4|2,5}(u_4 | \mathbf{u}_{2,5}), F_{6|2,5}(u_6 | \mathbf{u}_{2,5}) | \mathbf{u}_{2,5}) \times \\
 & c_{5,1|2,3,6}(F_{5|2,3,6}(u_5 | \mathbf{u}_{2,3,6}), F_{1|2,3,6}(u_1 | \mathbf{u}_{2,3,6}) | \mathbf{u}_{2,3,6}) \times \\
 & c_{4,3|2,5,6}(F_{4|2,5,6}(u_4 | \mathbf{u}_{2,5,6}), F_{3|2,5,6}(u_3 | \mathbf{u}_{2,5,6}) | \mathbf{u}_{2,5,6}) \times \\
 & c_{4,1|2,3,5,6}(F_{4|2,3,5,6}(u_4 | \mathbf{u}_{2,3,5,6}), F_{1|2,3,5,6}(u_1 | \mathbf{u}_{2,3,5,6}) | \mathbf{u}_{2,3,5,6})
 \end{aligned} \tag{2.82}$$

où $F_{i|D}$ est la fonction répartition de la i -ème variable conditionnellement aux variables $j \in D$.

Définition 2.29 (Vigne). Une **vigne**, aussi appelée vigne régulière (en anglais *R-vine* pour *Regular-vine*), est une suite $\mathcal{V} = (T_1, \dots, T_{d-1})$ d'arbres telle que

1. T_1 est un arbre avec pour ensemble de nœuds $V_1 = \{1, \dots, d\}$ et un ensemble d'arêtes E_1 .
2. Pour tout $m \geq 2$, T_m est un arbre avec pour ensemble de nœuds $V_m = E_{m-1}$ et un ensemble d'arêtes E_m (les nœuds de T_m sont les arêtes de T_{m-1}).
3. (Condition de proximité) Pour $2 \leq i \leq d-1$, si $a = (a(1), a(2))$ et $b = (b(1), b(2))$ sont deux nœuds dans V_i connectés par une arête $e \in E_i$, $a(1), a(2), b(1), b(2) \in V_{i-1}$, alors $|a \cap b| = 1$.

Ainsi sur la figure 2.8, les arêtes a et b étant liées par une arête e , on a que $|a \cap b| = 1$, i.e. que les arêtes a et b ont un sommet en commun.

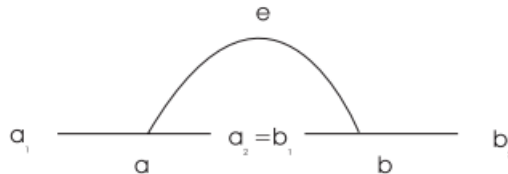


FIGURE 2.8 – Exemple de la condition de proximité (Bedford et Cooke, 2002)

Définition 2.30 (Ensemble contraint). Soit $\mathcal{V} = (T_1, \dots, T_d)$ une vigne sur d -éléments.

Pour tout arête $e_i \in E_i$, on appelle **union complète** de e_i le sous-ensemble

$$\begin{aligned}
 A_{e_i} = \{j \in V_1 \mid \exists 1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_r = i, \text{ et } e_{i_k} \in E_{i_k}, (k \in \{1, \dots, r\}), \\
 \text{with } j \in e_{i_1}, e_{i_k} \in e_{i_{k+1}} (k \in \{1, \dots, r-1\}) \}
 \end{aligned}$$

Pour $e = \{e(1), e(2)\} \in E_l$, l'**ensemble conditionnant** associé à e est défini par

$$D(e) = A_{e(1)} \cap A_{e(2)} \quad .$$

Les **ensembles conditionnés** à e sont

$$C_{e,e(1)} = A_{e(1)} \setminus D(e), \quad \text{et } C_{e,e(2)} = A_{e(2)} \setminus D(e) \quad .$$

L'**ensemble contraint** de $\mathcal{V}$ est défini par

$$\{(C_{e,e(1)}, C_{e,e(2)}, D(e)) \mid l = 1, \dots, d-1, e \in E_l, e = \{e(1), e(2)\}\}$$

Définition 2.31 (Distribution arborescente). Un triplet $(\underline{F}, \mathcal{V}, B)$ est une **distribution arborescente** si

- $\underline{F} = (F_1, \dots, F_d)$ est un vecteur de fonctions de répartition continues et inversibles.
- $\mathcal{V}$ est une vigne sur d -éléments.
- $B = \{B(e) \mid 1 \leq i \leq d-1; e \in E_i\}$, où $B(e)$ est une collection de copules.

Muni de ces définitions, nous pouvons maintenant énoncer le théorème illustrant la décomposition de la copule en produit de copules bivariées. On parle de copule arborescente². En anglais, on parle de *vine copula* ou de *pair copula construction*.

Théorème 2.13 (Bedford et Cooke, 2002). Soit $\mathcal{V} = (T_1, \dots, T_d)$ une vigne sur d -éléments. Etant données des fonctions de répartition $(F_i)_{1 \leq i \leq d}$ (de densités strictement positives) et des copules (conditionnelles) $(C_{e|D(e)})_{e \in \cup_j E_j}$ (ayant une densité), il existe une unique distribution arborescente ayant pour densité f définie par

$$f(x_1, \dots, x_d) = \left(\prod_{i=1}^d f_i(x_i) \right) \prod_{m=1}^{d-1} \prod_{e=\{e(1), e(2)\} \in E_m} c_{e|D(e)}(F_{e(1)|D(e)}(x_{e(1)} | \mathbf{x}_{D(e)}), F_{e(2)|D(e)}(x_{e(2)} | \mathbf{x}_{D(e)}) | \mathbf{x}_{D(e)}) \quad . \quad (2.83)$$

Définition 2.32 (copule arborescente). On appelle **copule arborescente** une distribution arborescente telle que les lois marginales des variables $X_1, \dots, X_d$ sont uniformes.

L'utilisation de copules arborescentes implique très souvent d'avoir recours à des fonctions de répartition marginales de copules bivariées conditionnelles. Dans la littérature, ces fonctions sont appelées *h-fonctions*.

Définition 2.33. Soit une $(\underline{F}, \mathcal{V}, B)$, une copule arborescente. On note $\mathcal{B} = \{c_{j(e), l(e)|D(e)} \mid e \in E_m; 1 \leq m \leq d-1\}$. Soit $l(e) \in D(e)$ tel que $c_{j(e), l(e)|D(e) \setminus l(e)} \in \mathcal{B}$. On note $D'(e) = D(e) \setminus l(e)$. On définit la fonction $\mathbf{h}$ comme

$$h_{j(e)|l(e), D'(e)}(u|v) = \int_0^u c_{j(e), l(e)|D'(e)}(s, v | \mathbf{U}_{D'(e)} = \mathbf{u}_{D(e)}) ds \quad (2.84)$$

pour $(u, v) \in [0, 1]^2$. On a alors

$$G_{j(e)|D(e)}(u_{j(e)} | \mathbf{u}_{D(e)}) = h_{j(e)|l(e), D'(e)}(G_{j(e)|D'(e)}(u_{j(e)} | \mathbf{u}_{D'(e)}) | G_{l(e)|D'(e)}(u_{l(e)} | \mathbf{u}_{D'(e)})) \quad (2.85)$$

avec $G_{j(e)|D'(e)}$ la distribution de $U_{j(e)} | \mathbf{U}_{D'(e)} = \mathbf{u}_{D(e)}$

Dans la suite, pour alléger les notations, nous utiliserons simplement j et u_j au lieu de $j(e)$ et $u_{j(e)}$ ainsi que D_{ij} au lieu de $D(e)$ pour $e = \{i, j\}$.

Structures particulières de vignes

Dans la littérature, on distingue deux sous classes de vignes : les D-vignes (pour *drawable vines*) et les C-vignes (pour *canonical vines*).

Définition 2.34 (D-vine). Une vigne est une **D-vigne** si le degré de chaque nœud est au plus égal à 2.

². Le terme copule en arborescence est utilisé par (Min et Czado, 2011) et (Brechmann et al., 2012). (Czado et al., 2013) utilisent le terme grappe de copules

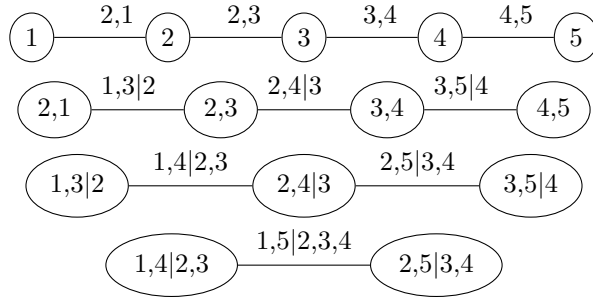


FIGURE 2.9 – Structure d'une D-vigne en dimension 5

Théorème 2.14 (Min et Czado, 2011). *Toute densité de copule c peut s'écrire sous forme d'une D-vigne.*

Remarque 2.9. *On peut aussi noter de manière équivalente les arêtes avec la forme $i, i+j|i+1, \dots, i+j-1$, ce qui donne*

$$c(u_1, \dots, u_d) = \prod_{j=1}^{d-1} \prod_{i=1}^{d-j} c_{i, i+j|i+1, \dots, i+j-1}(F(u_i|u_{i+1}, \dots, u_{i+j-1}), F(u_{i+j}|u_{i+1}, \dots, u_{i+j-1})) \quad (2.86)$$

Définition 2.35 (C-vine). Une vigne est une **C-vigne** si tous ses arbres sont des étoiles (i.e. dans chaque arbre, tous les nœuds ont pour degré 1 sauf un nœud qui est lié à tous les autres).

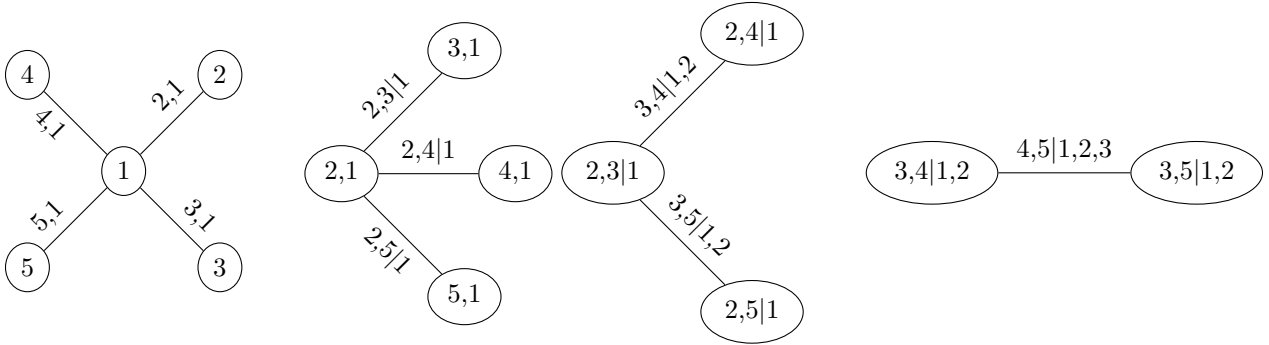


FIGURE 2.10 – Structure d'une C-vigne en dimension 5

Théorème 2.15 (Czado, 2010). *Toute densité de copule c peut s'écrire sous forme d'une C-vigne.*

Remarque 2.10. *Ces modèles sont souvent utilisés en pratique lorsque l'on considère qu'une variable est plus "importante" dans la modélisation que les autres.*

Cette réécriture de la densité de la copule permet alors une meilleure compréhension des différents liens entre les variables et permet de construire des modèles avec une structure particulière, ou encore de choisir des familles de copules bivariées différentes. Néanmoins, en pratique, la présence d'une structure emboîtée et du conditionnement rend l'estimation difficile. Afin de palier ce problème, ces modèles sont souvent utilisés avec une hypothèse dite simplificatrice

Hypothèse simplificatrice

Définition 2.36 (Hypothèse simplificatrice). Soient deux variables aléatoires $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$ et $\mathbf{Z}^{d-p}$. La variable aléatoire $\mathbf{Y}|\mathbf{Z}$ a d'après le théorème de Sklar la fonction de répartition suivante :

$$F_{\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(\mathbf{y}|\mathbf{Z} = \mathbf{z}) = C_{\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(F_{Y_1|\mathbf{Z}}(y_1|\mathbf{Z} = \mathbf{z}), \dots, F_{Y_p|\mathbf{Z}}(y_p|\mathbf{Z} = \mathbf{z})|\mathbf{Z} = \mathbf{z}) \quad (2.87)$$

. On dit que $\mathbf{Y}|\mathbf{Z}$ vérifie l'**hypothèse simplificatrice** si la fonction

$$\mathbf{z} \mapsto C_{\mathbf{Y}|\mathbf{Z}}(\cdot|\mathbf{Z} = \mathbf{z}) \quad (2.88)$$

est constante.

Remarque 2.11. En particulier on a que $C_{ij|D(e)}$ vérifie l'hypothèse simplificatrice si la fonction

$$\mathbf{x}_{D(e)} \mapsto C_{ij|D(e)}(\cdot, \cdot | \mathbf{x}_{D(e)}) \quad (2.89)$$

est constante.

Remarque 2.12. La définition est équivalente à $(U_{i|D(e)}, U_{j|D(e)}) \perp\!\!\!\perp U_{D(e)}$ (Spanhel et Kurz, 2019).

Remarque 2.13. Le fait que $C_{ij|D(e)}$ vérifie l'hypothèse simplificatrice ne signifie pas que $C_{ij|D(e)} = C_{ij}$!

Par exemple, considérons $X_1, X_2, X_3 \sim N\left(0, \begin{pmatrix} 1 & 0.8 & 0.8 \\ 0.8 & 1 & 0.8 \\ 0.8 & 0.8 & 1 \end{pmatrix}\right)$. Alors, la copule de X_1, X_2 est une copule gaussienne de paramètre de corrélation 0.8. Cependant comme $X_1, X_2 | X_3 = x_3 \sim N\left(0.8x_3, \begin{pmatrix} 0.36 & 0.16 \\ 0.16 & 0.36 \end{pmatrix}\right)$, la copule de $X_1, X_2 | X_3$ est aussi une copule gaussienne mais de paramètre de corrélation 0.44. Ce paramètre ne dépendant pas de x_3 . La copule vérifie l'hypothèse simplificatrice. Pour autant $C_{1,2|3} \neq C_{1,2}$.

Une question importante de la littérature des vine copula est de savoir si n'importe quelle copule peut être approximée à partir d'une copule simplifiée, et sinon à quelle distance peut-on espérer être de cette copule. En effet, comme nous le verrons, la plupart des méthodes d'estimation étant basées sur cette hypothèse, cette information est très importante. Plusieurs articles ont étudiés cette question et ont eu des avis un peu différents sur le sujet (Hobæk Haff, Aas et Frigessi, 2010 ; Stöber et al., 2013). Nous donnerons des résultats de la littérature après avoir présenté les méthodes d'estimation des copules arborescentes.

Pour une copule donnée, il est possible qu'il existe seulement certaines structures de vignes telles que les copules de la décomposition vérifient l'hypothèse simplificatrice. Si c'est le cas pour toutes les structures, on parle de copule universellement simplifiée.

Définition 2.37 (copule universellement simplifiée). Une copule est dite **universellement simplifiée** si pour toute structure de vigne, les copules issues de la décomposition satisfont l'hypothèse simplificatrice.

Méthode de Dißmann et al. (2013)

Il existe de nombreuses méthodes pour estimer les copules arborescentes dans la littérature. Cependant, la méthode de (Dißmann et al., 2013) est probablement la méthode la plus utilisée en pratique. L'idée est de construire les arbres de manière séquentielle : on commence par choisir le premier arbre et estimer les copules associées. Puis on choisit le second arbre parmi ceux respectant la condition de proximité, on estime les copules associées et ainsi de suite. Une version de l'algorithme où le choix des arbres se base sur le τ de Kendall est donné en algorithme 1. Le choix du τ de Kendall peut être remplacé par une autre mesure de dépendance ou encore par la vraisemblance de la copule associée.

Algorithme 1 Algorithme d'estimation d'une copule arborescente (Dißmann et al., 2013)

Entrée: Les observations $(X_1^{(i)}, \dots, X_d^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$.

- 1: Calculer le τ de Kendall empirique $\hat{\tau}_{j,k}$ entre toutes les paires de variables.
- 2: Construire un arbre couvrant maximal du graphe pondéré qu'est la matrice des τ de Kendall, i.e.

$$\operatorname{argmax}_T \sum_{e=(j,k) \in T} |\hat{\tau}_{j,k}| \quad (2.90)$$

où T est un arbre couvrant.

- 3: Pour chaque arête (j, k) de l'arbre couvrant sélectionné, estimer la copule associée. Puis calculer les données transformées : $\hat{F}_{j|k}(x_j^{(i)} | x_k^{(i)})$ et $\hat{F}_{k|j}(x_k^{(i)} | x_j^{(i)})$ pour $1 \leq i \leq n$.
 - 4: **pour** $l = 2, \dots, d-1$ **faire**
 - 5: Calculer les τ de Kendall empiriques conditionnels $\hat{\tau}_{j,k|D(e)}$ pour toutes les variables conditionnelles $j, k | D(e)$ qui font partie de l'arbre T_l , i.e. vérifiant la condition de proximité.
 - 6: Parmi elles, calculer l'arbre couvrant maximal de la même manière que précédemment
 - 7: Pour chaque arête $(j, k) | D(e)$ de l'arbre couvrant sélectionné, estimer la copule associée. Puis calculer les données transformées : $\hat{F}_{j|k \cup D(e)}(x_j^{(i)} | x_k^{(i)}, \mathbf{x}_{D(e)}^{(i)})$ et $\hat{F}_{k|j \cup D(e)}(x_k^{(i)} | x_j^{(i)}, \mathbf{x}_{D(e)}^{(i)})$ pour $1 \leq i \leq n$.
 - 8: **fin pour**
-

Une autre manière de choisir les copules en prenant en compte le fait que l'hypothèse simplificatrice est effectuée, est simplement de tester si cette dernière est vérifiée et de prendre en compte cette information pour le choix des arbres (Kraus et Czado, 2017).

On notera que l'algorithme permet n'importe quel estimateur pour les copules bivariées, au sens où peut être paramétrique, comme dans l'algorithme originel, mais aussi non paramétrique. De plus, l'algorithme peut théoriquement être utilisé pour estimer des vines non simplifiées même si l'estimation des copules conditionnelles est alors très complexe.

Remarque 2.14. *De par la condition de proximité, si T_1 est une D -vigne alors les arbres suivant le seront aussi. (Dißmann et al., 2013) indiquent que l'algorithme peut être adapté pour calculer une C -vigne ou une D -vigne. Cependant trouver une structure correspondant à une D -vigne est un problème NP-difficile.*

Théorème 2.16 (Dißmann et al., 2013). *L'algorithme 1 donne une structure de R -vigne.*

Autres méthodes d'estimation

Malgré la popularité de l'algorithme de Dißmann, de nombreuses autres approches ont été proposées. On retrouve deux principales motivations à cela. La première est que pour des données en grande dimension (plusieurs centaines), l'algorithme peut être long à réaliser les calculs. La seconde raison est due à l'hypothèse simplificatrice. En effet, cette hypothèse n'étant a priori pas toujours vérifiée, il se peut que certaines structures donnent de meilleurs résultats que d'autres. Ainsi une approche non séquentielle pourrait permettre, au moins dans certains cas, de meilleurs résultats.

Afin d'améliorer le temps de calcul de l'algorithme, (Müller et Czado, 2018), proposent d'utiliser le lien entre la structure de vine et les graphes dirigés acycliques (DAG). En effet, ces derniers ont été beaucoup étudiés dans la littérature et de nombreuses méthodes d'estimation très performantes ont été développées pour les problèmes de grande dimension. (Müller et Czado, 2018), considèrent donc l'estimation d'un DAG, puis en déduisent une structure de vine associée. (Pircalabelu, Claeskens et Gijbels, 2017) consider similar idea but combined with a model selection criterion.

Deux autres méthodes à nouveau proposées par Müller et Czado consistent à utiliser les propriétés de parcimonie de la régression lasso (Müller et Czado, 2019b) et du *graphical lasso* (Müller et Czado, 2019a), pour sélectionner rapidement les copules bivariées les plus importantes et considérer que les autres sont des copules indépendances. En particulier, (Müller et Czado, 2019a) considère l'estimation d'une copule arborescente pour chaque composante connexe de la matrice de précision estimée via *graphical lasso*, puis pour obtenir la copule arborescente globale, considèrent de fusionner les vignes de ses composantes. Cela permet un gain important en temps de calcul.

Cependant, ces méthodes plus rapides, ne produisent pas toujours de meilleurs résultats que l'algorithme de Dißmann. Et pour cela, les algorithmes proposés doivent souvent être plus complexes. L'une de ces méthodes, proposée par (B. Chang et al., 2019), est d'utiliser la recherche arborescente Monte Carlo (*Monte Carlo tree search*). Cette approche permet de ne pas se limiter à une recherche séquentielle lors de l'estimation de la structure vine, mais permet de revenir en arrière pour choisir une autre structure plus performante. Cela donne en pratique de meilleurs modèles, mais le temps de calcul est plus important. Dans une optique assez similaire, (Y. Sun et al., 2019) proposent une approche basée sur l'apprentissage par renforcement pour sélectionner la structure de vigne.

De plus, malgré la complexité du problème, quelques auteurs considèrent l'estimation de copules vine non simplifiées. Par exemple, on peut citer (Zhu et Kurowicka, 2022), qui utilise le lien entre les structures de vignes et les graphes cordaux pour développer une méthode adaptée aux vignes avec beaucoup de copules d'indépendance et permettant l'utilisation de copules non simplifiées lors de l'estimation.

Propriétés d'approximation des copules arborescentes dans l'espace des copules

Comme souligné précédemment, l'hypothèse simplificatrice joue un rôle primordial lors de l'estimation des copules vines. Connaître les erreurs que cette approximation peut impliquer est donc primordiale. Aujourd'hui, plusieurs résultats de la littérature permettent de se faire une idée de ses avantages et inconvénients.

Avant de parler de l'hypothèse simplificatrice, on commence par donner un résultat de (Nagler et Czado, 2016) sur l'estimation séquentielle.

Théorème 2.17 (Nagler et Czado, 2016). *Supposons que l'on dispose de n observations i.i.d. $(\mathbf{X}^{(i)})_{1 \leq i \leq n}$ d'une variable aléatoire de loi f de dimension d . Supposons qu'il est possible d'estimer les densités marginales (point par point) ainsi que les copules bivariées (conditionnelles) du modèle en $O(n^{-r})$ et que les fonctions h peuvent être estimées en $o(n^{-r})$, pour $r > 0$. Alors, en notant $\hat{f}$ l'estimation séquentielle de la loi de f , on a*

$$\hat{f}(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) = O(n^{-r}) \quad (2.91)$$

pour tout point $\mathbf{x}$.

En particulier, avec l'hypothèse simplificatrice, (Nagler et Czado, 2016) démontrent qu'avec un estimateur non-paramétrique des fonctions en question, l'estimation est convergente avec $r = 1/3$.

Cependant, toutes les copules ne vérifient pas cette hypothèse. En particulier, (Spanhel et Kurz, 2019) donnent un exemple de copule arborescente non simplifiée où l'estimation séquentielle considère des copules non simplifiées comme des copules d'indépendance (c.f. Figure 2.11).

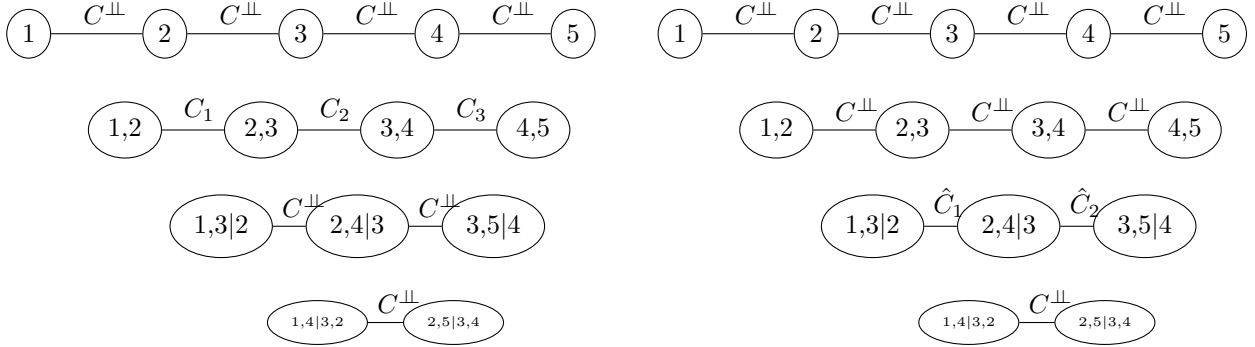


FIGURE 2.11 – Exemple de (Spanhel et Kurz, 2019), où l'estimation séquentielle considère certaines copules comme l'indépendance alors qu'elles ne le sont pas. A gauche la véritable structure de la copule arborescente, à droite la structure de la copule arborescente estimée séquentiellement.

(Stöber et al., 2013) étudient les familles de copules elliptiques et archimédiennes en terme d'hypothèse simplificatrice. Ils démontrent le résultat suivant.

Théorème 2.18. *La copule Gaussienne vérifie l'hypothèse simplificatrice.*

Parmi les copules archimédiennes, la seule famille à vérifier l'hypothèse simplificatrice est la copule de Clayton.

L'hypothèse simplificatrice semble donc être une hypothèse importante, même si les résultats précédents n'empêchent pas les copules arborescentes d'approximer n'importe quelle copule.

Récemment, (Mroz et al., 2021) ont démontré des résultats permettant de répondre à cette question.

Théorème 2.19 (Mroz et al., 2021). *L'ensemble des copules universellement simplifiées est dense dans l'espace des copules pour la distance d_{∞} , où, pour deux copules C_1, C_2 , on a $d_{\infty}(C_1, C_2) = \sup_{\mathbf{u} \in [0,1]^d} |C_1(\mathbf{u}) - C_2(\mathbf{u})|$*

Cependant, l'estimateur obtenu de manière séquentielle (avec hypothèse simplificatrice) peut être très loin de la véritable copule. En effet, (Mroz et al., 2021) donnent un exemple tel que la distance d_{∞} entre une copule et sa version obtenue par estimation séquentielle est supérieure à $1/8$, ce qui pour certaines applications est très importante.

De plus, ce résultat de densité n'est pas vérifié pour toutes les distances. En particulier,

Théorème 2.20 (Mroz et al., 2021). *En dimension 3, l'ensemble des copules simplifiées est nul part dense dans l'espace des copules pour la distance en variation totale.*

Cela implique qu'en fonction des applications, et notamment celles utilisant les densités des copules, les copules arborescentes simplifiées peuvent ne pas être adaptées, au sens où l'erreur d'approximation induite par l'utilisation des copules arborescentes simplifiées ne tend pas vers 0.

Maintenant que nous avons énoncés les principales notations et résultats de la littérature sur les différents sujets étudiés dans ce manuscrit, nous allons dans le prochain chapitre énoncer les résultats obtenus.

Résumé des Résultats Obtenus

Afin de résoudre l'Objectif n°1 et l'Objectif n°2 présentés au chapitre 1, nous allons nous appuyer sur les outils mathématiques du chapitre 2. Pour rappel, ces objectifs correspondent respectivement à

1. donner un indicateur des performances de la production d'une pièce,
2. optimiser le temps de contrôle des pièces en utilisant la dépendance entre les caractéristiques.

Pour ce faire, nous commençons en section 3.1 par une étape de modélisation mathématique de chacun de ces objectifs.

Ensuite, en section 3.2, nous proposons une nouvelle méthode, alternative à la vraisemblance, pour l'estimation sur les SBM. Cette méthode repose sur un critère que nous appelons **critère à divergence par blocs** ou bien *Block Pseudo-Distance Criterion* (BPDC). Elle consiste à utiliser, à la place de la vraisemblance, la famille de critères φ -divergences introduite à la section 2.2.2. En effet, pour l'estimation paramétrique, l'estimation basée sur la vraisemblance n'est pas toujours robuste (au sens de la section 2.2.1). A contrario, l'estimation basée sur les φ -divergences, peut donner des estimations plus robustes. Cela rend cette classe d'estimateurs très intéressante en pratique, car il arrive fréquemment que les données ne soient pas exactement issues du modèle théorique et qu'il y ait des valeurs aberrantes.

Cependant, l'estimation dans les SBM avec la méthode développée possède une complexité algorithmique importante. Elle ne peut pas être utilisée à grande échelle. C'est pourquoi, dans un deuxième temps, nous étudions en section 3.3.1 la méthode de partitionnement de graphes basée sur la modularité proposée par (Newman et Girvan, 2004). Cette méthode est particulièrement adaptée pour faire de la classification sur de très grands graphes en un laps de temps très court. Néanmoins, la convergence de l'estimation de la partition latente d'un SBM avec la modularité est soumise à conditions. Ces conditions sont étudiées pour la modularité et plusieurs de ses variantes, telles que la déviation à l'uniformité. En nous basant sur un lien entre la modularité et la vraisemblance d'un SBM particulier, nous en déduisons de nouveaux critères de partitionnement.

Toutefois, les conditions sous lesquelles la modularité et ses variantes sont capables de retrouver la partition latente d'un graphe sont très contraignantes et ne sont pas toujours satisfaites sur les données industrielles. La maximisation de la vraisemblance d'un SBM classique tel que celui avec des poids de loi de Poisson ou de loi Gaussienne montre des résultats intéressants. Partant de cette observation, en section 3.3.2, nous généralisons le théorème 2.3.2 (Zhao et al., 2012). D'une part, nous démontrons qu'il n'est pas nécessaire de se limiter à des lois de Bernoulli, mais que le résultat reste vrai pour des lois à queue de distribution sous-Gamma. D'autre part, nous montrons que le nombre de classes du modèle peut croître avec le nombre de nœuds. De plus, nous démontrons aussi que le résultat s'applique à d'autres modèles de graphes aléatoires que les DCSBM. Notamment dans le cas où la corrélation a une structure de blocs, nous démontrons que la maximisation de la vraisemblance d'un SBM, appliquée à la matrice de covariance empirique permet de retrouver asymptotiquement ces blocs. Enfin, nous démontrons que dans les cas SBM et DCSBM, la vraisemblance avec des poids gaussiens satisfait les hypothèses de notre théorème, tout comme la méthode des K-moyennes dans le cas SBM.

Avec ces travaux sur la classification, nous pouvons alors étudier avec confiance les données de production dont on dispose et les séparer en blocs qui seront plus simples à analyser. En particulier en section 3.4, nous proposons une approche basée sur les copules arborescentes afin d'estimer la probabilité que toutes les caractéristiques d'un bloc soient conformes. Nous proposons alors un estimateur basé sur des simulations de Monte Carlo dont nous démontrons la convergence. Mais, lorsque le nombre de caractéristiques est grand, son calcul peut prendre plusieurs heures. Nous proposons donc une borne inférieure de la probabilité de conformité plus rapide à calculer en nous basant sur la structure particulière des copules arborescentes.

En section 3.5, nous proposons une nouvelle approche pour la sélection de variables. Cette approche est basée sur la distance $l_1 - l_2$, étudiée notamment par (Yin et al., 2014). Pour le problème d'optimisation des contrôles, sous l'hypothèse de normalité des données, nous proposons une approximation du gain de temps liée

cette optimisation. Nous automatisons alors la manière de sélectionner les caractéristiques en couplant cette approximation avec la méthode de sélection de variables.

3.1 Modélisation mathématique

3.1.1 Conformité des pièces

On cherche à modéliser le procédé de production d'une pièce ayant d caractéristiques. On suppose que ces caractéristiques dépendent d'un procédé de fabrication et d'un procédé de contrôle. On note $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$ le vecteur aléatoire modélisant les mesures des caractéristiques, F sa fonction de répartition et F_j la fonction de répartition de X_j pour une caractéristique $j \in \{1, \dots, d\}$. On suppose que cette loi admet une densité qui est continue.

On dispose d'intervalles (aux bornes possiblement infinies) $[L_1, U_1], \dots, [L_d, U_d]$. On considère que la j^e caractéristique est dite conforme si $L_j \leq X_j \leq U_j$. La pièce est conforme si toutes ses caractéristiques le sont, autrement dit, si $\mathbf{X} \in [L_1, U_1] \times \dots \times [L_d, U_d]$.

On dispose d'un échantillon de mesures des caractéristiques sur n pièces. Pour $1 \leq i \leq n$, on note $\mathbf{X}^{(i)}$ le vecteur des caractéristiques de la i^e pièce. Parce que les données sont supposées issues d'un processus de production stable au sens 6M, on considère que cet échantillon est indépendant et identiquement distribué (i.i.d.).

À partir de cet échantillon, pour répondre à **Objectif n°1**, nous considérons une extension de l'indice Cpk pour plusieurs caractéristiques. Cette extension consiste à remplacer les probabilités de conformité dans le cas univarié par les probabilités de conformité de la pièce, dite multivariée.

3.1.2 Dépendance entre les caractéristiques et utilisation des copules

Les probabilités de conformité, introduites dans les formules (1.3), s'écrivent, dans le cas multivarié, comme

$$P_u = \mathbb{P}(X_1 \leq U_1, \dots, X_d \leq U_d) \quad (3.1)$$

et

$$P_l = \mathbb{P}(X_1 \geq L_1, \dots, X_d \geq L_d) \quad . \quad (3.2)$$

Nous considérons les probabilités P_u et P_l plutôt que la probabilité

$$\mathbb{P}(L_1 \leq X_1 \leq U_1, \dots, L_d \leq X_d \leq U_d) \quad , \quad (3.3)$$

appelée *yield*, car cela permet d'obtenir naturellement une généralisation de l'indice Cpk présenté à la section 1.3. Bien que ce choix ne soit pas forcément intuitif car il n'est pas possible de retrouver le *yield* à partir de P_u et P_l , il est principalement motivé par le fait que cette écriture permet une généralisation naturelle des formules 1.3. D'autres motivations pour ce choix sont données en section 6.1.4.

Dans le cas univarié, une méthode de calcul des probabilités de conformité a été développée (Croquelois et al., 2022). Cette méthode implique l'estimation de la loi des données. Afin d'assurer une certaine continuité entre le cas univarié et le cas multivarié, il est souhaitable que la méthode d'estimation de la loi multivariée puisse avoir les mêmes lois marginales que celles estimées dans le cas univarié. Une manière de procéder est d'appliquer les lois marginales à la fois aux distributions et aux limites de spécifications

$$P_u = \mathbb{P}(F_1(X_1) \leq F_1(U_1), \dots, F_d(X_d) \leq F_d(U_d)) = C(F_1(U_1), \dots, F_d(U_d)) \quad (3.4)$$

et

$$P_l = \mathbb{P}(F_1(X_1) \geq F_1(L_1), \dots, F_d(X_d) \geq F_d(L_d)) = \overline{C}(F_1(L_1), \dots, F_d(L_d)) \quad , \quad (3.5)$$

où C est la copule du vecteur aléatoire $X_1, \dots, X_d$ et la fonction $\overline{C}$ n'est autre que la copule de survie de la copule C (Sklar, 1959).

Cette transformation permet de réécrire les taux de conformité en fonction de C et $\overline{C}$.

Comme il existe des formules permettant de passer de la copule à la copule de survie, le problème d'estimation des taux de conformité P_u et P_l peut se réécrire comme celui d'estimer les lois marginales $F_1, \dots, F_d$ et la copule C . L'estimateur des lois marginales étant fait par mélange de lois de Student chez SAE (voir par exemple (Croquelois et al., 2022)), nous nous concentrerons sur l'estimation de la copule C .

Estimer une structure de dépendance est un problème complexe en grande dimension. Ainsi, pour simplifier le problème statistique, on souhaite le découper en sous-problèmes de dimensions plus faible. En effet, s'il existe une partition $B_1, \dots, B_K$ telle que le vecteur aléatoire $\mathbf{X}_{B_k} = (X_j | j \in B_k)$ est indépendant du vecteur aléatoire

$\mathbf{X}_{B_{k'}}, k \neq k'$ alors

$$P_u = \prod_{k=1}^K \mathbb{P}(\cap_{j \in B_k} \{F_j(X_j) \leq F_j(U_j)\}) \quad (3.6)$$

et

$$P_l = \prod_{k=1}^K \mathbb{P}(\cap_{j \in B_k} \{F_j(X_j) \geq F_j(L_j)\}) \quad (3.7)$$

Il en va de même pour la formulation avec la copule et la copule de survie. Cependant, en pratique, il peut être difficile de séparer les caractéristiques en blocs totalement indépendants. De plus, dans de nombreux cas, cela impliquerait d'avoir des blocs peu homogènes, car ils pourraient contenir des variables fortement dépendantes et d'autres faiblement dépendantes. Alors, une interprétation des caractéristiques dans un même groupe serait complexe. On préfère donc construire des blocs homogènes, au sens où les variables dans un même bloc ont le même comportement, même s'ils ne sont pas indépendants les uns des autres. Ainsi, l'utilisation de copules arborescentes pour l'estimation de la structure de dépendance offre l'avantage de pouvoir combiner deux copules arborescentes sur des ensembles de caractéristiques distinctes, afin d'obtenir une copule arborescente sur l'ensemble des variables (Müller et Czado, 2019a). Ceci, nous permet de construire des blocs avec des dépendances internes fortes qui seront facilement analysables par les experts métiers, et de les regrouper pour en déduire une structure de dépendance globale.

3.1.3 Représenter la corrélation empirique comme un graphe aléatoire

Le regroupement de caractéristiques en blocs a plusieurs avantages. Cela permet à la fois de simplifier l'estimation de la structure de dépendance et d'avoir une meilleure compréhension du processus de fabrication.

Pour mesurer la dépendance entre les variables à partir d'un échantillon de données, une possibilité est de regarder la matrice de corrélation empirique.

Remarque 3.1. Dans cette thèse, on fera référence à la “corrélation” comme n'importe quelle mesure de dépendance. Cela peut être des corrélations classiques (Pearson, Spearman), le τ de Kendall, la corrélation des distances ou encore l'indice proposé par (Junker et al., 2021). Ces indices ont été présentés en section 2.3.2.

On note $\mathbf{R}$ la matrice de corrélation de $\mathbf{X}$ et $\hat{\mathbf{R}}$ la matrice de corrélation empirique de l'échantillon $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(n)}$.

Empiriquement, nous observons souvent la présence de blocs de variables avec une “même” valeur de corrélation. Alors, à une permutation près, la matrice de corrélation possède une structure proche d'une structure par blocs. Nous proposons donc d'appliquer les méthodes des DCsBM aux matrices de corrélation pour retrouver les blocs dans les données. Nous allons maintenant proposer une justification pour ce choix.

La matrice $\hat{\mathbf{R}}$ peut être vue comme la matrice de poids d'un graphe aléatoire pondéré, dont l'ensemble des nœuds $V = \{1, \dots, d\}$ correspond aux caractéristiques et dont la fonction de poids de l'arrête (i, j) est $W_{i,j} = \hat{\mathbf{R}}_{i,j}$. On cherche alors une partition $\mathbf{c}$ de V en K blocs telle que la loi de $W_{i,j}$ dépende principalement de c_i et c_j .

L'idée derrière ce choix de modélisation est que, souvent, la corrélation présente entre les caractéristiques peut être expliquée à l'aide de variables latentes. Par exemple, la corrélation entre les diamètres de trous sur une même couronne s'explique par l'utilisation d'un même outil lors de la fabrication. Plus généralement, les variables latentes de fabrication telles que la température, des paramètres des machines utilisées ou des opérateurs permettent d'expliquer certaines dépendances entre les caractéristiques. Si l'on connaissait toutes les variables latentes associées aux mesures, qui peuvent être les mêmes que pour la fabrication, la variabilité résiduelle correspondant notamment aux erreurs de mesures pourrait alors être associée à du bruit blanc. Ainsi sous cette modélisation, la matrice de corrélation (théorique) des caractéristiques conditionnellement aux variables latentes a une structure de blocs. Deux caractéristiques appartiennent alors à un même bloc si elles dépendent de la même combinaison de variables latentes.

Par ailleurs, nous proposons une justification pour la notion d'asymptotique, i.e. lorsque le nombre de caractéristiques tend vers l'infini.

Souvent, pour étudier les propriétés théoriques des graphes aléatoires, il est fait l'hypothèse que l'on observe un sous-graphe d'un graphe infini. Dans cette thèse, on fait l'hypothèse que les données sont issues d'un processus de production stable. Cela implique qu'un changement impactant de la manière de produire la pièce ou la casse d'un outil puisse briser cette hypothèse. Il peut alors paraître inadapté de considérer que le nombre de pièces contrôlées avec un même procédé de production puisse croître infiniment. On aurait alors envie de considérer que le nombre de caractéristiques croît. Pour autoriser l'augmentation de ce nombre, on regarde alors la manière dont sont mesurées les caractéristiques. Prenons un exemple simple tel qu'un diamètre, dont la forme est supposée être un cercle parfait. Alors le diamètre réel existe, mais on ne le mesure jamais parfaitement. En effet, une manière classique de faire est de mesurer plusieurs points sur la pièce et d'estimer à partir d'une méthode de

best-fit, une valeur pour le diamètre. Ainsi, en répétant la mesure, les points mesurés ne seront jamais les mêmes et on obtiendra des valeurs légèrement différentes. En mesurant chaque caractéristique plusieurs fois, on peut donc construire, un graphe avec un nombre infini de caractéristiques (dans ce cas, le nombre de classes est fixé).

3.1.4 Optimisation des contrôles en production

Le problème d'optimisation des contrôles en production est vu dans cette thèse comme le problème de gagner en temps de mesure. En effet, le temps de mesure d'une pièce représente environ 30% de son temps de production. Cette partie, bien que primordiale, représente donc un coût important. De plus, la présence d'une forte dépendance statistique entre certaines caractéristiques invite à se demander si toutes les mesures sont nécessaires pour juger de la conformité de la pièce. Afin de répondre à ce problème, SAE a mis en place une méthodologie statistique pour autoriser, dans certains cas, à ne mesurer qu'une partie des caractéristiques d'une pièce. La conformité de la pièce est alors prédite à partir des caractéristiques mesurées, en autorisant un risque α (souvent de l'ordre de 0,27%) de prédire une pièce conforme alors qu'elle ne l'est pas. La procédure de mesure d'une pièce se divise en trois cas de figures 3.1.

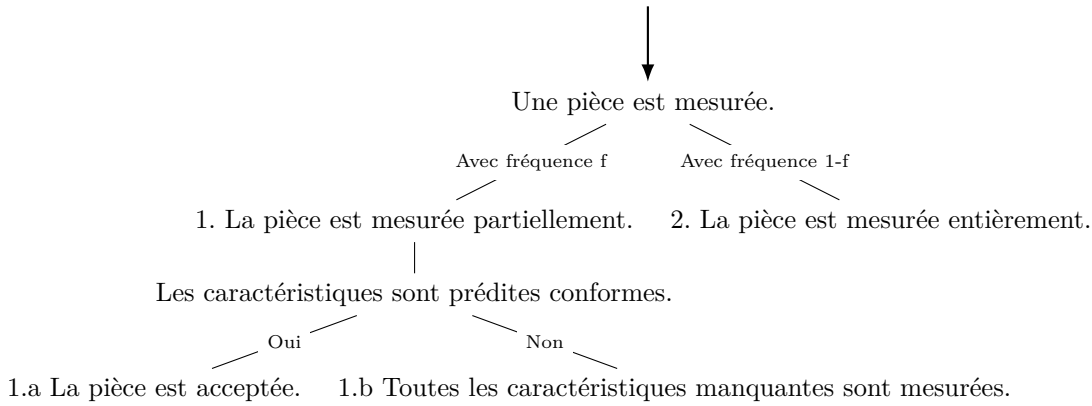


FIGURE 3.1 – Principe de fonctionnement de l'échantillonnage par corrélation

La situation 2. permet de s'assurer qu'il n'y a pas de dérive dans la production et de vérifier la validité du modèle.

On peut alors réécrire le temps de mesure moyen d'une telle procédure en termes mathématiques.

Si on note alors $T(S)$, le temps de mesure associé à un sous-ensemble de caractéristiques mesurées $S \subset \{1, \dots, d\}$ et $p(S)$ la probabilité qu'une pièce soit prédite conforme lorsqu'on ne mesure que le sous-ensemble S , le temps de mesure moyen T d'une pièce est

$$\begin{aligned}
 T &= f \cdot [p(S) \cdot T(S) + (1 - p(S)) \cdot T(\{1, \dots, d\})] + (1 - f) \cdot T(\{1, \dots, d\}) \\
 &= f \cdot p(S) \cdot (T(S) - T(\{1, \dots, d\})) + T(\{1, \dots, d\})
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Dès lors, minimiser le temps de mesure revient à maximiser

$$p(S) \cdot (T(\{1, \dots, d\}) - T(S)) \tag{3.9}$$

Il y a donc un compromis à faire entre $p(S)$ la probabilité de conformité de la pièce échantillonnée et $T(\{1, \dots, d\}) - T(S)$ le gain de temps. En effet, pour que le gain de temps augmente, il est nécessaire de mesurer moins de caractéristiques. Dans le même temps, moins on mesure de caractéristiques, plus il y a de caractéristiques à prédire et plus la tâche est difficile. La probabilité de prédire une pièce conforme est alors plus faible.

Avant de chercher à résoudre ce problème de minimisation du temps de contrôle, il est nécessaire de modéliser l'étape de contrôle elle-même. Dans cette partie de la thèse, on considère uniquement les mesures issues d'une machine à mesurer tridimensionnelle (MMT). Le capteur de mesure d'une MMT peut se déplacer très rapidement. Ainsi pour notre modélisation du temps de mesure, on néglige le temps de déplacement du capteur entre deux mesures. On considère donc que le temps de mesure d'une pièce correspond simplement à la somme des temps de mesure de chaque élément. Une particularité de ce problème par rapport à un problème de sélection de variables classique, est qu'une mesure de la pièce ne correspond pas toujours à une caractéristique. Par exemple, si l'on reprend l'exemple en figure 1.7, pour mesurer la caractéristique 004, plusieurs mesures sont nécessaires. Alors que pour mesurer la 001 ou la 002, une seule l'est. Ainsi, les liens entre les caractéristiques et les mesures peuvent être modélisés par un graphe dit de mesure. C'est pourquoi, de manière générale, on peut voir le graphe de mesure comme une polyforêt, c'est à dire un ensemble de graphes acycliques dirigés. Par

exemple si on considère une aube et que l'on est intéressé uniquement dans la mesure d'une seule caractéristique sur plusieurs sections, on aura comme graphe de mesure celui en figure 3.2. Dans ce cas-là, si les temps de mesure sont les mêmes, alors réduire le temps de mesure revient simplement à diminuer le nombre de sections mesurées.

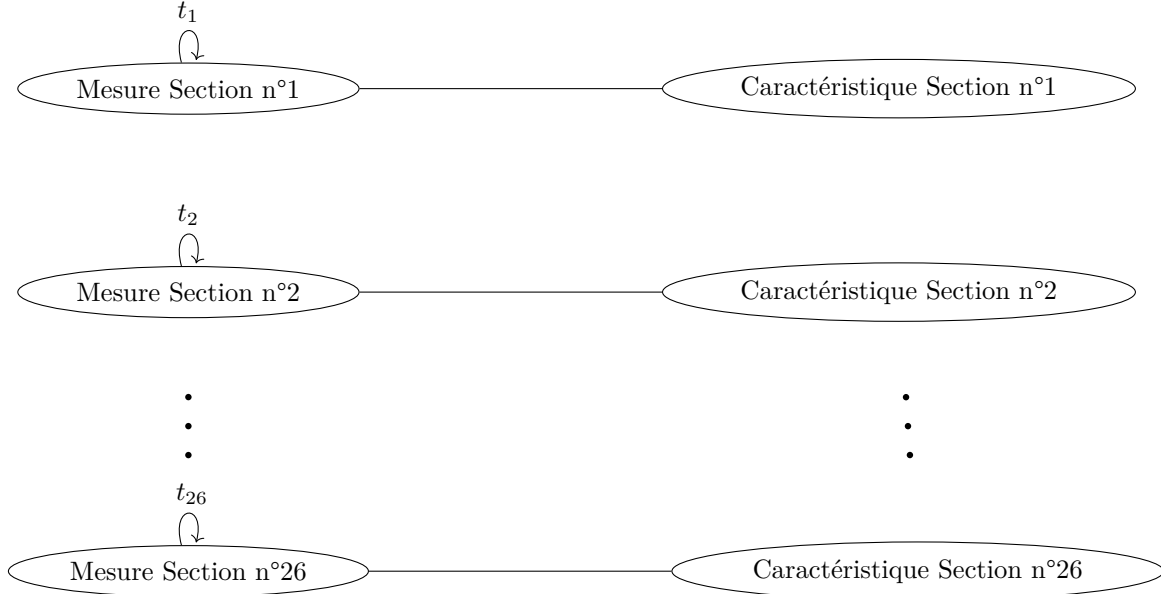


FIGURE 3.2 – Exemple de graphe de dépendance pour une caractéristique mesurée sur différentes sections d'une aube avec les temps de mesures.

Cependant, généralement, les situations réelles sont plus complexes. Par exemple, toujours sur l'aube, si on regarde deux caractéristiques par section, on peut avoir le graphe en figure 3.3.

De manière générale, le graphe de dépendance des mesures peut être assez complexe. Par exemple, sur une simple cale qui ne fait qu'une trentaine de centimètres avec 37 caractéristiques (c.f. Figure 3.4), on obtient le graphe avec 183 nœuds en figure 3.5.

Pour représenter cette structure entre les caractéristiques de conformité et les mesures faites sur la pièce, on peut donc utiliser un graphe. Nous considérons le graphe dont la matrice d'adjacence $\mathbf{G} \in \{0, 1\}^{M \times d}$, avec M le nombre de mesures. Elle est telle que $G_{ij} = 1$ si la mesure i est nécessaire pour la caractéristique j , 0 sinon. Notons $\mathbf{P}_S \in \{0, 1\}^{d \times K}$ la matrice de projection qui indique pour un ensemble S les K caractéristiques à mesurer, i.e. si $S = \{i_1, i_2, \dots, i_K\} \subset \{1, \dots, d\}$ et $\mathbf{P}_S = (e_{i_1} | e_{i_2} | \dots | e_{i_K})$ où e_j est le j -ème vecteur canonique de $\mathbb{R}^d$. On la note $\mathbf{P}$ s'il n'y a pas d'ambiguïté. La matrice $\mathbf{G} \times \mathbf{P}$ représente les mesures qui doivent être faites pour mesurer ces K caractéristiques. Si l'on reprend l'exemple du couvercle d'huile (c.f. Figure 1.7), on obtient

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.10)$$

Si on ne souhaite mesurer que les deux caractéristiques 1 et 3 alors

$$\mathbf{G} \times \mathbf{P} = \mathbf{G} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} ; \quad (3.11)$$

ce qui montre que seule une des trois mesures est nécessaire pour mesurer ces deux caractéristiques.

Si on souhaite mesurer uniquement les caractéristiques 1, 2 et 5, alors on doit en fait réaliser toutes les mesures comme le montre le calcul

$$\mathbf{G} \times \mathbf{P} = \mathbf{G} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.12)$$

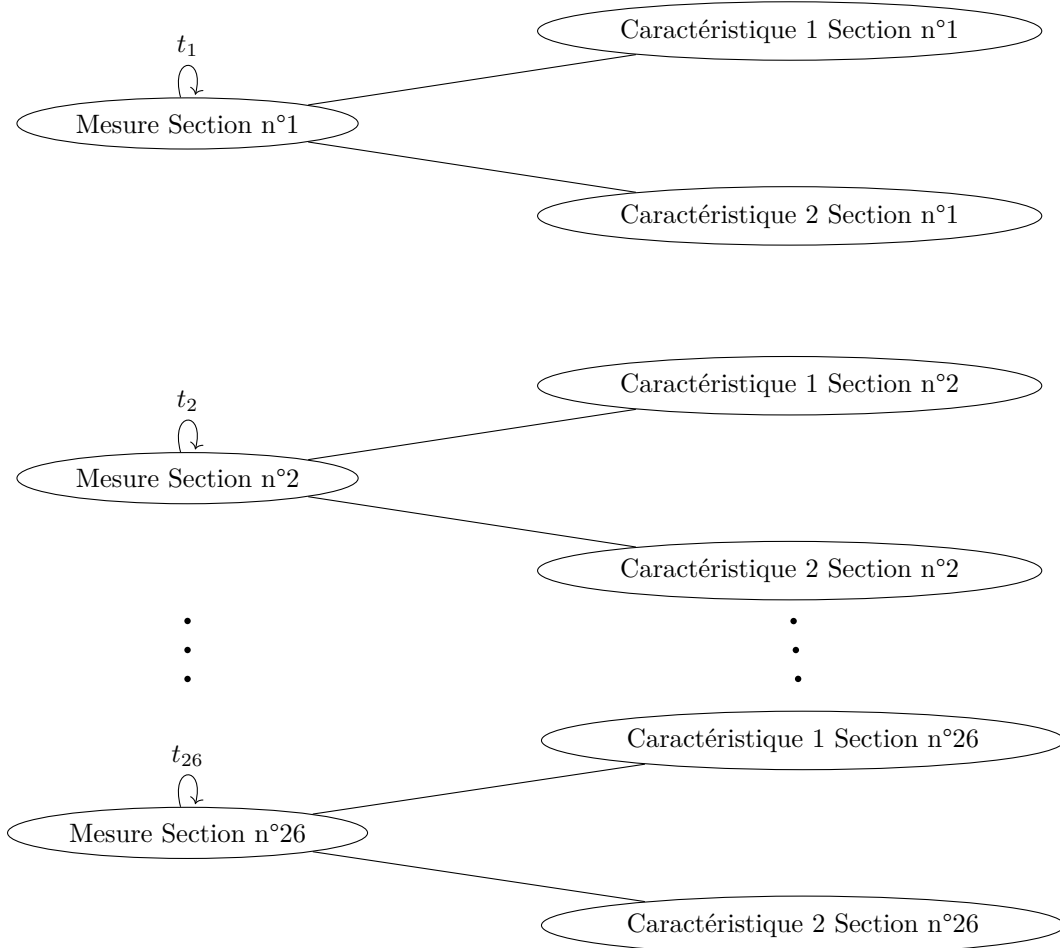


FIGURE 3.3 – Exemple de graphe de dépendance, avec les temps de mesures, pour deux caractéristiques mesurées sur différentes sections d'une aube.

Pour avoir une écriture mathématique du temps de mesure, il suffit alors de calculer

$$T(S) = \sum_{m=1}^M t_m \max_{1 \leq j \leq K} (\mathbf{G} \times \mathbf{P}_S)_{mj} \quad . \quad (3.13)$$



FIGURE 3.4 – Photo une cale avant contrôle.

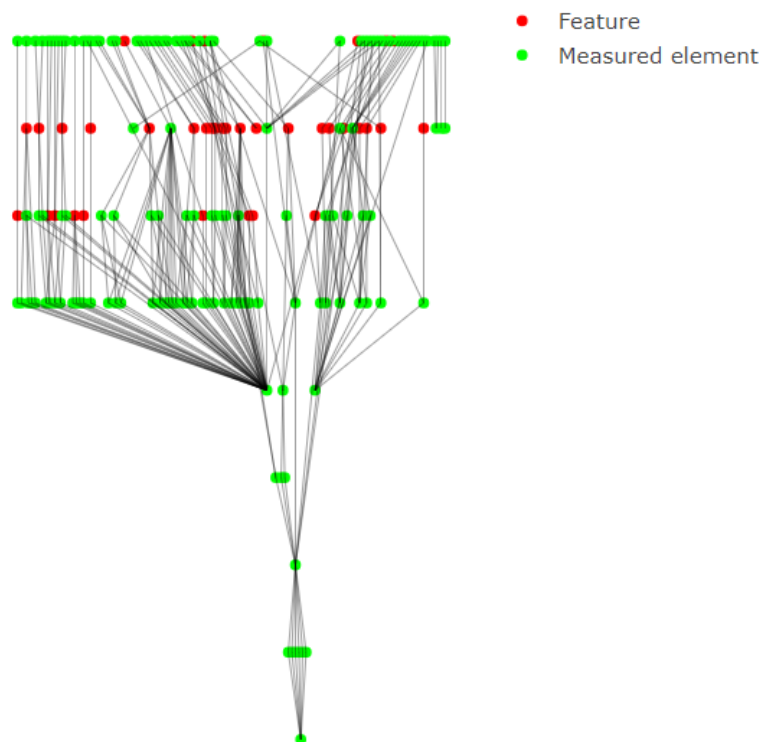


FIGURE 3.5 – Graphe de dépendance des mesures pour une cale. En rouge (*feature*) sont représentées les caractéristiques de conformité. En vert (*Measured element*) sont représentées les mesures faites par la MMT. Les liens représentent les mesures nécessaires pour calculer les caractéristiques de conformité

3.2 Estimation robuste dans les SBM

Les données de production peuvent comporter des valeurs aberrantes ou mal mesurées. Les mesures de dépendances empiriques calculées sur ces données, peuvent alors elles aussi inclure des valeurs aberrantes ou être biaisées (Croux et Dehon, 2010).

Comme nous l'avons vu au chapitre 2.1.3, la méthode classique pour l'inférence des SBM est le maximum de vraisemblance. Or, dans le cas classique i.i.d., le maximum de vraisemblance peut être fortement sensible aux valeurs aberrantes, là où, a contrario, d'autres critères statistiques, tels que la distance de Hellinger, permettent une certaine robustesse comme illustré sur la figure 2.2.

Dans la suite de cette section, on réécrira la partition comme une matrice $\mathbf{c}$ de taille $n \times K$, telle que $c_{ik} = I(c_i = k)$.

Ainsi, notre objectif est d'utiliser ces critères robustes, et, en particulier, ceux présents dans la classe des φ -divergences pour obtenir un estimateur robuste. Pour une matrice de poids $\mathbf{W}$, une partition $\mathbf{c}$ en K classes et un modèle paramétrique $(P_\psi)_{\psi \in \Theta}$, $\Theta \in \mathbb{R}^p$, on peut écrire la (log-)vraisemblance conditionnellement à $\mathbf{c}$ d'un SBM de famille de poids $(P_\psi)_{\psi \in \Theta}$ comme

$$\text{plk}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) \log \mathbb{P}_{\theta_{kl}}(W_{ij}) \quad (3.14)$$

Ainsi, si on regarde uniquement l'estimation des paramètres $(\boldsymbol{\theta})$, cela revient à prendre le maximum de vraisemblance du modèle dans chaque bloc k, l . Dans le cadre statistique où l'on dispose d'un échantillon de taille n et non d'un graphe, maximiser la vraisemblance est équivalent à minimiser la divergence de KL entre la fonction de répartition empirique et le modèle. Bien que le résultat ne se transpose pas directement ici, il est tout de même possible de remplacer la vraisemblance par la divergence de KL. Il faut alors minimiser

$$\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D_{KL}(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (3.15)$$

où $n_k = n_k(\mathbf{c})$ est le nombre de noeuds assignés à la classe k pour la partition $\mathbf{c}$ et

$$\hat{F}^{(k,l)}(x) = \frac{1}{n_k n_l} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) I(W_{ij} \leq x) \quad (3.16)$$

est simplement la fonction de répartition empirique dans le bloc k, l . Cependant, tout comme la vraisemblance, la divergence de KL, n'a pas de bonnes propriétés de robustesse. Par conséquent, plutôt que de se restreindre à cette divergence, nous considérons le critère suivant.

Définition 3.1 (BPDC). On appelle $\hat{Q}^c$ **critère à pseudo-distance par blocs** (BPDC pour *Block pseudo-distance criterion*) :

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (3.17)$$

où D est n'importe quelle pseudo-distance.

Remarque 3.2. Il est possible de considérer une pseudo-distance pour chaque bloc, et les résultats énoncés dans la suite sont vrais dans ce cas plus général. Néanmoins, afin de ne pas alourdir les notations, nous regardons ici uniquement le cas où elle est identique pour chaque bloc.

3.2.1 Propriétés théoriques de l'estimateur

Pour notre estimateur $\hat{Q}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$, nous démontrons des résultats de convergence. Etant donné que l'on cherche à développer une méthode robuste, il n'est pas cohérent de supposer que la véritable loi des données est un SBM. De fait, il est possible qu'il n'y ait pas de partition latente ou que le modèle paramétrique pour les poids des arêtes ne contienne pas la véritable loi. Pour cela, on doit donc définir les quantités d'intérêt.

Si on note $F^{(k,l)}$ la loi des observations dans le bloc k, l (pour la partition $\mathbf{c}$), i.e.

$$F^{(k,l)}(x) = \frac{1}{n_k(\mathbf{c})n_l(\mathbf{c})} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) \mathbb{P}(W_{ij} \leq x) \quad , \quad (3.18)$$

on considère alors comme valeurs à atteindre

$$(\mathbf{c}^*, \boldsymbol{\theta}^*) \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}} \sum_{kl} \frac{n_k(\mathbf{c})n_l(\mathbf{c})}{n^2} D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad . \quad (3.19)$$

On peut interpréter en quelque sorte $\mathbf{c}^*, \boldsymbol{\theta}^*$ comme définissant le graphe issu d'un modèle SBM le plus proche du graphe observé.

En particulier, si le graphe est généré sous un modèle SBM avec les lois du poids des arêtes qui appartiennent au modèle paramétrique donné, sous certaines conditions d'identifiabilité, on retrouve le véritable modèle.

On montre alors, sous des conditions de régularité de la pseudo-distance considérée, ainsi que d'identifiabilité, les résultats suivants.

Théorème 3.1 (Théorèmes 4.3 et 4.4). *Soit $\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\boldsymbol{\theta}} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}} \sum_{kl} \frac{n_k(\mathbf{c})n_l(\mathbf{c})}{n^2} D(\hat{F}^{(k,l)}(\mathbf{c}), P_{\theta_{kl}})$ les estimateurs issus de la minimisation du BPDC. Si le nombre de classes K dans le modèle ne croît pas trop vite, i.e. $\frac{n}{K^2 \log(K)} \rightarrow \infty$, sous certaines conditions sur la régularité de la pseudo distance et l'identifiabilité du modèle, alors le critère converge pour l'estimation de $\mathbf{c}^*$ et*

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} \boldsymbol{\theta}^* \quad (3.20)$$

Sous un SBM, le BPDC permet donc d'estimer (asymptotiquement) les véritables paramètres du modèle. Et si la loi du graphe $\mathbf{W}$ ne correspond pas à celle d'un SBM, le critère converge vers une "projection" de ce modèle sur l'ensemble des SBM.

Remarque 3.3. *Le choix de l'estimateur $\hat{F}^{(k,l)}$ peut influencer sur la condition $\frac{n}{K^2 \log(K)} \rightarrow \infty$. En effet, en fonction de ses propriétés de concentration, il se peut que la condition puisse être remplacée par $\frac{n}{K \log(K)} \rightarrow \infty$.*

Proposition 3.1 (Corollaires 4.5.1 et 4.5.3). *Les hypothèses du théorème 3.1 sont notamment vérifiées pour les φ -divergences telles que la fonction φ est γ -Hölder avec $\gamma \in (0, 1]$ ou la distance de Cramér-von Mises.*

Ainsi, par rapport aux résultats de (Choi et al., 2012) (c.f. Théorème 2.1) qui autorise K à être un $O(\sqrt{n})$, nous avons dans le pire des cas que $K = o(\sqrt{n})$. De plus, dans le cas où la condition sur le nombre de classes est $\frac{n}{K \log(K)} \rightarrow \infty$, notre critère bénéficie de la même vitesse de convergence que celui de (Rohe, Qin et al., 2014), (c.f. Théorème 2.4). Ainsi sous une contrainte légèrement plus forte sur le nombre de classes dans le SBM, nous montrons la convergence d'un estimateur que nous espérons plus robuste que la vraisemblance.

3.2.2 Optimisation du critère

Les résultats de convergence énoncés se basent sur le minimum de la fonctionnelle $\hat{Q}$. Cependant, trouver ce minimum requiert d'optimiser sur l'espace des partitions, ce qui est un problème NP-difficile (Kovalyov et Pesch, 2010). C'est pourquoi, en pratique, il est impossible de trouver $\tilde{\mathbf{c}}$. Néanmoins, afin d'en trouver une approximation, on considère une relaxation du problème. Pour cela, on considère $\mathbf{c} \in [0, 1]^{n \times K}$ et $\sum_k c_{ik} = 1$ pour tous les nœuds i , au lieu de $\mathbf{c} \in \{0, 1\}^{n \times K}$ et $\sum_k c_{ik} = 1$ pour tous les nœuds i . Ainsi, le critère a l'avantage d'être dérivable par rapport à $\mathbf{c}$. On peut alors utiliser les méthodes usuelles de descente de gradient pour l'optimisation du critère.

Cela revient à considérer l'algorithme 2.

Algorithme 2 Optimisation de $\hat{Q}^c$

Entrée: Une matrice de poids $\mathbf{W}$ de taille $n \times n$, un nombre de blocs K , un pas de gradient η , une partition initiale $\mathbf{c}^{(0)}$ et un nombre d'itérations T .

- 1: **pour** $t = 1$ à T **faire**
- 2: Calculer $\theta_{k,l}^{(t)} = \operatorname{argmin}_{\theta} D(\hat{F}^{(k,l)}(\mathbf{c}^{(t-1)}), P_{\theta})$, pour $1 \leq k, l \leq K$.
- 3: Calculer $\mathbf{G}^{(t)} = \nabla_{\pi} \hat{Q}^c(\mathbf{c}^{(t-1)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)})$
- 4: **pour** $i = 1$ à n **faire**
- 5: $\mathbf{c}_{i.}^{(t)} = \operatorname{Proj}(\mathbf{c}_{i.}^{(t-1)} - \eta \mathbf{G}_{i.}^{(t)})$
- 6: **fin pour**
- 7: **fin pour**

Sortie: $\mathbf{c}^{(T)}$ and $\boldsymbol{\theta}^{(T)}$.

où Proj est la projection pour la distance l_2 sur le simplexe de probabilité de taille K , i.e. l'ensemble $\Delta = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^K \mid \sum_{i=1}^K x_i = 1 \right\}$.

Proposition 3.2 (Proposition 4.9). *La suite d'estimateurs $(\mathbf{c}^{(T)}, \boldsymbol{\theta}^{(T)})_T$ définie par l'algorithme 2 converge vers un minimum local de $\hat{Q}^c$.*

3.2.3 Sélection de modèles

Si les données étaient vraiment issues d'un SBM, on souhaiterait que notre critère basé sur les divergences puisse nous permettre de faire de la sélection de modèle, i.e. choisir le nombre de blocs dans le SBM.

Pour ce faire, nous généralisons le critère de sélection de modèle proposé par (Mattheou et al., 2009) dans le cas des divergences avec un estimateur à noyau. Avant de traiter le cas d'un graphe, on considère le cas usuel d'un échantillon *i.i.d.* $X_1, \dots, X_n$ de loi F . Et l'on se donne un modèle paramétrique $P_{\theta \in \Theta}$, $\Theta \in \mathbb{R}^p$.

On notera ici $W_\theta = D(F, F_\theta)$ et sa version empirique $Q_\theta = D(F_n, F_\theta)$.

Nous généralisons les travaux de (Mattheou et al., 2009) qui dérivent un critère de type AIC dans le cas particulier des divergences introduites par (Basu, Harris et al., 1998) et ceux de (Toma, 2014) dans le cas de l'estimateur dual des divergences.

Théorème 3.2 (Théorème 4.6). *Soient θ un paramètre possible pour le modèle, $\tilde{\theta} = \operatorname{argmin}_\theta W_\theta$ et $\theta^* = \operatorname{argmin}_\theta W_\theta$. Supposons que*

1. *les fonctions Q_θ et W_θ sont suffisamment régulières pour qu'un développement de Taylor à l'ordre 2 puisse être fait*
2. *il existe une matrice $B(\theta^*)$ inversible et une matrice $V(\theta^*)$ telles que*
3. *$n^{1/2}(\tilde{\theta} - \theta^*) \underset{n \rightarrow \infty}{\overset{d}{\rightsquigarrow}} N(0, B^{-1}(\theta^*)V(\theta^*)B^{-1}(\theta^*))$.*

Alors un estimateur asymptotiquement non biaisé de $W_{\tilde{\theta}}$ est donné par

$$Q_{\tilde{\theta}} - \text{Biais}(\theta^*) + \frac{1}{n} E[N^T B^{-1}(\theta^*) N] \quad (3.21)$$

où $N \sim N(0, V(\theta^))$ et $\text{Biais}(\theta^*) = Q_{\theta^*} - W_{\theta^*}$.*

En particulier, si les données ont été générées sous le modèle, on a

Théorème 3.3 (Théorème 4.7). *Sous les hypothèses du théorème 3.2, si de plus la loi des données F vérifie $F = F_{\theta^*}$ et $V(\theta^*) \stackrel{\mathbb{P}}{=} B(\theta^*)$ alors*

$$Q_{\tilde{\theta}}^c - \text{Biais}(\theta^*) + \frac{p}{n} \quad (3.22)$$

est un estimateur asymptotiquement non biaisé de $E[W_{\tilde{\theta}_n}]$ et le terme de biais se simplifie en $\text{Biais}(\theta^) = E[Q_{\tilde{\theta}^*}^c]$.*

Remarque 3.4. *Dans le cas particulier des divergences, sous le modèle, il est connu (voir par exemple (Lindsay, 1994)) que $V(\theta^*) \stackrel{\mathbb{P}}{=} B(\theta^*)$.*

Remarque 3.5. *Dans le cas d'un modèle par blocs, le résultat du théorème 3.3 reste vrai en remplaçant le terme $\frac{p}{n}$ par $p \frac{K(K-1)}{2n^2} \approx p \frac{K^2}{2n^2}$.*

Proposition 3.3 (Proposition 4.11). *Dans le cadre des estimateurs des divergences avec un estimateur à noyau, si φ est γ -Hölder alors*

$$0 \leq \text{Biais}(\theta^*) \leq O(n^{-1/3}) \quad . \quad (3.23)$$

Ainsi le terme de biais peut ne pas être négligeable devant le terme en $\frac{p}{n}$.

3.2.4 Robustesse de l'estimateur

L'intérêt lié à l'utilisation des divergences étant leurs propriétés de robustesse, une question est de savoir si notre approche bénéficie bien de ces propriétés. Ainsi, nous démontrons, comme attendu, que pour l'estimation des paramètres θ^* , la méthode hérite des propriétés de robustesse des divergences choisies. Pour ce faire, nous regardons la fonction d'influence de notre critère.

Proposition 3.4. *Si la divergence D_φ est B -robuste, alors l'estimateur $\hat{Q}^c$ est aussi B -robuste.*

De manière plus générale, nous étendons aussi le résultat de (Makarychev et al., 2016) autorisant des mauvaises spécifications en terme de distance de Kullback-Leibler à un résultat similaire pour les divergences de la famille de Cressie-Read.

Proposition 3.5 (Proposition 4.16). *Soit $\gamma > 1$. Pour deux distributions P et Q et un événement E tel que $1 > P(E) > 0$, on a*

$$\max \left\{ 2P(E), \quad P(E)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{\gamma(\gamma-1)}{1-2^{1-\gamma}} D_\gamma(P, Q) \right)^{1/\gamma} \right\} \geq Q(E) \quad (3.24)$$

où D_γ représente la divergence de Cressie-Read de paramètre γ .

En particulier, pour une suite de distributions $(P_n)_n$ et une suite d'évènements $(\epsilon)_n$ telles que $P_n(\epsilon_n) \rightarrow 0$, alors pour n'importe quelle suite de distributions $(Q_n)_n$, pourvu que la divergence entre P_n et Q_n ne croisse pas plus vite que $P_n(\epsilon_n)^{\gamma-1}$, $Q_n(\epsilon_n) \rightarrow 0$.

Les propriétés de robustesse de notre estimateur peuvent notamment être illustrées dans le cas discret. Considérons un modèle SBM avec deux blocs. Les poids sont distribués selon des lois Binomiales $(10, \theta_{ij})$ de paramètres $\theta_{ij} = 0.8$ si les deux nœuds sont dans un même bloc et $\theta_{ij} = 0.5$ sinon. La probabilité qu'un nœud appartienne à la classe 1 est de 0.5 et on génère 100 graphes de différentes tailles, d'une part, sous le modèle et, d'autre part, dans un cas avec des valeurs aberrantes : avec une chance sur deux, le poids de chaque arête est mis à 0. Les résultats sont présentés en figures 3.6 et 3.7 où l'on compare le maximum de vraisemblance avec notre approche en utilisant la distance de Hellinger.

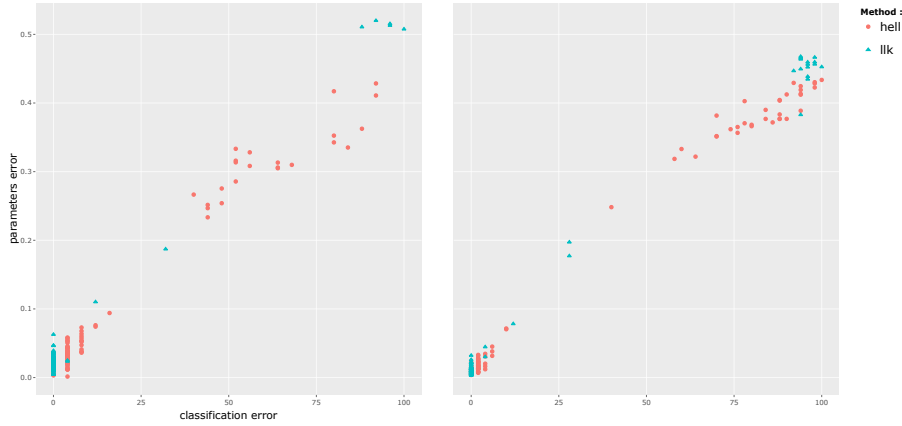


FIGURE 3.6 – Graphique de l'erreur l_1 pour l'estimation des paramètres (axe y) et du pourcentage de nœuds mal classifiés (axe x) pour $n = 50$ (gauche) et $n = 100$ (droite) sous le modèle.

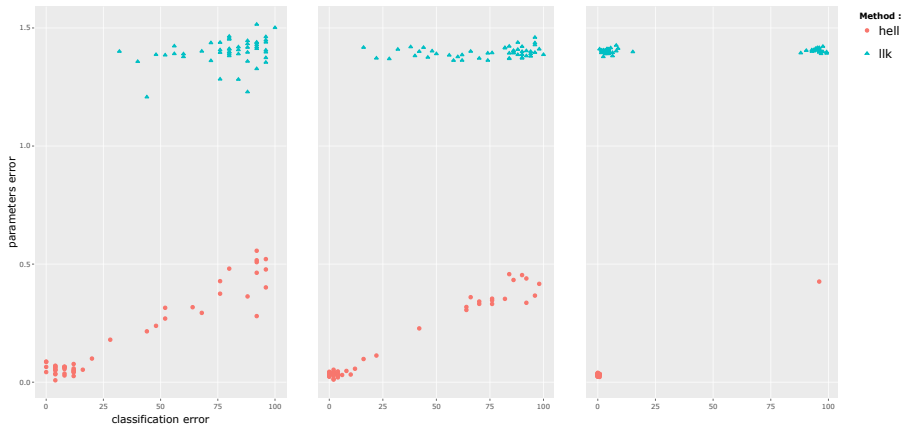


FIGURE 3.7 – Graphique de l'erreur l_1 pour l'estimation des paramètres (axe y) et du pourcentage de noeuds mal classifiés (axe x) pour $n = 50$ (gauche), $n = 100$ (milieu) et $n = 250$ (droite) pour le modèle avec des valeurs aberrantes.

Sous le modèle, on observe que les deux méthodes performent de manière assez similaire et arrivent majoritairement à retrouver avec précision la véritable partition ainsi que les paramètres du modèle, avec un léger avantage pour la vraisemblance. Dans le cas avec des valeurs aberrantes, on observe alors que la méthode basée sur la vraisemblance a beaucoup plus de mal à retrouver la véritable partition et même lorsque c'est le cas, l'estimation des paramètres est fortement biaisée. A l'inverse, notre méthode avec la distance de Hellinger arrive plus souvent à retrouver la véritable partition. De plus, même en présence de valeurs aberrantes, l'estimateur des paramètres est proche de la valeur du paramètre sans les valeurs aberrantes.

3.3 Etude des méthodes de la littérature : modularité et vraisemblance

Le BPDC présenté à la section précédente a l'avantage d'hériter des nombreuses propriétés de robustesse des divergences. Cela le rend particulièrement intéressant appliqué à des données réelles qui peuvent contenir des valeurs aberrantes. Cependant, un désavantage de ce critère est son temps de calcul. En effet, comparé aux méthodes classiques de la littérature, telles que celles basées sur la vraisemblance ou la modularité, l'estimation de la partition et des paramètres est très longue dès que les graphes comportent plusieurs centaines de nœuds.

Par conséquent, on peut se demander quelles sont les propriétés de robustesse de ces méthodes et s'il existe des alternatives simples proposant des améliorations.

3.3.1 Modularité

(Newman, 2016) a montré que sous un modèle DCSBM particulier, dont on connaît les paramètres, chercher la partition qui maximise la vraisemblance et maximiser la modularité (avec une certaine limite de résolution qui dépend des paramètres) sont deux problèmes équivalents. En particulier, sous ce modèle de graphe, on peut donc s'attendre à ce que la modularité retrouve bien la partition latente.

Néanmoins, la modularité a été initialement introduite indépendamment du modèle DCSBM. On peut donc espérer qu'elle arrive à retrouver la partition latente dans d'autres cas que le modèle spécifique de (Newman, 2016). De telles conditions ont notamment été données par (Zhao et al., 2012) pour un paramètre de résolution fixé égal à 1.

Néanmoins, plusieurs questions se posent.

1. Quelle est sur l'influence de la modification du paramètre de résolution sur les conditions données par (Zhao et al., 2012), nécessaires à la convergence de la modularité ?
2. Que se passe-t-il lorsque l'on change de modèle nul ?

Avant de répondre à ces questions, on commence par étudier plus en détail le critère proposé par (Newman, 2016).

Pour cela, on considère $\mathbf{W}$ la matrice de poids d'un graphe à n nœuds et $\mathbf{c}$ est une partition des nœuds du graphe en K classes.

Proposition 3.6 (Proposition 5.2). *La vraisemblance profilée d'un DCSBM pour le modèle considéré par (Newman, 2016) est donnée par*

$$\log \left(\frac{s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \frac{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \right) s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) + \log \left(\frac{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \right) - 1 \quad (3.25)$$

où s et $\overline{\mathbf{W}}$ sont définis comme en section 2.1.1.

Ce critère, que l'on appelle ici AutoResMod, peut s'écrire en fonction de la distance de Kullback-Leibler entre deux lois de Bernoulli (KL_B)

$$\text{AutoResMod}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = KL_B(s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) | s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})) - 1 \quad (3.26)$$

Maximiser le critère AutoResMod conduit alors à une amélioration importante de la modularité sur l'anneau de cliques, comme illustré en figure 3.8 sur un exemple classique utilisé pour illustrer les limites de la modularité.

En reprenant la même approche que (Zhao et al., 2012) (c.f. Théorème 2.3.1), la proposition suivante répond à la première question.

Proposition 3.7 (Proposition 5.5). *Sous les mêmes hypothèses que le théorème 2.3.1, sous l'hypothèse que le SBM est assortatif, la condition sur les paramètres pour la convergence de la modularité avec une limite de résolution $\gamma > 0$ devient*

$$\theta_{in} > \max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\} \theta_{out} \quad (3.27)$$

En remarquant que $\max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\}$ est supérieur ou égal à 1, avec égalité si et seulement si $\gamma = 1$. On obtient donc un résultat étonnant : sous ce modèle, indépendamment des paramètres, la limite de résolution optimale est $\gamma = 1$. Cela peut paraître contre-intuitif lorsque l'on regarde l'exemple de l'anneau de cliques. Mais en fait cela vient de la nature asymptotique du résultat qui implique que la condition est toujours vérifiée.

Une autre manière d'influer sur les capacités de la méthode à être convergente pour retrouver les partitions est le choix du modèle nul. En effet, si l'on remplace le modèle de configuration par le modèle dit d'indétermination (Bertrand et al., 2022), alors pour un SBM à deux classes, la maximisation de la déviation à l'uniformité est convergent dès que la modularité l'est. C'est ce qu'exprime les propositions suivantes.

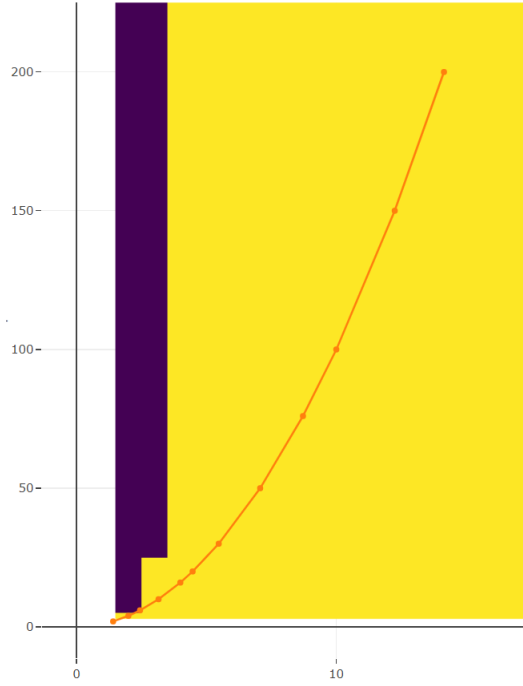


FIGURE 3.8 – Comparaison des zones où la modularité et la méthode AutoResMod ne sont pas capables de retrouver les cliques d’un graphe ayant pour structure un anneau de cliques avec en ordonnée le nombre de cliques, dans le graphe et en abscisse la taille des cliques. La modularité se trompe au-dessus de la ligne orange, AutoResMod, dans la zone violette.

TABLEAU 3.1 – Pourcentage (minimum et maximum) de nœuds mal classifiés pour différents critères sur 100 répliques Monte Carlo de SBM avec différents nombres n de nœuds pour la situation 1.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularité	40-50%	43-50%	45-50%	47-50 %	48-50%
Uniformité	13 – 34%	14-30%	16-27 %	17-27%	17-25%
Indetermination	23-50%	6 – 28%	1 – 6%	0 – 2%	0 – 1%

Proposition 3.8 (Proposition 5.11). *Sous les mêmes hypothèses que le corollaire 2.3.1 et sous les conditions*

$$\theta_{kk} > 2 \sum_{l'} \pi_{l'} \theta_{kl'} \text{ et } \theta_{kl} < \sum_{l'} \pi_{l'} (\theta_{ll'} + \theta_{kl'}) - \tilde{\theta}_0, \forall k \neq l \quad (\text{I})$$

alors la déviation à l’indétermination converge.

Cette dernière proposition permet de comparer les critères dans un cas simple.

Proposition 3.9 (Proposition 5.13). *Sous un SBM à deux classes, la condition pour la convergence de la déviation à l’indétermination I (proposition 3.8) ainsi que celles pour la modularité M et la déviation à l’uniformité U (c.f. corollaire 2.3.1) vérifient*

$$U \Rightarrow M \Rightarrow I \quad (3.28)$$

Pour illustrer la proposition 3.9, nous considérons 3 scénarii de SBM à 2 classes :

1. situation 1 $\theta_{11} = 0.8$, $\theta_{12} = 0.4$ et $\theta_{22} = 0.16$,
2. situation 2 $\theta_{11} = 0.8$, $\theta_{12} = 0.4$ et $\theta_{22} = 0.3$,
3. situation 3 $\theta_{11} = 0.8$, $\theta_{12} = 0.4$ et $\theta_{22} = 0.5$.

Ces cas de figures sont tels que dans la situation 1, seule la déviation à l’indétermination devrait converger. Dans la situation 2, seule la déviation à l’uniformité devrait être divergente et dans la situation 3, les trois critères devraient converger. Nous regardons alors sur des simulations, pour différents nombres de nœuds dans le graphe, le comportement des différents critères pour les trois situations. Les résultats sont résumés dans les tableaux 3.1, 3.2 et 3.3. On observe alors assez clairement que la déviation à l’indétermination est la seule méthode à fonctionner dans les trois situations, ce qui est conforme à notre résultat.

TABLEAU 3.2 – Pourcentage (minimum et maximum) de nœuds mal classifiés pour différents critères sur 100 répliques Monte Carlo de SBM avec différents nombres n de nœuds pour la situation 2.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularité	23-50%	5-35%	1-7%	0-2 %	0-1%
Uniformité	9-31%	10-24%	11-22%	13-21%	12-20%
Indetermination	1-33%	0-2%	0-1%	0%	0%

TABLEAU 3.3 – Pourcentage (minimum et maximum) de nœuds mal classifiés pour différents critères sur 100 répliques Monte Carlo de SBM avec différents nombres n de nœuds pour la situation 3.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularité	0-5%	0-1%	0%	0 %	0%
Uniformité	1-14%	1-5%	0-2%	0-1%	0%
Indetermination	0-2%	0%	0%	0%	0%

Changer de modèle nul n'est pas la seule manière de construire des critères semblables à la modularité. Une autre approche consiste à regarder d'autres vraisemblances de profils de modèles d'affiliation que celle du modèle avec des lois de Poisson. On considère ici un modèle nul $(m_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ quelconque. On appelle alors modularité généralisée, le critère gQ défini par

$$gQ(\theta_{\text{in}}, \theta_{\text{out}}, \mathbf{c}; (P_\psi)) = \sum_{ij} (\log P_{m_{ij}\theta_{\text{in}}}(W_{ij}) - \log P_{m_{ij}\theta_{\text{out}}}(W_{ij})) \delta_{c_i c_j} + \sum_{ij} \log P_{m_{ij}\theta_{\text{out}}}(W_{ij}) \quad . \quad (3.29)$$

Dans le cas où (P_ψ) est la famille des lois de Poisson, on peut alors écrire

$$gQ(\theta_{\text{in}}, \theta_{\text{out}}, \mathbf{c}; \text{Poisson}(\psi)) = BQ_\gamma(\mathbf{c}) + D$$

où B, γ, D sont indépendantes de $\mathbf{c}$.

Ainsi, en remplaçant la loi de Poisson par une autre famille de loi, on peut espérer construire des critères alternatifs à la vraisemblance.

En particulier, de cette formulation générale, nous dérivons deux critères alternatifs pour des modèles particuliers.

Le premier est issu d'un DCSBM d'affiliation tel que $W_{ij} | c_i, c_j \sim N(m_{ij}\theta_{c_i c_j}, \sigma^2)$, $\sigma > 0$. Il est donné pour une partition $\mathbf{c}$ par

$$\sum_{ij} (m_{ij}W_{ij} - \gamma m_{ij}^2) \delta_{c_i, c_j} \quad . \quad (3.30)$$

Le second est issu d'un DCSBM d'affiliation tel que $W_{ij} | c_i, c_j \sim \text{Pareto}(m_{ij}\theta_{c_i c_j}; x_m)$, de valeur minimale fixée x_m . Il est donné par

$$\sum_{ij} \left(m_{ij} \log \left(\frac{W_{ij}}{x_m} \right) - \gamma m_{ij}^2 \frac{2m}{n^2} \right) \delta_{c_i, c_j} \quad (3.31)$$

Afin d'optimiser ces critères, nous proposons de regarder une relaxation convexe du problème, comme cela a été fait par (Hollocou et al., 2019) dans le cadre de la modularité classique. Cette approche est décrite dans l'algorithme 3. Suivant le modèle choisi, trouver le maximum du critère pour une partition fixée peut ne pas être faisable simplement. Ainsi l'étape a) (ligne 3 de l'algorithme) peut être simplement remplacée par une étape de descente de gradient projetée, étape b) (ligne 4). Dans l'algorithme π représente la projection L_2 sur l'espace en indice.

Théorème 3.4 (Théorème 5.1). *Sous certaines conditions assurant la log-concavité du modèle $\theta \mapsto \mathbb{P}(W_{ii} | \theta)$ et la convexité de $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}^T \mathbf{W} \mathbf{x}$, alors la suite $(\mathbf{c}^T, \theta_{\text{in}}^T, \theta_{\text{out}}^T)_T$, donnée par l'algorithme 3 converge vers le maximum global du critère.*

Notre théorème 3.4 généralise notamment le travail de (Hollocou et al., 2019) sur la modularité où seulement une convergence vers un maximum local était démontrée.

Ce choix de relaxation convexe a l'avantage, dans le cas de la modularité, de coïncider avec l'algorithme de Louvain sous certaines conditions (Hollocou et al., 2019). Nous montrons dans le cas général de la vraisemblance profilée de modèle de Poisson, que cette relaxation correspond aussi à l'approximation variationnelle de la

Algorithme 3 Optimisation de la modularité généralisée

Entrée: $\mathbf{c}^0$, une partition initiale, T le nombre maximal d'itérations et deux pas de gradient $\eta > 0$ pour la partition et $\eta_p > 0$ pour les paramètres, Θ l'espace des paramètres,

1: **pour** $t = 0, \dots, T - 1$ **faire**

2: Faire une des deux étapes suivantes

3: a)

$$(\theta_{\text{in}}^{t+1}, \theta_{\text{out}}^{t+1}) \leftarrow \underset{\mathbf{a}, \mathbf{b}}{\operatorname{argmax}} gQ(\mathbf{c}^t, \mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (3.32)$$

4: b)

$$\begin{aligned} \theta_{\text{in}}^{t+1} &\leftarrow \pi_{\Theta}(\theta_{\text{in}}^t - \eta_p \nabla_{\theta_{\text{in}}} gQ(\mathbf{c}^t, \theta_{\text{in}}^t, \theta_{\text{out}}^t)), \\ \theta_{\text{out}}^{t+1} &\leftarrow \pi_{\Theta}(\theta_{\text{out}}^t - \eta_p \nabla_{\theta_{\text{out}}} gQ(\mathbf{c}^t, \theta_{\text{in}}^t, \theta_{\text{out}}^t)) \end{aligned} \quad (3.33)$$

5: $\tilde{\mathbf{c}}^0 \leftarrow \mathbf{c}$

6: **pour** $i = 1, \dots, n$ **faire**

7: $\tilde{\mathbf{c}}^i \leftarrow \tilde{\mathbf{c}}^{i-1}$ et

$$\tilde{\mathbf{c}}_{i \cdot}^i \leftarrow \pi_{\Delta}(\tilde{\mathbf{c}}_{i \cdot}^{i-1} - \eta \nabla_{\mathbf{c}_{i \cdot}} gQ(\theta_{\text{in}}^{t+1}, \theta_{\text{out}}^{t+1}, \tilde{\mathbf{c}}^{i-1})) \quad (3.34)$$

8: **fin pour**

9: Set $\mathbf{c} = \tilde{\mathbf{c}}^n$.

10: **fin pour**

11: **retourne** $\mathbf{c}^T$ la partition optimisée et $\theta_{\text{in}}^T, \theta_{\text{out}}^T$ les paramètres optimisés du modèle.

vraisemblance et qu'il y a égalité entre la vraisemblance et l'approximation variationnelle si les paramètres de la version relaxée appartiennent à l'ensemble $\{0, 1\}^{n \times K}$.

En pratique, rien ne garantit que ce soit le cas. Si l'on souhaite contraindre les poids à être dans $\{0, 1\}$, on peut ajouter un terme de pénalité l_2 au critère relaxé. En effet, ce terme de pénalité va agir comme une barrière qui va pousser les valeurs des $\mathbf{c}_i$ dans l'espace $\{0, 1\}^K$ pour peu que la pénalité ait assez de poids (c.f. Proposition 5.18). Dans ce cas-là, en utilisant le résultat de (Khamaru et Wainwright, 2018), nous montrons que l'algorithme 3 modifié pour inclure le terme de pénalité converge vers un maximum local.

La modularité et ses variantes présentent une méthode d'estimation rapide, utilisable sur de grands graphes. Cependant, pour espérer que ce genre de critères soit convergent, il est nécessaire que le modèle génératif du graphe satisfasse une condition qui n'est pas toujours vérifiée sur les données réelles. Ainsi, d'un point de vue pratique, la vraisemblance qui présente un compromis en terme de vitesse de calcul, entre la méthode utilisant les divergences et la modularité qui nécessite des conditions particulières, semble intéressante. Néanmoins, elle nécessite de choisir un modèle particulier pour les données. Nous regardons alors l'importance de ce choix pour l'estimation de la partition d'un graphe aléatoire par blocs.

3.3.2 Vraisemblance et mauvaises spécifications des poids

En pratique, sur un graphe, il est peu évident de savoir à l'avance quelle est la loi des arêtes. Ainsi, ce sont souvent les mêmes modèles qui sont appliqués pour les arêtes : Binomiale (pour des poids discrets à support fini), Poisson (cas discret) ou encore Gaussien. Souvent, bien que l'on ne sache pas vraiment si ces modèles sont adaptés, on observe des résultats intéressants au sens où la maximisation de la "vraisemblance" est capable de retrouver la structure de blocs des données.

Un exemple de ce genre de mauvaise spécification est l'utilisation de la vraisemblance du modèle de Poisson pour des poids de Bernoulli (Zhao et al., 2012). Bien que cela soit justifié par le fait que les deux modèles sont proches si les graphes sont parcimonieux, une question intéressante est de savoir si cela s'applique aussi à d'autres distributions.

Ainsi, nous proposons d'étudier une généralisation du modèle DCSBM que nous appelons simplement *generalized Block Model* (gBM). C'est une classe de modèles définie telle que conditionnellement à la partition, les lois des arêtes ne sont pas données explicitement, mais seulement une contrainte sur les moyennes est donnée. Mathématiquement, il se définit de la manière suivante.

Définition 3.2 (gBM). Etant donnés les paramètres suivants :

- $n \in \mathbb{N}^*$ le nombre de nœuds,
- $K \in \mathbb{N}^*$ le nombre de classes,
- $M \in \mathbb{N}^*$ le nombre de valeurs possibles des facteurs correctifs des degrés,
- Π une loi de probabilité sur $\{1, \dots, K\} \times \mathcal{X}$, où $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^M$,
- θ une matrice de paramètres de taille $K \times K$.

- $(\rho_n)_n \in (0, 1]$.

On dit que $\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W}$ suit un **gBM** de paramètres n, Π, θ et on note

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{gBM}(n, \Pi, \theta) \quad (3.35)$$

si $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_n)$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ et $\mathbf{W} = (W_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ ont la même loi que le procédé :

$$(c_i, x_i) \stackrel{iid}{\sim} \Pi \quad (3.36)$$

et

$$E[W_{ij} | \mathbf{c}, \mathbf{x}] = x_i x_j \theta_{c_i, c_j}, \quad W_{ij} = W_{ji} \quad (3.37)$$

Dans un autre genre, il est possible de considérer une matrice de corrélation comme un graphe aléatoire. Lorsque l'on applique alors la vraisemblance d'un SBM de loi gaussienne, sur une telle matrice, nous avons observé en pratique de bons résultats, au sens où l'on obtient bien des groupes homogènes, alors même que l'hypothèse d'indépendance conditionnelle des poids du graphe dans un SBM n'est pas vérifiée.

Ainsi, nous nous sommes intéressé à mieux comprendre les propriétés théoriques de ces critères. En partant de la démonstration de la convergence de la vraisemblance du modèle de Poisson pour un graphe de lois de Bernoulli faite par (Zhao et al., 2012), nous nous sommes aperçu que le critère dépend en fait uniquement des moyennes dans les blocs et que la convergence du critère repose essentiellement sur l'inégalité de concentration de Bernstein. Or, cette inégalité est vérifiée pour des variables bien différentes de la loi de Bernoulli. C'est par exemple le cas pour la loi Gamma. Ainsi, nous arrivons à expliquer la robustesse de la vraisemblance de la loi de Poisson à de nombreuses mauvaises spécifications du modèle. De plus, en utilisant des inégalités de concentrations particulières, nous généralisons le résultat de (Zhao et al., 2012) en autorisant le nombre de blocs à croître avec le nombre de nœuds n du graphe. Ces résultats sont synthétisés dans le théorème 3.5.

Théorème 3.5 (Théorème 5.4). *Le théorème 2.3 de (Zhao et al., 2012) sur la convergence d'un critère Q reste vrai si l'on remplace les conditions*

- $\mathbf{c}^*, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (\text{Bernoulli}(\theta)), \theta^*)$ où Π est constante en n ,
- F_K est Lipschitz,
- $\min_{kl} \frac{n\theta_{kl}}{\log(n)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} +\infty$

par

- $\mathbf{c}^*, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{gBM}(n, \Pi, \rho_n \theta^*)$ avec Π pouvant dépendre de n , $\rho_n \in (0, 1]$,
- les distributions des poids de $\mathbf{W}$ sont des distributions sous-Gamma avec facteur de variance $\rho_n v^2$, $v \neq 0$,
- $\max_{a,b} |\theta_{ab}^*|$ est borné,
- F_K une fonction L_K -Lipschitz¹
- $\frac{\rho_n n^2}{L_K^2 \max(n \log(n), K^2)} \rightarrow \infty$ et
- $\frac{n}{KM_n L_K^2} \rightarrow \infty$ lorsque $n \rightarrow \infty$.

Remarque 3.6. En particulier, le nombre de classe K n'est plus fixé contrairement au théorème de (Zhao et al., 2012).

Les conditions sur le maximum restent les mêmes que celles énoncées par (Zhao et al., 2012). En particulier, si les poids du graphe sont positifs, ces conditions sont notamment vérifiées par la vraisemblance d'un DCSBM de loi de Poisson. Plus généralement, nous démontrons qu'elles sont aussi vérifiées par la vraisemblance d'un DCSBM gaussien et par le critère des K-moyennes pour un modèle SBM.

Enfin, nous démontrons dans le cas des matrices de covariance et de corrélation basées sur le τ de Kendall, que le théorème 3.5 s'y généralise.

Théorème 3.6 (Théorème 5.6). *Soit $\mathbf{X} = (\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(n)})$ un échantillon de n vecteurs aléatoires i.i.d. de dimension d_n dont on note $\mathbf{R}$ la matrice de corrélation. Soient Q_n une suite de critères et F_{K_n} une suite de fonctions telles que*

$$Q_n(\mathbf{c}; \hat{\Sigma}) = F_{K_n} \left(\frac{\mathbf{c} \hat{\Sigma}}{d^2}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{d} \right)_k \right)$$

où $\hat{\Sigma}$ est un estimateur sans biais de Σ de sorte qu'il existe $\ell > 0$, telle que pour tout $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} > \epsilon \right) \leq d_n^2 e^{-\ell n \epsilon^2} \quad (3.38)$$

Sous les hypothèses

1. F est Lipschitz au sens $|F(\mathbf{A}, \mathbf{a}) - F(\mathbf{B}, \mathbf{b})| \leq L_K \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{\ell_1} + L_K \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_1$.

TABLEAU 3.4 – Classement des différents types de méthodes étudiées pour différents critères (1 pour le meilleur, 4 pour le moins bon).

	Modularité	Maximum de Vraisemblance	K-moyennes	BPDC
Vitesse de calcul	1	3	1	4
Restriction de convergence	4	1	1	1
Robustesse	4	2	2	1

- il existe une matrice $\theta^* \in \mathbb{R}^{K_n \times K_n}$, $\mathbf{c}^* \in \{1, \dots, K_n\}^{d_n}$ telle que $\Sigma_{ij} = \theta_{c_i^*, c_j^*}^*$, for $1 \leq i, j \leq d_n$,
- les fonctions F_{K_n} sont L_{K_n} -Lipschitz² et vérifient (**),
- la suite (d_n) est croissante en n et telle que $\frac{d_n}{K_n} \rightarrow \infty$ et $d_n = o(\log(n))$,

on a que pour tout $\epsilon > 0$, et tout $\hat{\mathbf{c}} \in \argmax_{\mathbf{c}} Q_n(\mathbf{c}; \hat{\Sigma})$,

$$\mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \epsilon \right) \rightarrow 0 \quad .$$

En conclusion, on peut écrire un comparatif entre les méthodes étudiées en fonction de trois critères :

1. la vitesse de calcul des estimateurs, i.e. est-il possible d'estimer une classification d'un graphe avec plusieurs centaines de nœuds en quelques minutes ?
2. les restrictions sur les hypothèses de convergence des estimateurs, i.e. doit-on faire des hypothèses sur le modèle SBM pour que la méthode d'estimation soit asymptotiquement convergente ?
3. les propriétés de robustesse, i.e. en présence de valeurs aberrantes ou dans le cas où le modèle ne correspond pas à un SBM, que peut-on espérer de nos estimateurs ?

Dès lors, le choix de la méthode dépend des données à l'étude et des besoins en vitesse de calcul et robustesse. On peut faire le tableau récapitulatif 3.4.

Si l'on cherche une approche intermédiaire entre la pertinence de l'estimation et le temps de calcul pour l'objectif de trouver des blocs dans le graphe, la méthode des K-moyennes peut alors être considérée comme un bon compromis.

3.4 Estimation de la capabilité multivariée

La capabilité multivariée est un concept important de MSP, car elle est nécessaire pour prendre en compte les dépendances entre certaines caractéristiques produites ou encore lors du calcul de la conformité pour un critère complexe, comme le maximum de matière (ISO, 2021b).

Cependant, la littérature sur le sujet est aujourd'hui très limitée. D'une part, sa définition est souvent faite à l'aide d'un ratio entre l'aire d'une version modifiée du domaine de spécification et l'aire d'un quantile multivariée de la distribution des données (c.f. (González et Sánchez, 2009)). Cet indicateur permet alors de savoir si la méthode est au niveau attendu ou non, mais elle ne permet pas réellement de juger à quel point la distribution des données est proche du niveau acceptable ou non.

Ainsi, nous proposons à la place (c.f. Section 6.1.4), un indicateur de capabilité multivariée qui est basée sur la probabilité de conformité comme dans le cas univarié. De tels indices ont déjà été proposés dans la littérature, comme celui de (de-Felipe et Benedito, 2017), mais ils ne coïncident pas dans le cas $d = 1$ avec les indicateurs de capabilité couramment utilisés. De plus, leurs méthodes d'estimation se concentrent majoritairement sur le cas où les variables sont normalement distribuées. Un des rares travaux qui ne nécessite pas l'hypothèse de normalité est celui de (Polansky, 2001) qui considère un estimateur à noyau pour la distribution des données. Cependant, en grande dimension, cet estimateur n'est pas très performant. Ainsi, nous proposons d'utiliser des modèles de copules arborescentes avec des copules bivariées appartenant à des modèles paramétriques.

Nous illustrons en section 6.1.5, sur des simulations pour différents modèles de copules et différents nombres d'observations et dimensions, l'intérêt de ce genre de modèles pour estimer la capabilité multivariée.

Une difficulté liée à l'utilisation de ces modèles est que, bien que leur densité soit connue sous forme fermée, ce n'est pas le cas de leur fonction de répartition. Pour évaluer les probabilités de conformité, il faut alors passer par une étape de simulation. Cette étape fait appel à des fonctions de répartitions conditionnelles et leurs inverses qui ne sont pas toujours connues sous forme fermées. Il est donc nécessaire d'avoir recours à des méthodes d'approximation. Nous montrons alors, que si l'estimateur de la densité est convergent, l'estimateur Monte Carlo associé est lui aussi convergent malgré ces possibles erreurs d'approximation (c.f. Théorème 6.1).

2. F sont Lipschitz au sens où $|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_{K_n} (\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\ell_1} + \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_1)$.

Enfin, cette étape de simulation pouvant être longue en temps de calcul, en particulier en grande dimension, nous proposons une borne inférieure pour notre indicateur de capacité (c.f. Théorème 6.4).

Cette borne repose sur une réécriture de l'inégalité de (Dohmen, 2002), en utilisant la structure particulière des vignes et leur lien avec les graphes cordaux (Kovacs et Szantai, 2012).

Cette approche permet un compromis entre temps de calcul et précision d'estimation.

Nous appliquons ces méthodes sur les données de l'aube Fan pour comparer les productions entre les deux usines. On peut alors observer que pour les limites de spécification choisies, il n'y a pas de différence au niveau pièces entre les deux usines sur la période de temps sélectionnée.

3.4.1 Estimation d'une copule arborescente

Une limitation de la modélisation avec des copules arborescentes simplifiées, est qu'il est possible qu'elles n'approximent pas correctement les données pour la distance en variation totale. Cependant, pour la distance infinie entre les copules, (Mroz et al., 2021) ont montré qu'il existait une copule arborescente simplifiée aussi proche que l'on souhaite de la copule d'intérêt.

Ce résultat a plusieurs applications, notamment en MSP, où nous avons montré pour l'estimation de la capacité multivariée avec notre indicateur ou encore pour la construction de cartes de contrôles avec la méthode de (Verdier, 2013), que l'utilisation de copules arborescentes simplifiées offre un degré de précision suffisant (c.f. Section 6.2.3).

Le problème est qu'en pratique, à notre connaissance, il n'existe aucune méthode permettant d'estimer cette copule en dehors de l'approximation de la copule empirique proposée par (Mroz et al., 2021). Mais cette dernière hérite des mauvaises propriétés de la fonction de répartition empirique pour estimer de grandes probabilités.

Ainsi, notre objectif est de développer une méthode d'estimation de copule arborescente permettant d'approximer n'importe quelle copule. Pour cela, nous considérons comme modèle paramétrique de copules, le modèle de mélange proposé par (Khaled et Kohn, 2023) qui est dense dans l'espace des copules bivariées.

Cela nous permet d'avoir une famille de copules arborescentes paramétriques dense dans l'espace des copules.

Pour l'estimation des paramètres, nous proposons d'utiliser la méthode de (Weiß, 2011), qui consiste à minimiser l'écart entre la loi des données après transformation de Rosenblatt associée à la copule arborescente et la loi uniforme. Dans le cadre des copules arborescentes, nous montrons que le calcul de la transformation de Rosenblatt proposé par (Schepsmeier, 2015) peut être modifié pour s'écrire simplement de manière séquentielle en fonction des arbres de la vigne. Cela nous permet de réécrire la transformation de Rosenblatt comme un réseau de neurones (c.f. Théorème 6.5.1) et d'utiliser des outils de différentiation automatique et donc de calculer rapidement l'estimateur des paramètres.

3.5 Optimisation des contrôles en production

Les méthodes d'optimisation des contrôles appliquées aujourd'hui chez SAE en se basant sur une étude statistique des données, sont limitées ou non optimales.

En particulier, l'approche basée sur la corrélation entre les variables requiert l'intervention d'un expert statisticien et/ou d'un expert métier pour choisir les variables les plus pertinentes à mesurer et celles que l'on peut échantillonner. Cependant, l'approche décrite dans les procédures consiste seulement à regarder les corrélations entre les variables. Or, nous nous sommes aperçus que le gain de temps dépend aussi des taux de conformité des caractéristiques de manière individuelle et pas seulement de leur structure de dépendance.

Nous avons vu à la section 3.1.4 que le problème d'optimisation des contrôles peut s'écrire comme

$$\text{minimiser}_{S \subset \{1, \dots, d\}} p(S) (T(\{1, \dots, d\}) - T(S)) \quad (3.39)$$

Le problème ainsi énoncé est NP-difficile, car il nécessite d'optimiser sur les sous-ensembles d'un espace discret à d éléments. De plus, la probabilité $p(S)$ est-elle même très complexe. Ainsi, nous proposons une formulation approximative du problème qui puisse être optimisée par descente de gradient projetée.

Afin de calculer $p(S)$, on fait les mêmes hypothèses que dans la méthode utilisée actuellement par SAE. C'est-à-dire que l'on recherche non pas un contrôle sur l'erreur quadratique, mais sur la probabilité de se tromper sur la conformité réelle de la pièce. Ainsi, on suppose que les caractéristiques sont normalement distribuées. Dans ce cas, pour faire de la prédiction, on utilise la méthode de régression linéaire et on utilise les intervalles de prédiction pour décider de la conformité de la caractéristique. Pour une caractéristique y que l'on cherche à prédire à partir d'un vecteur d'observations, on regardera donc si $L_y \leq c_{\alpha/2}^y(\mathbf{x})$ et $U_y \geq c_{1-\alpha/2}^y(\mathbf{x})$ où $u_{\alpha/2}$ et $u_{1-\alpha/2}$ sont les valeurs de l'intervalle de prédiction de niveau $\alpha/2$ et $1 - \alpha/2$. Et on veut maximiser $\mathbb{P}(L_y \leq c_{\alpha/2}^y(\mathbf{x}) \cap U_y \geq c_{1-\alpha/2}^y(\mathbf{x}))$.

On peut donc écrire la probabilité de conformité pour un ensemble de mesures S comme

$$p(S) = \mathbb{P} \left(\bigcap_{j \in S} \{L_j \leq X_j \leq U_j\} \cap \bigcap_{j \notin S} \{L_j \leq c_{\alpha/2}^j(\mathbf{X}_S)\} \cap \{c_{1-\alpha/2}^j(\mathbf{X}_S) \leq U_j\} \right) \quad (3.40)$$

D'un point de vue pratique, ce critère est très complexe à manipuler. Ainsi, nous proposons une approximation dans le cas gaussien de ce critère. L'idée de cette approximation est d'utiliser le fait que les variables sont fortement dépendantes entre elles et gaussiennes pour approximer cette probabilité par le minimum des probabilités de conformité individuelles et de les écrire en fonction de la capabilité pour qu'elles puissent s'écrire uniquement en fonction de la variance et de la moyenne de la prédiction. On obtient alors la formule

$$p(S) \approx \Phi \left(3 \min_{1 \leq j \leq d} Cpk^j(S) \right) \quad (3.41)$$

où

$$Cpk^j(S) = \frac{\min\{U^j, -L^j\} - q_{1-\alpha/2} \hat{\sigma}(\beta_j) \sqrt{1 + \frac{K(n+1)}{n(n+1-d)}}}{3 \sqrt{\beta_j \hat{\Sigma} \beta_j^T + v_{2,j}}} \quad (3.42)$$

où les β_j représente les paramètres pour la prédiction de la conformité de la caractéristique j et $v_{2,j}$ est une fonction des données et de β_j . Les calculs sont détaillés en section 7.2.3.

Si la caractéristique est mesurée et non prédite alors on retrouve la valeur du Cpk gaussien de la caractéristique j .

Maintenant, nous allons remplacer l'optimisation discrète. Pour cela, on peut observer que si l'on note β les coefficients de régression utilisés pour la prédiction, alors S correspond au support du vecteur $(\|\beta_i\|_1)$. On peut donc remplacer l'optimisation sur S par une optimisation sur β d'une fonction du support de β . Cependant, optimiser une fonction du support est complexe. Nous proposons alors de découper le problème en deux, i.e. $\beta = \hat{\beta} \mathbf{R}^T$, où $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{d \times k}$ représente le support de β (que l'on considère avoir k éléments) et $\hat{\beta}$ représente les paramètres de régression. Alors, en utilisant qu'une manière de parcourir toutes les possibilités de sous-ensembles à k éléments est de considérer une matrice de permutation $\mathbf{M}$ sur $\{1, \dots, d\}$ et la matrice $\mathbf{P} \in \{0, 1\}^{d \times k}$ telle que $P_{ij} = 1$ si $i = j$, 0 sinon ; le problème revient à parcourir l'ensemble des matrices de permutations pour $k = 1, \dots, d$. Cependant, la complexité du problème reste la même. Alors, nous proposons une relaxation du problème en remplaçant le fait que $\mathbf{M}$ soit une matrice de permutation par le fait que $\mathbf{M}_{:,j} \in \Delta$ et en ajoutant une pénalité $l_1 - l_2$:

$$\|\mathbf{M}\|_{l_1-l_2} = \sum_i \|\mathbf{M}_{:,i}\|_1 - \|\mathbf{M}_{:,i}\|_2 + \sum_j \|\mathbf{M}_{:,j}\|_1 - \|\mathbf{M}_{:,j}\|_2 \quad (3.43)$$

Ce terme de pénalité avec les contraintes sur les colonnes de $\mathbf{M}$ est toujours positif et est nul si et seulement si $\mathbf{M}$ est une matrice de permutation.

Cela permet de modéliser le problème comme

$$\operatorname{argmin}_{\beta, \mathbf{M} : \mathbf{M}_{:,j} \in \Delta} p(\beta \mathbf{M} \mathbf{P})(T(\{1, \dots, d\}) - T(\mathbf{M} \mathbf{P})) + \lambda \|\mathbf{M}\|_{l_1-l_2} \quad (3.44)$$

où $\lambda > 0$.

En utilisant un λ assez grand, cette méthode permet d'avoir $\mathbf{M}$ très proche d'une matrice de permutation et donc, on peut optimiser le temps de mesure par descente de (sous)-gradient.

Pour le temps de mesure $T(S)$ en reprenant l'équation 3.13, il suffit de considérer $\mathbf{P}_S$ comme $\mathbf{M} \mathbf{P}$.

De plus le maximum étant une fonction non différentiable, nous proposons de le remplacer par l'opérateur de Boltzmann BO défini par

$$BO(\{x_1, \dots, x_n\}) = \frac{\sum_{i=1}^n x_i e^{\alpha x_i}}{\sum_{i=1}^n e^{\alpha x_i}} \approx \max\{x_1, \dots, x_n\} \quad (3.45)$$

où $\alpha > 0$.

En conclusion, le problème que l'on optimise est

$$\operatorname{argmin}_{\beta, \mathbf{M} : \mathbf{M}_{:,j} \in \Delta} p(\beta \mathbf{M} \mathbf{P}) \left[T(\{1, \dots, d\}) - \sum_{m=1}^M t_m BO((\mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{P})_m) \right] + \lambda \|\mathbf{M}\|_{l_1-l_2} \quad (3.46)$$

où $\lambda > 0$.

Deuxième partie

Travaux Effectués

Divergence and Classification

4.1 Divergence in Discrete Graphs

4.1.1 Introduction

Since a few years, there has been lot of interest to model data with random graphs. One of the most popular model is the stochastic block model (SBM). This model is used in various fields such as social network, biology, see for example (Girvan and Newman, 2002; Newman, 2006). Because of its many applications, inference under this model has been studied by many. Only recently, there is interest in the question of whether or not the data really comes from an SBM. (Cai and X. Li, 2015) proposed a model robust to the presence of "outliers" nodes, that is nodes that does not belong to the block structure of the model. (Makarychev et al., 2016), show some robustness properties of the classification in presence of outliers node and misspecification in the distribution of the SBM model.

Still most of literature is based on maximum likelihood estimators. However, it is well know that while this estimation method does very well under the model, in case of misspecifications (for example in presence of outliers), this method can produce a highly biased estimator of the true parameter of interest.

To solve this problem, we offer to use estimation based on divergences. Indeed they are known to be robust to misspecification (see for example (Donoho and R. C. Liu, 1988)). We study from a theoretical point of view the convergence properties of the estimators based on our criteria, In addition, we provide simulations to show the gain in robustness by using divergence instead of likelihood.

4.1.2 Statement of the Problem

Before looking at the definition of the weighted stochastic block model, we define the following weighted random graph generation approach. Assume that we have n nodes with a partition c in K classes and a family of distributions $(P_{k,l})_{1 \leq k,l \leq K}$. Then we can generate a random graph by assigning at random a weight W_{ij} to the edge between two nodes : For $1 \leq i \leq j \leq n$, sample independently $W_{ij} \sim P_{c_i, c_j}$, and $W_{ji} = W_{ij}$.

Now we can define the weighted stochastic block model. It is simply the previous block model but we consider that the partition of the graph is itself random.

Therefore, the weighted stochastic block model with K groups is generated in the following way. Let n be the number of nodes in the network, π a probability distribution on $\{1, \dots, K\}$ and $(P_{k,l})_{1 \leq k,l \leq K}$ be a collection of $K(K+1)/2$ distributions.

1. For $1 \leq i \leq n$, sample the class c_i of node i , *iid* with distribution such that $\mathbb{P}(c_i^* = k) = \pi_k$.
2. For $1 \leq i \leq j \leq n$, sample independently $W_{ij} \sim P_{c_i^* c_j^*}$, and $W_{ji} = W_{ij}$.

That means that the distribution of weights W_{ij} depends only on the block of node i and the block of node j .

Remark 4.1. In the literature, it is common to allow K to grow as n grows. Nevertheless, with the model described above it is not clear how to deal with this setting. So another way to see the stochastic block model is to see it as an infinite mixture model instead of a generative SBM (see (P. J. Bickel and A. Chen, 2009a) for more details).

In our formulation, we make no assumptions on the number of communities K . The value can dependent on n .

Remark 4.2. Here all the distances or differences between partitions are considered for the equivalence class and not only the partition itself. For example, we consider the partition $c = ((1, 2), (3, 4))$, i.e. $c_1 = c_2 = 1$ and $c_3 = c_4 = 2$. We consider that it is equal to the partition $c' = ((3, 4), (1, 2))$, i.e. $c'_1 = c'_2 = 2$ and $c'_3 = c'_4 = 1$.

We can then define a measure of distance between two partitions c and c' :

$$|c - c'| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(c_i \neq c'_i)$$

Now we consider the case where the distributions of the weights belong to a set of parametric distributions, $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$, i.e $P_{kl} = P_{\theta_{kl}}$, $1 \leq k, l \leq K$. We assume that the distributions are all discrete and take T values. Without loss of generality, we can assume that their support is $\{1, \dots, T\}$.

Remark 4.3. *The classical SBM corresponds to the case where $(P_\theta)_\theta = \text{Bernoulli}(\theta)_{\theta \in [0,1]}$.*

When dealing with those random graphs there are two main tasks. The first one is to recover the partition c and the second is to estimate the parameters $(\theta)_{kl}$. To do this a classical way is to maximize the (log) likelihood (Choi et al., 2012), defined by:

$$\frac{n(n-1)}{2} \ell(c, \theta) = \sum_{i \leq j} \log(P_{\theta_{ij}}(W_{ij})) \quad (4.1)$$

This can be rewritten in order to split each block of the model:

$$\begin{aligned} \frac{n(n-1)}{2} \ell(c, \theta) &= \sum_{i \leq j} \log(P_{\theta_{ij}}(W_{ij})) \\ &= \sum_{k \leq l} n_{kl}(c) \ell((W_{i,j})_{c_i=k, c_j=l}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

with $n_{kl}(c) = n_k(c)n_l(c)$ and $n_{kk}(c) = \frac{n_k(c)(n_k(c)+1)}{2}$, $n_k(c)$ the number of nodes in the group k .

This approach depends on the fact that the distribution of the real data belongs to the model. In real life, it is not unlikely for the distribution to be different. For example, there may be outliers, or some error when collecting the data. And in this case, the likelihood estimator does not converge to the true value of the parameter anymore (see for example (Huber, 1972) in the case of outliers in distribution). Therefore, it is important to look for procedures that are robust to small deviations from the model.

From equation (4.2), we see that the likelihood of the model can be rewritten in terms of the likelihood of each block. Therefore, an idea may be to replace the likelihood in each block by a more suitable criterion in order to be more robust to misspecifications.

One way to produce robust estimators is the ϕ -divergence estimation (Donoho and R. C. Liu, 1988; Basu and Lindsay, 1994).

Definition 4.1 (ϕ -divergence). A ϕ -divergence (in the sense of (Csiszár, 1967)) is defined through a function φ , that is a convex proper closed function such that $\varphi(1) = 0$. Then the ϕ divergence between two distributions P and Q , absolutely continuous with respect to a same measure λ , is given by

$$D_\varphi(P, Q) = \int \varphi\left(\frac{dP}{dQ}\right) dQ \quad .$$

In particular, for two distributions p, q , with support $\{1, \dots, T\}$ the φ -divergence is defined by

$$D_\varphi(P, Q) = \sum_{t=1}^T q(t) \varphi\left(\frac{p(t)}{q(t)}\right) \quad . \quad (4.3)$$

Remark 4.4. *This class of differences between distributions contains lot of classical ones, for example Kullback-Leibler (KL), L1, Hellinger, Chi2.*

So going back to the likelihood of the model which is a sum of likelihood by block, a quite natural approach to use divergences in the estimation would be to replace the likelihood by a divergence such as Kullback-Leibler (between the empirical distribution and the parametric distribution) because the two criteria are equivalent in classical parameter estimation (not here). Moreover, more generally, we propose to replace the likelihood in each block by a divergence. Then we propose the following criterion

$$\hat{Q}(c, \theta) = \hat{Q}_\varphi(c, \theta) = \sum_{k \leq l} r_{kl} D_\varphi(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (4.4)$$

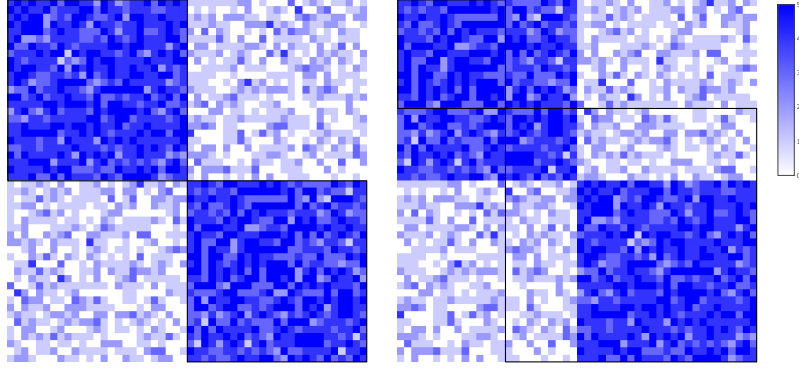


Figure 4.1 – Example of weights of a realisation of a SBM with two blocks, that is the matrix of $(W_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$, where $P_{kk} \sim B(5, 0.8)$ and $P_{k,l} \sim B(5, 0.2)$, $k \neq l$. On the left the true partition c^* of the model is highlighted. On the right another partition c of the nodes is proposed.

with $P_n^{(k,l)}(t) = P_n^{(k,l)}(c; t) = \frac{1}{n_{kl}(c)} \sum_{i \in c_k, j \in c_l} I(W_{ij} = t)$, is an estimator of the distribution in the block k, l , and $r_{kl} = r_{kl}(c) = \frac{2n_{kl}(c)}{n(n+1)}$.

It corresponds to a weighted sum for each block of the partition c of the divergence between the empirical distribution of the weights in the block and the parametric distribution with model $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$. The weight of each terms is the proportion of edges in the block with respect to the total number of edges in the graph.

Before showing the properties of this criterion, we first give some intuition about it. We expect it to work well to estimate the classification if we assume that any mixture of our model is not part of the model. Graphically, assume that the data comes from a two classes SBM. If we compute the criteria for some partition c which is different from the true one c^* , then there is at least a distribution of one block which is not part of our model. So in figure 4.1, if we look at the partition c , we observe that in the lower right block, there is a mixture between the different distributions of the model. Then the value of the associated divergence will be large, while if the partition is closed to the true one, the divergences will be closed to 0.

4.1.3 Results

Now we can state our results on the properties of our estimator.

We denote by $P^{(k,l)}(e)$ the expectation distribution on $\{1, \dots, T\}$ such that

$$P^{(k,l)}(c; t) = E[P_n^{(k,l)}(c; t) | c] \quad . \quad (4.5)$$

It represents the distribution in the block k, l of the partition c if the true distribution of each weights were known.

We write $P^{(k,l)}(t)$ (resp $E[P_n^{(k,l)}(t)]$) instead of $P^{(k,l)}(c; t)$ (resp $E[P_n^{(k,l)}(c; t)]$) when there is no possible confusion on the partition c .

Moreover, we denote by

$$\bar{Q}(c, \theta) = \sum_{k \leq l} r_{kl}(c) D_\varphi(P^{(k,l)}(c), P_{\theta_{k,l}}) \quad . \quad (4.6)$$

We write $\hat{Q}(c)$ (resp $\bar{Q}(c)$), for $\inf_{\theta} Q(c, \theta)$ (resp $\inf_{\theta} \bar{Q}(c, \theta)$).

We formulate the following hypotheses:

- (H.1) The function $\bar{Q}(c)$ has an unique maximum in c^* .
- (H.2) $\min_k n_k(c) = O(\frac{n}{K})$, where K is the number of communities.
- (H.3) The function φ is continuous on $[0, 1]$.
- (H.4) $\min(\frac{n}{K^2 \log(K) T^2}, \frac{n^2}{K^2 T^2 \log(T)}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} +\infty$.
- (H.5) $\|P^{(k,l)}(c) - P^{(k,l)}(c^*)\| = 0$ implies that $c = c^*$.

Theorem 4.1 (Consistency of the partitioning). *Assume that the graph is generated from a weighted stochastic block model with K classes, such that the distribution in each block k, l is denoted by $P_{k,l}$. Under assumptions H.1-H.5, let $\hat{c}$ be $\argmin_c \hat{Q}(c)$. Then for all $\eta > 0$,*

$$\mathbb{P}(|\hat{c} - c^*| > \eta) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (4.7)$$

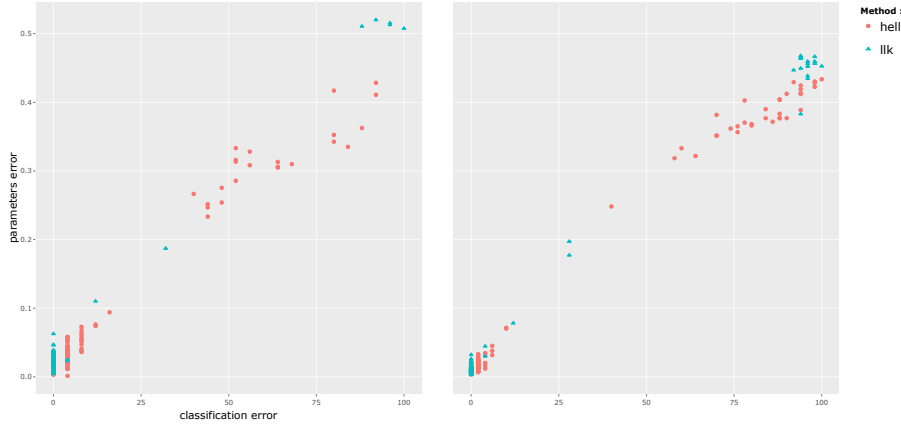


Figure 4.2 – Plot of L_1 error of parameters estimation (y-axis) with respect to the percentage of error of classification (x-axis) for $n = 50, 100$ (from left to right) for an SBM with fixed number of groups

Remark 4.5. $H.1$ and $H.5$ are used in order to show that minimizing the criterion allows us to recover the true partition. $H.2$ and $H.4$ ensure that in each block, we can evaluate accurately the divergence and $H.3$ is a regularity assumption used for the consistency of divergence estimation.

We also demonstrate the consistency of the parameters estimates.

Theorem 4.2 (Consistency of the parameters). Let $\hat{\theta}_{kl} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta})$, and denote $\theta_{k,l}^T = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta})$. If for any $\epsilon > 0$, $\min_{\{\theta: |\theta - \theta^T| > \epsilon\}} D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta}) > D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta^T})$, then under the hypotheses of the previous theorem, we have that

$$\hat{\theta}_{kl} \xrightarrow{\mathbb{P}} \theta_{kl}^T. \quad (4.8)$$

Proposition 4.1. Since we consider the case of discrete distribution with finite support, hypothesis $H5$ is always verified.

4.1.4 Simulations

Since optimizing over all partitions is impossible in practice, we use some heuristic method in order to explore some part of the partitions.

According to the comparison of (Funke and Becker, 2019), one of the simplest way to do it is Metropolis Hasting approach. The idea is the following: first we select an initial partition $c^{(0)}$, a number of iterations M and a temperature parameter β . Then we iterate from 1 to M and at each step we select at random one of the n nodes in the graph and change its class again at random. We obtain a new partition $c^{(i)}$. And with probability $1 - \exp(-\beta(\hat{Q}(c^{(i)}) - Q(c^{(i-1)})))$, we undo the change, i.e. $c^{(i)} = c^{(i-1)}$, and we proceed to the next iteration.

For sake of simplicity, we only compare the likelihood to our proposed method with $\gamma = 0.5$. Indeed taking another value of $\gamma < 1$ gives the same kind of results.

We compare the partition and the estimation of the parameters between the log likelihood and our approach with different parameters γ .

First, we consider a planted graph with 2 groups. We assume $\mathbb{P}(c_i^* = 1) = 0.5$ and $A_{ij} \sim \text{Binomial}(10, \theta_{c_i^*, c_j^*})$ where $\theta_{kl} = 0.8I(k = l) + 0.6I(k \neq l)$. We run 100 replications of a simulation under this model and we report the result of the simulation in figure 4.2. In this figure, we show for the different values of the number of nodes, the percentage of missclassified nodes in x-axis and in the y-axis, the L1-norm of the parameters error $\|\hat{\theta} - \theta\|_1$. The orange correspond to the estimation based on our method, the blue is based on the likelihood.

In both cases, we see that in term of error of classification and the error of estimation are quite similar (even of the likelihood performs a bit better). This is not surprising since under the model we expected the likelihood and the Hellinger to be equivalent (Beran, 1977). So any of the two methods seems adapted in order to estimate the partition and the parameters under a well specified parametric SBM. Since this is a simple example, it is easy to estimate the partition and the method produce results close or equal to the true partition even for small number of nodes. In addition looking at the scale of y-axis, we can see that the estimation precision for our parameter increases.

Now, we study the effect of misspecification on the result of estimation. Here we consider a binomial SBM with two groups. We set $\mathbb{P}(c_i = 1) = 0.5$ and A_{ij} is drawn from a $\text{Binomial}(10, \theta_{c_i, c_j})$ with probability 0.5 and is equal to 0 otherwise, where $\theta_{kl} = 0.8I(k = l) + 0.6I(k \neq l)$. Then we sample 50 graphs for $n = 50, 100, 250$ and run our algorithm on it. The results are presented in figure 4.3.

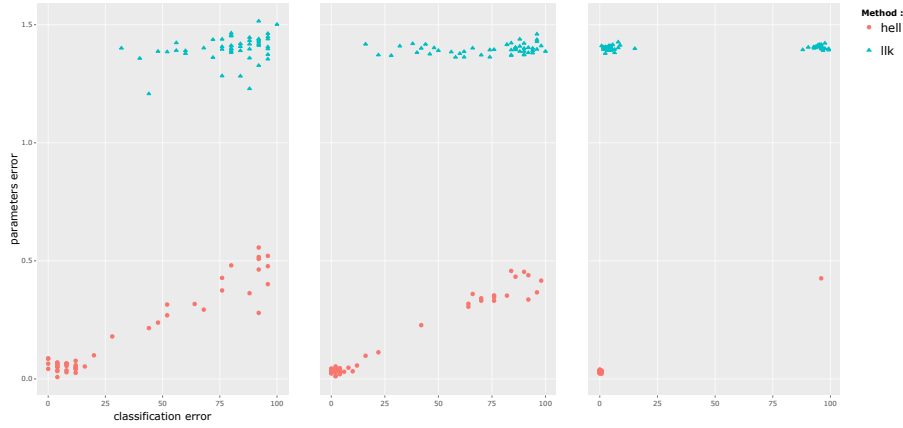


Figure 4.3 – Plot of L_1 error of parameters estimation (y-axis) with respect to the pourcentage of error of classification (x-axis) for $n = 50, 100, 250$ (from left to right)

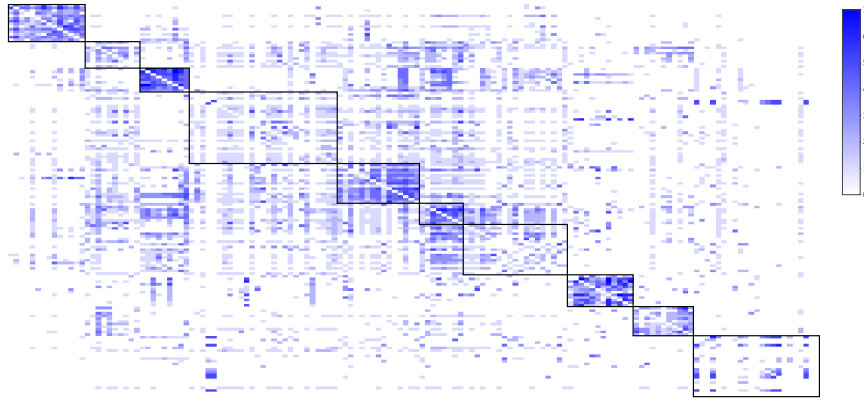


Figure 4.4 – Plot of weighted matrix of the email-Enron network after classification

We see clearly that our method (in red) outperforms the likelihood. First our method converges faster for the problem of estimating the partition. And second, we see in the case where $n = 250$ that even when the likelihood find a partition close to the true one, the estimation of parameters is wrong. This is not surprising since here, we are looking for θ_{kl} and since we look at a binomial SBM, the likelihood estimator is the empirical mean divided by T , so it is an unbiased estimator of $\theta_{kl}/2$.

4.1.5 Study of Real Dataset: Email-Enron

Eventually we apply our method to the email-Enron dataset. The Enron corporation was an energy commodities and services firm, which was declared bankrupt at the end of 2001. As a consequence of this an investigation began leading to a trial, where several employees were convicted of fraud. From this a dataset with mails of employees of the company was made available (Benson et al., 2018). Here we focus on an weighted network with as nodes almost 150 people working at Enron and as weights for the edges the number of emails sent between 2 people (here we consider an undirected graph by counting sent and received emails). To simplify the analysis of the graph, we apply, as in Ludkin (Ludkin, 2020), a log transformation to the weights : so that we look at the rounding of $\lceil \log(1 + \text{Number of emails}) \rceil$. It gives a graph with weights from 0 to 8. Applying our method for the Hellinger divergence with a binomial model with 8 trials, for $K = 10$, it gives the graph in figure 4.4.

We clearly see a block structure in the graph thanks to the method. An interesting thing about this dataset is that we know most of the posts in the company of the people in the graph (Creamer et al., 2022). So we can look at it in each blocs. We see that in block 1 and 3, blocks are named from left to right, are mainly managers, directors and vice-president. In block 5, it is mainly traders 11 of the 15 people have trades in their jobs names. Block 6 contains CEO, president and vice-president. And also in group 8, their is jobs linked to the law and counsel. So the groups found by the method produce a partition which highlights the different categories of jobs in the firm.

4.1.6 Summary and Discussion

In this article, we offer a novel estimator based on divergences. We show that this estimator has asymptotic properties close to the case of the likelihood when the assumed model correspond to the true model. However our methods produce estimators robust to misspecification in the model when the classical approach with the likelihood estimation does not.

In our analysis, we assume that the graph is undirected, because it is the classical setting of SBM. Nevertheless, we can also apply our method to the case of directed graphs. In this case we just have K^2 parameters instead of $K(K+1)/2$.

There are two things in order to make this approach truly concurrent to the likelihood one. First, we have to extend our analysis to include the case of continuous distribution. This is different since to have a good divergence estimate, it is recommended in the literature not to use the empirical probability density function, but a smooth density function (see (Basu and Lindsay, 1994; Al Mohamad, 2018)).

Then, we have to look for the asymptotic distribution of the parameter and of its estimates. This would allow us to construct test for parameters, model adequation or even model selection, for example for selecting the number of groups.

4.1.7 Proofs

Theorem 4.1. For the proof, we proceed as in (Zhao et al., 2012). First, we show that the criterion and a mean version of it are asymptotically close. Then we show that this implies that the argmax of the criterion is close to the true partition of the data.

Step 1 : From H.2 we can focus on partitions c that verify this hypothesis. So let c be a partition of the n nodes in K classes satisfying H.2.

$$\begin{aligned} |\hat{Q}(c) - \bar{Q}(c)| &= \left| \sum_{k \leq l} r_{kl} \left(\inf_{\theta_{kl}} D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - \sum_{k \leq l} \inf_{\theta_{kl}} D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right) \right| \\ &\leq \sum_{k \leq l} r_{kl} \left| \inf_{\theta_{kl}} D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - \inf_{\theta_{kl}} D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right| \\ &\leq \sum_{k \leq l} r_{kl} \sup_{\theta_{kl}} \left| D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right| \\ &\leq \max_{k \leq l} \sup_{\theta_{kl}} \left| D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right|. \end{aligned}$$

So using an union bound, it gives for all $\epsilon > 0$

$$\mathbb{P} \left(\max_c |\hat{Q}(c) - \bar{Q}(c)| > \epsilon \right) \leq \sum_c \sum_{k \leq l} \mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \left| D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D_{\varphi}(P^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right| > \epsilon \right)$$

By Hypothesis H3, the function $x \mapsto \varphi(x/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t)$ is continuous for all $t \in \{1, \dots, T\}$, so it is uniformly continuous. Then for all $\epsilon > 0$, for all k, l and all θ_{kl} , there is a $\delta_{\epsilon} > 0$ such that if $|x - y| \leq \delta_{\epsilon}$ then $|\varphi(x/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t) - \varphi(y/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t)| \leq \epsilon$. So

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \left(\sum_{t=1}^T |\varphi(x/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t) - \varphi(y/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t)| > \epsilon \right) \\ &\leq \sum_{t=1}^T \mathbb{P} (|\varphi(x/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t) - \varphi(y/p_{\theta_{kl}}(t))p_{\theta_{kl}}(t)| > \epsilon/T) \quad . \end{aligned}$$

Using $x = p_n^{(k,l)}(c; t)$, $y = p^{(k,l)}(c; t)$, and with this setting $\mathbb{P}(|x - y| > \delta_{\epsilon}) \leq 2\exp(-2n_{kl}\delta_{\epsilon}^2)$ by convergence of the empirical probability function.

So we have

$$\mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \left| D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}(c), P_{\theta_{kl}}(c)) - D_{\varphi}(P^{(k,l)}(c), P_{\theta_{kl}}(c)) \right| > \epsilon \right) \leq \sum_{t=1}^T \mathbb{P}(|p_n^{(k,l)}(t) - p^{(k,l)}(t)| > \delta_{\epsilon}/T) \quad .$$

And finally by hypothesis 2,

$$\mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \left| D_{\varphi}(P_n^{(k,l)}(c), P_{\theta_{kl}}(c)) - D_{\varphi}(P^{(k,l)}(c), P_{\theta_{kl}}(c)) \right| > \epsilon \right) \leq 2T \exp(-2 \frac{n^2 \delta_{\epsilon}^2}{K^2 T^2})$$

and

$$\mathbb{P} \left(\max_c |\hat{Q}(c) - \bar{Q}(c)| > \epsilon \right) \leq 2 \leq TK^{n+2} \exp(-2 \frac{n^2 \delta_{\epsilon}^2}{K^2 T^2})$$

which goes to zero by hypothesis 4.

Now that we have bounded the distance between the empirical criterion and its mean version, we can study the properties of the optimal partition.

Step 2 :

Now by hypothesis 1 and continuity for all $\delta > 0$, for all e such that there exists (k, l) such that $\|P^{(k,l)}(c) - P^{(k,l)}(c^*)\| > \delta$, there exists $\epsilon > 0$ such that

$$\bar{Q}(c) > \bar{Q}(c^*) + 2\epsilon \quad .$$

Moreover, by step 1, we have:

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(\min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \hat{Q}(c) > \hat{Q}(c^*) \right) &\geq \mathbb{P} \left(\left| \min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \hat{Q}(c) - \min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \bar{Q}(c) \right| < \epsilon, \left| \hat{Q}(c^*) - \bar{Q}(c^*) \right| < \epsilon \right) \\ &\geq 1 - 2TK^{n+2} \exp(-2\epsilon^2 \frac{n^2}{K^2 T^2}) \quad . \end{aligned}$$

The first inequality comes from the fact that when

$$\begin{aligned} \min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \bar{Q}(c) &> \bar{Q}(c^*) + 2\epsilon \quad \text{and} \\ \left| \min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \hat{Q}(c) - \min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \bar{Q}(c) \right| &< \epsilon \end{aligned} \quad (4.9)$$

we have that $\min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \hat{Q}(c) > \bar{Q}(c^*) + \epsilon$ and with $\left| \hat{Q}(c^*) - \bar{Q}(c^*) \right| < \epsilon$, we have $\min_{\{c \mid \|P(c) - P(c^*)\| > \delta\}} \hat{Q}(c) > \hat{Q}(c^*)$.

For the second inequality, we use that $\mathbb{P}(A \cap B) = 1 - \mathbb{P}(A^c \cup B^c) \geq 1 - \mathbb{P}(A^c) - \mathbb{P}(B^c)$, with result of step 1.

Moreover from hypothesis 5, for all $\eta > 0$, for all e such that $|e - c| > \eta$, there exists $\delta > 0$ such that $\|P(c) - P(c^*)\| > \delta$. This implies $\mathbb{P}(|c - c^*| > \eta) \leq \mathbb{P}(\|P(c) - P(c^*)\| > \delta)$.

So we have, with probability going to 1, that for all $\eta > 0$,

$$|\hat{c} - c^*| < \eta \quad .$$

The proof is complete. $\square$

Theorem 4.2. We will proceed as in the theorem 5.7 of (Van der Vaart, 1998).

First assume that $\sup_{\theta} |\hat{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)| \xrightarrow{\mathbb{P}} 0$. Then in particular, $\hat{Q}(\hat{c}, \theta_T) \xrightarrow{\mathbb{P}} \bar{Q}(c^*, \theta_T)$. And we have that $\hat{Q}(\hat{c}, \hat{\theta}) \leq \bar{Q}(c^*, \theta_T) + o_{\mathbb{P}}(1)$.

So $\bar{Q}(c^*, \hat{\theta}) - \bar{Q}(c^*, \theta_T) \leq \bar{Q}(c^*, \hat{\theta}) - \hat{Q}(\hat{c}, \hat{\theta}) + o_{\mathbb{P}}(1) \leq \sup_{\theta} |\hat{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)| + o_{\mathbb{P}}(1) \xrightarrow{\mathbb{P}} 0$

Moreover by hypothesis, we have that for any $\epsilon > 0$, there is $\eta > 0$ such that $M(\theta) > M(\theta_T) - \eta$ for all θ with $d(\theta, \theta_T) \geq \epsilon$. So the event $\{d(\hat{\theta}, \theta_T) \geq \epsilon\}$ is included in the event $\{\bar{Q}(c^*, \hat{\theta}) < \bar{Q}(c^*, \theta_T) - \eta\}$. And we have the convergence in probability.

Now we have to prove $\sup_{\theta} |\hat{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)| \xrightarrow{\mathbb{P}} 0$.

By step 1 of the proof of theorem 4.1, we have that $\sup_{\theta} |\hat{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(\hat{c}, \theta)|$ goes to 0 in probability. So we have to show that it is also the case of $\sup_{\theta} |\bar{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)|$.

From theorem 4.1, we have that $|\hat{c} - c^*|$ goes to zero in probability. So we have that $n_{kl}(\hat{c}) \xrightarrow{\mathbb{P}} n_{kl}(c^*)$ for all k, l and for all t , $p_n^{(k,l)}(\hat{c}; t) \xrightarrow{\mathbb{P}} p^{(k,l)}(c^*; t)$.

We have

$$\begin{aligned}
|\bar{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)| &= \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_{\theta_{kl}}) - \sum_{kl} r_{kl}(c^*) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \right| \\
&\leq \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_{\theta_{kl}}) - \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \right| \\
&\quad + \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) - \sum_{kl} r_{kl}(c^*) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \right| \\
&\leq \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_{\theta_{kl}}) - \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \right| \\
&\quad + \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) - \sum_{kl} r_{kl}(c^*) D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \right| \\
&\leq \left| \sum_{kl} r_{kl}(\hat{c}) (D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_\theta) - D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_\theta)) \right| \\
&\quad + \left| \sum_{k,l} D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) (r_{kl}(\hat{c}) - r_{kl}(c^*)) \right| \\
&\leq \max_{kl} |D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_\theta) - D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_\theta)| \\
&\quad + \max_{k,l} D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_{\theta_{kl}}) \left| \sum_{kl} (r_{kl}(\hat{c}) - r_{kl}(c^*)) \right| \\
&= \max_{kl} |D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_\theta) - D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_\theta)|
\end{aligned}$$

Now since we have $P^{(k,l)}(\hat{c}) = \pi_{kl} P^{(k,l)}(c^*) + (1 - \pi_{kl}) Q^{(k,l)}$, we have $\|P^{(k,l)}(\hat{c}) - P^{(k,l)}(c^*)\| \leq (1 - \pi_{kl}) \|Q^{(k,l)} - P^{(k,l)}(c^*)\|$.

And by hypothesis, $\|P^{(k,l)}(\hat{c}) - P^{(k,l)}(c^*)\| \leq (1 - \pi_{kl}) D$.

In addition, $\max_{kl} (1 - \pi_{kl}) \leq |\hat{c} - c^*|$. So $\|P^{(k,l)}(\hat{c}) - P^{(k,l)}(c^*)\|_1$ goes to zero in probability.

Then by uniform continuity of $\cdot \mapsto D_\varphi(\cdot, P_\theta)$ for discrete distributions, $\max_{kl} \sup_\theta |D_\varphi(P^{(k,l)}(\hat{c}), P_\theta) - D_\varphi(P^{(k,l)}(c^*), P_\theta)|$, goes to zero in probability.

Then it is also the case for $|\bar{Q}(\hat{c}, \theta) - \bar{Q}(c^*, \theta)|$, which concludes the proof. $\square$

Before showing proposition 4.1, we need additional notations. Let $s_{k,a}(c) = \sum_i \frac{I(c_i=k, c_i^*=a)}{n_k(c)}$. Then

$$\begin{aligned}
P^{(k,l)}(c)(t) &= \frac{1}{n_k n_l} \sum_{c_i=k, c_j=l} \mathbb{P}(W_{ij} = t) \\
&= \sum_{i,j} \frac{I(c_i=k, c_j=l)}{n_k n_l} \mathbb{P}(W_{ij} = t) \\
&= \sum_{i,j} \sum_{a,b} \frac{I(c_i=k, c_j=l, c_i^*=a, c_j^*=b)}{n_k n_l} \mathbb{P}(W_{ij} = t) \\
&= \sum_{i,j} \sum_{a,b} \frac{I(c_i=k, c_j=l, c_i^*=a, c_j^*=b)}{n_k n_l} \mathbb{P}(P_{ab} = t) \\
&= \sum_{a,b} \sum_i \frac{I(c_i=k, c_i^*=a)}{n_k} \sum_j \frac{I(c_j=l, c_j^*=b)}{n_l} \mathbb{P}(P_{ab} = t) \\
&= \sum_{a,b} s_{ka} s_{lb} \mathbb{P}(P_{ab} = t) \quad .
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Proposition 4.1. It is clear that when $|c - c^*| = 0$, $\|P^{(k,l)}(c) - P^{(k,l)}(c^*)\|_\infty = 0$.

So assume that $\|P^{(k,l)}(c) - P^{(k,l)}(c^*)\|_\infty = 0$. It implies that for all t , $\sum_{a,b} (s_{k,a}(c) s_{l,b}(c) - s_{k,a}(c^*) s_{l,b}(c^*)) P_{ab}(t) = 0$.

And $s_{k,a}(c^*) = \delta_{k,a}$ so $\sum_{a,b} (s_{k,a} s_{l,b} - \delta_{k,a}(c^*) \delta_{l,b}(c^*)) P_{ab}(t) = 0$, where we omit the (c) to simplify the notation.

Moreover,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{a,b} (s_{k,a}s_{l,b} - \delta_{k,a}(c^*)\delta_{l,b}(c^*)) P_{ab}(t) \\ &\iff \sum_{a,b} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) = P_{kl}(t) \end{aligned}$$

Now let (k, l, t) such that $\max_{a,b,l} P_{a,b}(l) = P_{kl}(t)$. And let $A_t = \{(a, b) | P_{ab}(t) = P_{kl}(t)\}$, we have that

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{a,b} (s_{k,a}s_{l,b} - \delta_{k,a}(c^*)\delta_{l,b}(c^*)) P_{ab}(t) \\ &\iff \sum_{a,b} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) = P_{kl}(t) \\ &\iff \sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) + \sum_{a,b \in A_t} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) = P_{kl}(t) \\ &\iff \sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) = P_{kl}(t) - \sum_{a,b \in A_t} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) \\ &\iff \sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) = P_{kl}(t) \left(1 - \sum_{a,b \in A_t} s_{k,a}s_{l,b} \right) . \end{aligned}$$

Assume that $\sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} \neq 0$, then there exists one $s_{k,a}s_{l,b} > 0$ since all $P_{ab}(t) > 0$ (discrete distribution over a finite support). And because, for all $a, b \in A_t^c$ $P_{ab}(t) < P_{kl}(t)$,

$$P_{kl}(t) \left(1 - \sum_{a,b \in A_t} s_{k,a}s_{l,b} \right) = \sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} P_{ab}(t) < \sum_{a,b \in A_t^c} s_{k,a}s_{l,b} P_{kl}(t) .$$

This is impossible, so $\sum_{a,b \in A_t^c} n_{k,a}n_{l,b} = 0$ which is equivalent to $1 = \sum_{a,b \in A_t} s_{k,a}s_{l,b}$ so $s_{k,k}s_{l,l} = 1$.

If we consider the model without blocks k and l , we can apply the same procedure and show that two other blocks are perfectly classified. So using this recursively will give the desired results. $\square$

4.2 Robust Estimation in Weighted Graphs

4.2.1 Introduction

Graphical data is ubiquitous across various fields. For instance, in finance, one might study the correlations between the price movements of different assets (Laloux et al., 1999). In transportation, the network of airline traffic is of interest (Barrat et al., 2004). Similarly, in social sciences, interactions between individuals can be represented as graphs (Handcock and Gile, 2010). Even in academia, collaboration networks among scientific authors are analyzed (Newman, 2001). In biology, graph-based representations are commonly used to study gene interactions (Fan et al., 2023), while in natural language processing, topic modeling can be framed as a graphical problem (Boutin et al., 2023). For further examples, interested readers can consult (Abbe, 2018). These examples highlight the prevalence of graphical data, which often exhibit underlying structures.

To model the structure of a graph, various methods have been proposed. Some of these methods involve maximizing a difference between the observed graph and some null model (Reichardt and Bornholdt, 2006; Žiberna, 2007). However, in this paper, we focus on probabilistic approaches. Among these, one of the most well-known models, apart from the Erdős-Rényi model (Erdős and Rényi, 1959) which assumes no particular structure, is the stochastic block model (SBM) introduced by (Holland et al., 1983). Initially developed in social science to model relationships between individuals, the SBM assumes that the nodes of the graph can be classified. Permuting the nodes in the adjacency matrix of the graph so that nodes in the same groups are adjacent should lead to a matrix with a block structure. Specifically, the distribution of edges in the graph depends only on the groups of the nodes linked by the edge.

Certain special cases of the SBM have garnered significant attention, such as the planted SBM (Newman, 2016). In the planted SBM, it is assumed that the distribution of edges within diagonal blocks is the same, and the distribution of edges between blocks off the diagonal is also the same (but different from the diagonal). While planted SBMs may be suitable for modeling certain real-world graphs (Rohe, Qin, et al., 2014), they may not cover cases where more general models are required.

Indeed, many real-world graphs have weighted edges, which provide more nuanced information than binary edges. Examples of such graphs can be found in studies like (Mariadassou et al., 2010; Aicher et al., 2015). Additionally, real graphs often exhibit sparsity, meaning that nodes are typically connected to only a small subset of other nodes (Massoulié, 2014; Mossel et al., 2015). To better capture the characteristics of real graphs, SBM with binary edges have been extended to accommodate weighted edges, using distributions such as the Poisson, Gamma or other distributions (Peixoto, 2018; Ludkin, 2020; Ng and Murphy, 2021).

Furthermore, several other extensions and variants of the SBM have been proposed to address different aspects of real-world graphs. For example, the degree-corrected SBM introduced by (Karrer and Newman, 2011) associates a parameter with each node to model heterogeneity within blocks. Another extension allows nodes to belong to multiple blocks simultaneously, as proposed in the mixed membership stochastic block model (Airoldi et al., 2008) and overlapping block models (P. Latouche et al., 2011).

Various other variants and specialized models have also been developed for specific applications, such as those incorporating covariates (Newman and Clauset, 2016) or tailored models for particular datasets (Boutin et al., 2023). However, these models are outside the scope of the current paper.

When analyzing random graphs, various questions of interest arise. These include testing for the presence of underlying structure in the graph against null models such as the Erdős-Rényi model (Gao and Lafferty, 2017) or conducting goodness-of-fit tests (L. Zhang and Amini, 2023). Estimating the number of blocks in the graph is another important task (Pierre Latouche et al., 2014; Yan, 2016; Y. X. R. Wang and P. J. Bickel, 2017). Additionally, estimating the parameters of the models (Ambroise and Matias, 2012; P. Bickel et al., 2013) and performing classification tasks (Choi et al., 2012; Zhao et al., 2012) are common objectives. Some approaches address parameter estimation and classification simultaneously (Aicher et al., 2015; Schweinberger, 2020).

For classification estimation, two main approaches are prevalent in the literature. One approach focuses on criteria such as Modularity (Girvan and Newman, 2002) or K-means (Hartigan and M. A. Wong, 1979), which are not directly linked to the SBM, although some properties of these methods can be inferred (Zhao et al., 2012; Giraud and Verzelen, 2019). The other approach is based directly on the SBM structure, as seen in works like (Daudin, Picard, et al., 2008; Rohe, S. Chatterjee, et al., 2011; Ng and Murphy, 2021).

In both classification and parameter estimation tasks, knowing the number of blocks a priori is often necessary. While many papers make this assumption, in practice, it may not always hold, requiring inference from the data. Various approaches have been proposed to address this issue. Some rely on information criteria such as AIC or BIC (Funke and Becker, 2019; De Nicola et al., 2022), or modified versions thereof, such as a modified BIC incorporating a sparse structure prior (Yan, 2016). However, for block models, (Biernacki et al., 2000) argue that these criteria may not be well-suited and propose an alternative approach called integrated completed likelihood. Another common method of model selection involves likelihood ratios, as seen in (Y. X. R. Wang and P. J. Bickel, 2017).

Many approaches listed here rely on maximizing the likelihood of the graph. While some studies provide consistency results independent of the estimation methods, much of the research aims to develop efficient estimation techniques to handle large graphs (Funke and Becker, 2019). However, since the true classification is unknown, computing the complete likelihood of the graph becomes infeasible. To address this challenge, various approaches have been proposed.

One possibility is to avoid using the likelihood altogether. Methods like Modularity or K-means typically rely on heuristic algorithms (Arthur and Vassilvitskii, 2007; Blondel et al., 2008), or employ convex relaxations of the problem (Giraud and Verzelen, 2019; Hollocoou et al., 2019). Another approach is spectral clustering, as seen in (Rohe, S. Chatterjee, et al., 2011).

For methods based on the likelihood, composite likelihood (which simplifies computation) (Ambroise and Matias, 2012) or Markov Chain Monte Carlo (MCMC) methods can be employed (Peixoto, 2018). However, perhaps the most commonly used methods are those based on Expectation Maximization (EM) and variational inference (Daudin, Picard, et al., 2008; Latouche et al., 2012). For more details on estimation methods, one can refer to (Funke and Becker, 2019).

Recently, SBM that account for potential misspecifications in the graph have garnered attention. One approach to constructing a misspecified SBM is to partition the nodes of the graph into two groups (Cai and X. Li, 2015). In this setup, the distribution of the adjacency matrix, possibly weighted, restricted to nodes in the first group follows a classical SBM. However, the distribution for the rest of the adjacency matrix does not adhere to any specific structure. Another line of research involves considering a block model with modifications to the adjacency matrix (Makarychev et al., 2016; A. Liu and Moitra, 2022). These modifications are often assumed to arise adversarially, complicating model estimations. For instance, in the case of a planted Bernoulli SBM where the probability of an edge in a diagonal block is higher than in off-diagonal blocks, (Makarychev et al., 2016) study the removal of edges in diagonal blocks and the addition of edges elsewhere. In the context of estimating parameters for an Erdős-Rényi random graph, (Acharya et al., 2022) distinguish between two cases: the omniscient case, where an adjacency matrix is drawn from the model and then modified by an adversary, and the oblivious case, where the adversary knows the model but not its realization.

As in the classical SBM setting, various estimation methods are applicable. For example, (Stephan and

Massoulié, 2019) consider modified spectral clustering, while (Makarychev et al., 2016) leverage properties of the Kullback-Leibler divergence to achieve robustness properties.

Indeed, misspecifications can significantly impact parameter estimation in likelihood-based methods beyond SBM estimation (Huber, 1972). To address this challenge, alternative methods have been proposed. For instance, (Donoho and R. C. Liu, 1988) offer insights into the robustness to misspecification for distance-based estimators. Among these, the class of Cramér-von Mises discrepancies (Parr and De Wet, 1981) has garnered significant attention. Additionally, φ -divergences (Csiszár, 1967; Broniatowski and Keziou, 2006) represent another well-studied class of methods for handling misspecifications.

4.2.2 Derivation of some New Estimation Methods

New Families of Criteria

An **Stochastic Block Model** (SBM) with K blocks, is defined through a matrix of probability distributions $(P_{kl})_{kl}$ with dimensions $K \times K$ and a probability distribution Π on $\{1, \dots, K\}$.

Then we said that a random graph with n nodes is generated according to a SBM if its distribution is the same as the following process,

- there is a latent partition $\mathbf{c}^* \in \{1, \dots, K\}^n$ of the nodes generated as $c_i^* \stackrel{iid}{\sim} \pi$ for each node i ,
- conditionally on $\mathbf{c}^*$, the weighted (adjacency) matrix of the graph is given by $W_{ij} \stackrel{iid}{\sim} P_{c_i^*, c_j^*}$, $W_{ij} = W_{ji}$.

In such case, we denote

$$\mathbf{W}, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (P_{kl})_{kl}) \quad . \quad (4.11)$$

To make the model identifiable, a necessary condition is to assume that for any pairs of columns $l, l' \in \{1, \dots, K\}$, there is at least a row k such that $P_{kl} \neq P_{kl'}$. This is assumed in the following.

If the distributions of the weights do not have support $\{0, 1\}$, this model is often referred to as Weighted SBM (Ng and Murphy, 2021). Here, we simply refer to it as SBM.

In this paper, we focus on the estimation of a **parametric SBM**, i.e. an SBM where the distributions of the edges belong to a parametric model $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$, with $\Theta \subset \mathbb{R}^p$. In such case, we denote

$$\mathbf{W}, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (P_\theta), \theta^*) \quad . \quad (4.12)$$

which is equivalent to $\mathbf{W}, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (P_{\theta_{kl}^*})_{kl})$.

However, we aim to accommodate misspecifications. Therefore, we do not want to assume that the observed graph is generated according to a parametric SBM, or even an SBM.

In cases where we assume the graph is generated by an SBM, a common approach to estimate the model parameters (and the latent partition) is likelihood maximization or one of its variants (Choi et al., 2012). However, these methods often assume that the number of classes K of the model is known. Yet, the graph may not precisely conform to an SBM model; for instance, outliers in the weights or dependencies between them may exist. Thus, it is valuable to give an estimation method which allows recovering the model while being robust to such deviations. However, typical likelihood-based methods may not exhibit this robustness. Hence, we propose to consider alternative criteria with better properties in the presence of misspecifications. Particularly, an alternative to likelihood is estimation based on divergences (also known as discrepancies) or more generally on pseudo-distances. This family of criteria encompasses measures with desirable properties, as seen in prior studies (Donoho and R. C. Liu, 1988; Jiménez and Shao, 2001).

Before going further, we recall the motivation for criteria based on φ -divergence proposed by (Ferraris, 2024). But we consider this family of criteria for general pseudo-distance and not only φ -divergence.

One of the most commonly used criteria based on likelihood is the partial (log)-likelihood, which is defined as:

$$\text{pll}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) \log \mathbb{P}_{\theta_{kl}}(W_{ij}) = \sum_{kl} n_k n_l \text{llk}(\mathbf{W}_{k,l}, \theta_{kl}) \quad (4.13)$$

where $\mathbf{c}$ is a partition of the n nodes into K classes, $\boldsymbol{\theta}$ is a symmetric matrix of size $K \times K$ of parameters, $n_k = \sum_{i=1}^n I(c_i = k)$ is the number of nodes in the block k of the partition $\mathbf{c}$, $\mathbf{W}_{k,l} = \mathbf{W}_{k,l}(\mathbf{c}) = (W_{ij})_{i:c_i=k, j:c_j=l}$ and the likelihood of a sample $\mathbf{x}$, $\text{llk}(\mathbf{x}, \theta_{kl}) = \frac{1}{|\mathbf{x}|} \sum_i \log \mathbb{P}_{\theta_{kl}}(x_i)$.

However, maximizing the likelihood of a sample $(X_i)_{1 \leq i \leq n}$, $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \mathbb{P}_\theta(X_i)$, is equivalent to minimizing the Kullback-Leibler divergence (KL) $D_{KL}(\hat{F}_n, P_\theta)$ between the empirical distribution function $\hat{F}_n$ of the sample and the model $(P_\theta)_\theta$. Therefore, the likelihood criterion is analogous to a sum of distances between the parametric model and the empirical distribution for each block. Given this equivalence, it is reasonable to consider using

$$\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D_{KL}(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (4.14)$$

with $\hat{F}^{(k,l)}(x) = \frac{1}{n_k n_l} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) I(W_{ij} \leq x)$ the empirical cumulative distribution of the data in block (k, l) of the partition $\mathbf{c}$.

Notice that minimizing equations (4.13) and (4.14) can lead to different estimators. Indeed, the KL divergence is equal to the likelihood up to a constant term, which depends on the size of the sample. If we wanted equality between the two criteria, we would therefore have to add a sum which would depend on the size of the blocks. This sum can then influence the estimation of the classification, and therefore also on the parameter estimators.

However, similar to the case of the likelihood, the KL divergence is not known for its robustness properties to misspecifications. Therefore, (Ferraris, 2024) proposes to replace the KL divergence by some pseudo-distance D , which may have better robustness properties. This leads us to consider criteria of the form:

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (4.15)$$

where $\hat{F}^{(k,l)}$ is an estimator of the distribution of the weights in the block (k, l) , i.e. $\hat{F}^{(k,l)}$ is an estimator of

$$F^{(k,l)}(\cdot) = \frac{1}{n_k n_l} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) P(W_{ij} \leq \cdot) \quad (4.16)$$

and D is a pseudo distance D , that is $D(F, G) \geq 0$ for any distributions F, G and $D(F, G) = 0$ implies that $F = G$ (or $F = G$ F-a.e. or G-a.e.).

(Ferraris, 2024) studied this family of criteria for some φ -divergences in the case where the weights of the graph follows some discrete distribution with finite support. Nevertheless, other families of pseudo-distances can also have interesting properties. This formulation can also be generalized in other ways. One of them is to look at divergences for graphs with weights in continuous support distributions. The second is in the very choice of the criterion.

For example, in the case where only the partition is of particular interest, it is possible to consider the criterion with only the diagonal blocks

$$\hat{Q}^m(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_k \frac{n_k^2}{n^2} D(\hat{F}^{(k,k)}, P_{\theta_{kk}}) \quad (4.17)$$

This is motivated by the fact that under an SBM with $\{0, 1\}$ weights, the classification given by the K -means, which considers only diagonal blocks, is an asymptotically consistent estimate of the latent partition (Giraud and Verzelen, 2019). This is not the only possible alternative.

Recently, (J. Wang et al., 2023) use the fact that an SBM can be assimilated to a multivariate mixture distribution. In particular, each row is seen as a realization of a mixture whose j -th component is drawn according to P_{kc_j} . They then propose to maximize the criterion they call profile-pseudo (log)-likelihood given by

$$\text{ppl}(\mathbf{c}, \pi, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n \log \left(\sum_{k=1}^K \pi_k \prod_{j=1}^n P_{\theta_{kc_j}}(W_{ij}) \right) \quad (4.18)$$

This formulation can also be put in the form of a criterion with pseudo-distance, but this time between multivariate distributions:

$$\hat{Q}^f(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}, \pi) = D \left(\hat{F}(\cdot \cdot), \sum_{k=1}^K \pi_k \prod_{j=1}^n P_{\theta_{kc_j}}(\cdot) \right) \quad (4.19)$$

where $\hat{F}$ is here an estimator of the distribution of $(W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{in})$.

Finally, in the case where only the model parameters are sought, and not the latent partition, (P. Bickel et al., 2013) considers the (true) likelihood of the model

$$\text{lk}(\pi, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n} \left(\prod_{i=1}^n \pi_{c_i} \right) \left(\prod_{i=1}^n \prod_{j=i+1}^n P_{\theta_{c_i c_j}}(W_{ij}) \right) \quad (4.20)$$

which can be rewritten as

$$\text{lk}(\pi, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n} \left(\prod_{k=1}^K \pi_k^{n_k} \right) \left(\prod_{1 \leq k, l \leq K} \prod_{i > j} P_{\theta_{kl}}(W_{ij})^{I(c_i=k, c_j=l)} \right) \quad (4.21)$$

This can be seen as a mixture model for the edges' distribution. In this case, a natural criterion using divergence is given by

$$\hat{Q}^p(\pi, \theta) = D \left(\hat{F}, \sum_{1 \leq k, l \leq K} \pi_k \pi_l P_{\theta_{kl}} \right) \quad (4.22)$$

where this time, $\hat{F}$ is simply an estimator of the distribution of all the weights of the graph.

Obviously, if additional constraints are made on the model, they can be considered in the different criteria. For example, if the parametric SBM is assumed to be planted, i.e. $\theta_{kk} = \theta_{in}$ and $\theta_{kl} = \theta_{out}$ for $k \neq l$, $\hat{Q}^p$ can be simply rewritten as

$$\hat{Q}^p(\pi_{in}, \theta_{in}, \theta_{out}) = D \left(\hat{F}, \pi_{in} P_{\theta_{in}} + (1 - \pi_{in}) P_{\theta_{out}} \right) \quad (4.23)$$

Each of the criteria $\hat{Q}^c$, $\hat{Q}^m$, $\hat{Q}^f$ and $\hat{Q}^p$ corresponds to a sum of pseudo-distances between some empirical distribution and the parametric model. Clearly, it is possible to take different pseudo-distances for each block. We will then simply write Q^c , Q^m , Q^f and Q^p when instead of the estimator of the distribution, the true distribution is considered. For example, Q^c is given by

$$Q^c(\mathbf{c}, \theta) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (4.24)$$

Remark 4.6. *If the weights are restricted to $\{0, 1\}$, the model P_θ of weights distribution corresponds to the Bernoulli distribution. In this case, the empirical distribution $\hat{F}^{(k,l)}$ corresponds to the cumulative distribution of a Bernoulli distribution independently of the classification $\mathbf{c}$. Thus, for any $\mathbf{c}$, the criterion (empirical or the true one) is 0. Therefore, this approach cannot be used on such graphs.*

Furthermore, this presentation is not intended to be exhaustive, as there are many other possible criteria. For example, one proposed by (Karrer and Newman, 2011) is that for a SBM with edges distributed as Poisson distribution, the partial likelihood can be rewritten as the KL divergence between the distributions in each block and the one of the random graph model, called configuration model.

Although sometimes adapted to different objectives, these criteria are not necessarily dissociated. Indeed, for a given partition $\mathbf{c}$, if the divergence D is jointly convex,

$$Q^p \left(\left(\frac{n_k}{n} \right)_{1 \leq k \leq K}, \theta \right) = D \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_{ij} \frac{I(c_i = k, c_j = l)}{n_k n_l} \mathbb{P}(W_{ij} \leq \cdot), \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} P_{\theta_{kl}} \right) \leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \quad (4.25)$$

Therefore, in this case, we have

$$\inf_{\pi, \theta} Q^p(\pi, \theta) \leq \inf_{\theta} Q^p \left(\left(\frac{n_k}{n} \right)_{1 \leq k \leq K}, \theta \right) \leq \inf_{\mathbf{c}, \theta} Q^c(\mathbf{c}, \theta) \quad (4.26)$$

Moreover, by positivity of D , we have $Q^m(\mathbf{c}, \theta) \leq Q^c(\mathbf{c}, \theta)$.

In the remainder of this paper, we will focus on the empirical criteria $\hat{Q}^c$ and $\hat{Q}^p$ defined in equations 4.17 and 4.22.

Particular Families of Pseudo-Distances

There are numerous possible pseudo-distances between probability distributions, each with its own characteristics and applications. In this discussion, we particularly focus on three families of pseudo-distances, although other options exist as well. For a comprehensive review of various pseudo-distances on probability distributions, interested readers can refer to sources such as (Basu, Shioya, et al., 2011; Broniatowski and Stummer, 2019). These sources provide valuable insights into the properties and applications of different types of pseudo-distances in statistical analysis and modeling.

The first family considered is one of φ -divergences (Csiszár, 1967). It is defined as,

$$D(F, G) = \int \varphi \left(\frac{dF}{dG} \right) dG \quad (4.27)$$

for F, G two distributions such that dF and dG exists and φ is a convex function such that $\varphi(1) = 0$. The family contains in particular the L_1 distance, the Hellinger distance, the χ^2 divergence and the Kullback-Leibler divergence. Because of the convexity of φ , the function $(F, G) \mapsto D(F, G)$ is convex. Moreover, $D(F, G) = 0$ if and only if $F = G$, G - a.e.. A subfamily of φ -divergences is the family of Cressie-Read divergences (Cressie

and Read, 1984) also known as power divergences. In this case, for $\gamma \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$, $D(F, G) = D_\gamma(F, G)$ with

$$\varphi(x) = \varphi_\gamma(x) = \frac{x^\gamma - \gamma x + \gamma - 1}{\gamma(\gamma - 1)} \quad . \quad (4.28)$$

In the following of this paper, we refer to them as γ -power divergences.

The second family we consider is the class of the Basu-Harris-Hjort-Jones (BHHJ) power divergence (Basu, Harris, et al., 1998) defined for any $a > 0$ as

$$D(F, G) = \int \left[g^{1+a}(x) - \left(1 + \frac{1}{a}\right) f(x)g(x)^a + \frac{1}{a} f(x)^{1+a} \right] dx \quad . \quad (4.29)$$

The idea behind this family is to propose a compromise between the Kullback-Leibler divergence ($a \rightarrow 0$) which has good asymptotic estimation properties and the L_2 distance which has good robustness properties.

The last family of criteria is the family of Cramér-von Mises discrepancies (Parr and De Wet, 1981). It is defined as

$$D(F, G) = \int (F(x) - G(x))^2 w(x) dx \quad (4.30)$$

where w is a weight function. As for divergences, assuming that w is strictly positive implies $D(F, G) = 0$ if and only if $F = G$. Moreover, if w is positive, then is also a convex function in (F, G) . The family includes several classical distances. In particular, $w(x) = \frac{dG(x)}{dx}$ leads to the Cramér-von Mises discrepancy and $w(x) = \frac{dG(x)}{dx} \frac{1}{G(x)(1-G(x))}$ to the Anderson-Darling discrepancy. But again, other weight functions are possible. See for example (Parr and De Wet, 1981), who provide justification for different weight functions based on the function G .

Some kind of misspecified SBM

In the literature on misspecified SBM, a common scenario involves assuming that certain node values are modified, potentially in an adversarial manner.

Specifically, these adversaries can be based on the distribution of the model without observing the generated graph. Thus, if the adversary chooses to modify the law of a weight $W_{i,j}$, it is likely that this new law aligns with the other laws of the model to disrupt the estimation. In this case, the weight law W_{ij} can be rewritten as:

$$W_{ij} | \mathbf{c} \sim \sum_{k,l} \pi_{ik} \pi_{jl} P_{kl} \quad .$$

Here, $(\pi_{ik})_{1 \leq k \leq K}$ belong to the probability simplex Δ for any node i and represent the probability that the weight of node i is drawn as if it belonged to class k . In the case of an SBM without misspecifications, $\pi_{ik} \in \{0, 1\}$.

Thus, a convex relaxation of the problem where we replace $I(c_i = k)$ by π_{ik} and n_k by $\sum_{i=1}^n \pi_{ik}$ would allow us to consider some possible bad specifications of the model.

However, this type of modeling does not encompass all possible adversarial weight changes. If the adversary knows the graph generated by the model, it may be more appropriate to see these changes as outliers or inliers depending on the situation. In this case, we can rewrite the weight as:

$$W_{ij} | \mathbf{c} \sim (1 - \epsilon_{ij}) P_{c_i c_j} + \epsilon_{ij} G_{ij} \quad .$$

The influence of this deviation from the model has been extensively studied for divergences, which makes these criteria particularly interesting.

Another type of misspecification arises from possible dependence between weights. On graphs like part of the Amazon product recommendation system, it is possible to observe dependence between the weights of nodes in the same blocks (Babkin et al., 2020).

Another perspective is to assume that there are nodes in the graph that do not belong to the block structure (P. Latouche et al., 2011). However, this kind of misspecification is beyond the scope of this paper.

In the following, we adopt more concise notations. Instead of $I(c_i = k)$, we use c_{ik} , where $1 \leq i \leq n$ and $1 \leq k \leq K$. We still use the term "partition" for the matrix $\mathbf{c}$.

4.2.3 Theoretical Properties of the Criteria

In this section, we provide some results on the consistency of our methods of estimation. We also give examples of estimators for classical pseudo-distances that are consistent.

Consistencies Theorems

We start by giving a general theorem giving conditions to have the consistency of the classification estimate. To measure the performance of the method, we define for two partitions $\mathbf{e}$ and $\mathbf{c}$

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \min_{\sigma} \sum_{i=1}^n \sum_k |e_{i\sigma(k)} - c_{ik}| \quad (4.31)$$

where the minimum is taken over all the permutations σ of $\{1, \dots, K\}$. Notice that in case where $c_{ik}, e_{ik} \in \{0, 1\}$, the equation can be rewritten with the vector formulation instead of the matrix one.

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = 2 \min_{\sigma} \sum_{i=1}^n I(\sigma(e_i) = c_i) \quad (4.32)$$

which have been used, for example by (Zhao et al., 2012) (up to the constant 2) to quantify the estimation error in the classification.

Moreover, for any distance $\|\cdot\|$ and two finite collections of distributions $\mathbf{F} = (F_k)_k$, $\mathbf{G} = (G_k)_k$ we denote $\|\mathbf{F} - \mathbf{G}\| = \max_k \|F_k - G_k\|$.

As we allow the possibility that the model is misspecified, i.e. the graph may not be generated from some distribution of the parametric SBM, the notion of “latent partition” and “true parameters” is not clearly defined. For this reason, we consider that for a criterion Q , the target of the estimation should be $\mathbf{c}^*$, π^* and θ^* defined as

$$\mathbf{c}^*, \pi^*, \theta^* \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}, \pi, \theta} Q(\mathbf{c}, \pi, \theta) \quad .$$

Note that the set of optimal parameters for this problem may not be unique. In particular, up to a permutation of the class labels, two partitions may lead to the same results. In the following we consider that two partitions $\mathbf{e}$ and $\mathbf{c}$ are the same if they are equal up to a permutation of their labels as implied by $\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n}$ to measure the difference between them.

For each of the criteria in which we are interested, this choice of the target parameters is close, in interpretation, to the projection of the true distribution of the graph on the parametric SBM model which is considered. In addition, under the model, they correspond to the SBM parameters and latent partition.

Proposition 4.2. *If $\mathbf{W}, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (P_{\theta})_{\theta}, \theta^*)$, then the latent partition and the optimal parameters for Q^c , Q^m , Q^f and Q^p are the same and are equal to the parameters $\mathbf{c}^*$ and θ^* of the models.*

Theorem 4.3 (Consistency of the latent partition estimates). *Assume that we observe a random weighted graph $\mathbf{W}$ with n nodes and let $(P_{\theta})_{\theta \in \Theta}$ be some parametric model.*

Consider the criterion $\hat{Q}^c$ defined as

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}) = \sum_{k \leq l} \frac{n_k n_l}{n^2} \inf_{\theta_{kl}} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}). \quad (4.33)$$

Assume that:

1. *for any $\epsilon > 0$, there exists $\beta \geq 0$ and n_{ϵ} such that for any $n > n_{\epsilon}$,*

$$\mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \sum_{k,l} \frac{n_k n_l}{n^2} |\hat{D}(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}})| > \epsilon \right) \leq C_1 e^{-C_2 \frac{n^2}{K^{\beta}} \epsilon^2} \quad (C)$$

where C_1 and C_2 are two strictly positive constants.

2. *$\frac{n}{K^{\beta} \log(K)} \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$;*
3. *$\|\mathbf{F}(\mathbf{c}) - \mathbf{F}(\mathbf{c}^*)\| \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0 \Rightarrow \frac{1}{n} \|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0$.*

Put $\tilde{\mathbf{c}} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} \hat{Q}^c(\mathbf{c})$.

Then we have with probability going to 1 as n goes to infinity that

$$\frac{1}{n} \|\tilde{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \rightarrow 0. \quad (4.34)$$

Remark 4.7. *Hypotheses 1 and 2 of Theorem 4.3 are quite standard in the SBM literature. The first one is used to demonstrate that if the criterion converges quickly enough to its expected value (in the intuitive sense, not necessarily mathematically), then we can derive the consistency of the arguments of the minimum. The second one, for example, implies (up to a logarithmic term) that the number of classes can be at most in $o(\sqrt{n})$, which aligns with results in (Choi et al., 2012), among others.*

The last hypothesis implies that comparing the distributions of the graphs provides information about the distance between the associated partitions. In particular, this implies that mixtures of the true edges distributions in the graph cannot yield a distribution of $\mathbf{F}(\mathbf{c}^*)$.

We can also provide consistency result for parameters estimation.

Theorem 4.4 (Consistency of the parameters). *Let k, l be in $\{1, \dots, K\}^2$. Let $\theta_{kl}^* = \operatorname{argmin}_{\theta} D(F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*), P_{\theta})$ and $\tilde{\theta}_{kl} = \operatorname{argmin}_{\theta} D(\hat{F}^{(k,l)}(\tilde{\mathbf{c}}), P_{\theta})$.*

Under the hypotheses of Theorem 4.3, assuming in addition that

4. $\|F^{(k,l)}(\tilde{\mathbf{c}}) - F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*)\|_1 \rightarrow 0 \Rightarrow D(F^{(k,l)}(\tilde{\mathbf{c}}), F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*)) \rightarrow 0$
5. for any $\epsilon > 0$,

$$\min_{\{\theta \mid |\theta - \theta_{kl}^*| > \epsilon\}} D(F^{(k,l)}, P_{\theta}) > D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}^*}) \quad , \quad (4.35)$$

then,

$$\tilde{\theta}_{kl}(\tilde{\mathbf{c}}) \xrightarrow{\mathbb{P}} \theta_{kl}^*(\mathbf{c}^*) \quad . \quad (4.36)$$

Remark 4.8. The additional conditions of this theorem are usual in divergence literature. In particular, condition 5 given in equation (4.35) has been used by (Al Mohamad, 2018) to show the consistency of its estimator of the divergence.

Now we give some results to simplify the study of the hypothesis of the previous theorems.

Proposition 4.3. *Under an SBM condition 3 of theorem 4.3 is satisfied if the model is identifiable.*

Proposition 4.4. *If the function $\theta \mapsto D(F, P_{\theta})$ is convex, then hypothesis 5 of theorem 4.4 is satisfied.*

Before giving some examples of pseudo-distances satisfying the assumptions, we provide a theorem for studying concentration properties of weighted sum of distances. This theorem will be used in order to prove assumption (*).

Theorem 4.5 (Concentration of weighted mean of distance estimates). *Let $(X_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ be independent random variables. Let $\mathbf{c} \in [0, 1]^{n \times K}$, such that $\sum_k c_{ik} = 1$ for all i and let $n_k = n_k(\mathbf{c}) = \sum_i c_{ik}$ and K may depend on n .*

1. Let $\hat{F}^{(k,l)} = \sum_{ij} \frac{c_{ik}}{n_k} \frac{c_{jl}}{n_l} X_{ij}$ and $F^{(k,l)} = E[\hat{F}^{(k,l)}]$. There exists a constant c such that for any $\epsilon > c \frac{K}{n} \log(n)$,

$$\mathbb{P} \left(\sum_{1 \leq k, l \leq K} \frac{n_k n_l}{n^2} \|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_{\infty} > \epsilon \right) \leq e^{-\frac{n^2 \epsilon^2}{4K^2}} \quad . \quad (4.37)$$

2. Assume that the random variables have densities (f_{ij}) . Let $\hat{f}_{h_{kl}}^{(k,l)} = \sum_{ij} \frac{c_{ik}}{n_k} \frac{c_{jl}}{n_l} K_{h_{kl}}(\cdot - X_{ij})$ be a kernel estimator of the distribution in block (k, l) with kernel K that integrates to 1 and has binwidth h_{kl} such that $h_{kl} \leq h_n \rightarrow 0$. Let $f^{(k,l)} = \sum_{ij} \frac{c_{ik}}{n_k} f_{ij}$ the true density in block k, l .

Assume that $\frac{n^4 h^3}{K^2} \rightarrow \infty$. Then, for any $\epsilon > 0$, there exist n_{ϵ} and two constants $C_1 > 0$, $C_2 > 0$ such that for any $n \geq n_{\epsilon}$,

$$\mathbb{P} \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int |\hat{f}_{h_{kl}}^{(k,l)} - f^{(k,l)}| > \epsilon \right) \leq C_1 e^{-C_2 n^2 \epsilon^2} \quad . \quad (4.38)$$

Now we can give concrete examples that satisfy those hypotheses.

Examples of Empirical Criteria

We begin by examining some pseudo-distances. Starting with φ -divergences, a notable characteristic of this class is that, it requires, in general, both F and G to be absolutely continuous regarding the same measure (e.g., the Lebesgue measure). However, when using plug-in empirical distribution functions, this condition is not satisfied. To address this issue, several authors propose using a kernel density estimator instead (Basu and Lindsay, 1994; Al Mohamad, 2018). Therefore, we consider this scenario here.

Corollary 4.5.1 (φ -divergence). *Assume that φ is γ -Hölder for $\gamma \in (0, 1]$. Let $\mathbf{W}$ be a random graph with n nodes, whose weights are independent and such that W_{ij} admits a density for all $1 \leq i, j \leq n$. Let $(G^{(k,l)})$ be any probability distributions with densities $(g^{(k,l)})$.*

Let h be such that $h = h_n \rightarrow 0$, $nh \rightarrow \infty$ and $\frac{n^4 h^3}{K^2} \rightarrow \infty$.

Then the estimator of the divergence is of the form

$$D(\hat{F}^{(k,l)}, G^{(k,l)}) = \int g^{(k,l)}(x) \varphi \left(\frac{\frac{1}{n_k n_l} \sum_{ij} K_h(x - X_{i,j})}{g^{(k,l)}(x)} \right) dx \quad (4.39)$$

with $K_h(x) = \frac{1}{h} K(x/h)$ and K a density of probability (this includes uniform kernel and Gaussian kernel) satisfies the assumption (*).

Remark 4.9. We have that the γ -power divergence, which also corresponds to $\varphi(x) = \frac{x^\gamma - 1}{\gamma(\gamma - 1)}$, are γ -Hölder, when $\gamma \in (0, 1)$. The reverse KL divergence: $\varphi(x) = x \log(x) - x + 1$ is Hölder for any $\gamma \in (0, 1)$. $\varphi(x) = |x - 1|$ is Lipschitz.

Proposition 4.5 (discrete φ -divergence). Assume that φ is γ -Hölder for $\gamma \in (0, 1]$. Let $\mathbf{W}$ be a discrete random graph with n nodes, whose weights are independent. Let $(G^{(k,l)})$ be discrete distributions.

Assume that $K = o(n)$. Then, there exists a constant L such that for any $\epsilon > 0$ there exists $n_\epsilon > 0$, such that for any $\mathbf{c}$,

$$\mathbb{P} \left(\left| \hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W}) - Q^c(\mathbf{c}, \mathbf{W}) \right| > \epsilon \right) \leq 2e^{-L\epsilon^2 n^2} \quad (4.40)$$

with the divergence estimator defined as

$$D(\hat{F}^{(k,l)}, G^{(k,l)}) = \sum_k g^{(k,l)}(k) \varphi \left(\frac{\sum_{ij} \frac{I(c_i=k)}{n_k} \frac{I(c_j=l)}{n_l} I(W_{ij}=k)}{g^{(k,l)}(k)} \right) . \quad (4.41)$$

Thus, it satisfies the assumption (*).

Compared with the results of (Ferraris, 2024), in the discrete case, our proposition 4.5 provides several improvements. First, it does not require the assumption that the size of the classes are proportionnal i.e. $n_k = O\left(\frac{n}{k}\right)$. In addition, it allows having $K = o\left(\frac{n}{\log(n)}\right)$ and not only $K = o(\sqrt{n})$. Furthermore, our approach works for distributions with infinite support.

However, using kernel density estimators, such as Gaussian or indicator kernels, may not be adapted, especially when the support is bounded (or half bounded). So, to limit the boundary bias, Chen (S. X. Chen, 2000; S. X. Chen, 1999) proposes to use a Gamma or Beta kernel. For these estimators, we can give the following results.

Corollary 4.5.2 (Beta and Gamma kernels for φ -divergence). Under the assumptions of 4.5.1,

- assuming that the densities $g^{(k,l)}$ are $C^2([0, 1])$, if we replace the kernel density estimator by the Beta kernel density estimator, $\hat{Q}^c$ satisfies the assumption (*);
- assuming that the densities $g^{(k,l)}$ are $C^2([0, +\infty))$ and such that $\int (g^{(k,l)'}(x))^2 dx < \infty$ and $\int (xg^{(k,l)''}(x))^2 < \infty$, if we replace the kernel density estimator by the Gamma kernel density estimator, $\hat{Q}^c$ satisfies the assumption (*);

If we consider now the two additional assumptions needed in theorem 4.4, they are difficult to verify in a general manner.

Remark 4.10. In the case where φ is γ -Hölder for $\gamma \in (0, 1]$, the second hypothesis of Theorem 4.4 is verified.

The hypothesis 5 is more complicated to verify in a general case. However, we have noticed that convexity is a sufficient condition for it. Moreover, it is well known that a divergence is convex around θ^* so the hypothesis is verified at least locally. However, here we want to allow misspecifications in the model. Thus, we cannot restrict to this case.

That is why, we study the case of a Gaussian with known standard deviation. We derive a simple condition under which the function is convex.

Proposition 4.6. Assume that the function p_θ is the density of a Gaussian distribution with mean θ and standard deviation $\sigma > 0$. Then for any distribution F admitting a density f and finite second moment, the function $\theta \mapsto D_\gamma(F, P_\theta)$ is convex on

$$\left\{ \theta \in \mathbb{R} \mid 1 \geq \gamma \left(\frac{V_F[X]}{\sigma^2} + \left(\frac{E_F[X] - \theta}{\sigma} \right)^2 \right)^{1-\gamma} \right\} \quad (4.42)$$

where $E_F[X]$ (resp $V_F[X]$) corresponds to the mean of F (resp the variance of F).

A particular case of interest is then when there are some misspecifications in the distribution, i.e. $p = (1 - \pi)p_\theta + \pi\delta$. This clearly represents real situations where either there are misspecifications, or simply if the partition is not well estimated and all the nodes in a block (k, l) do not really belong to it.

Proposition 4.7. *Under the assumptions of proposition 4.6, if in addition, $p = (1 - \pi)p_\theta + \pi\delta$, denoting θ_δ and σ_δ the mean and standard deviation of δ , the condition 4.42 is satisfied if*

$$1 \geq \gamma \left[1 - \pi + \pi \frac{\sigma_\delta^2}{\sigma^2} + \pi(1 + \pi) \left(\frac{\theta - \theta_\delta}{\sigma} \right)^2 \right]^{1-\gamma}. \quad (4.43)$$

In the case of the BHHJ divergence, the estimator of $D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}})$ chosen as $D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}})$ is given for $a > 0$ by

$$D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) = \int p_{\theta_{kl}}^{1+a}(x)dx - \left(1 + \frac{1}{a}\right) \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij}) + \frac{1}{a} \sum_{ij} \frac{(c_{ik}c_{jl})^{1+a}}{(n_k n_l)^{1+a}}. \quad (4.44)$$

For these kinds of divergences, the criterion $\hat{Q}^c$ can thus be written as

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int p_{\theta_{kl}}^{1+a}(x)dx - \sum_{kl} \left(1 + \frac{1}{a}\right) \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n^2} p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij}) + \frac{1}{a} \sum_{kl} \frac{(n_k n_l)^{-a}}{n^2} \sum_{ij} (c_{ik}c_{jl})^{1+a}. \quad (4.45)$$

To make the computation easier, we note that as $c_{ik} \in [0, 1]$, $c_{ik}^{1+a} \leq c_{ik}$ thus the term on the right can be bounded by

$$\sum_{kl} \frac{(n_k n_l)^{1-a}}{n^2}. \quad (4.46)$$

Assuming that $n_k \propto \frac{n}{K}$, we obtain that it is bounded by $\left(\frac{K}{n}\right)^{2a}$ thus we consider this term as negligible compared to the other and in the following we consider the criterion based on the BHHJ divergence as

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int p_{\theta_{kl}}^{1+a}(x)dx - \sum_{kl} \left(1 + \frac{1}{a}\right) \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n^2} p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij}). \quad (4.47)$$

Note that even if the partition estimation may be modified by this choice, for a given partition, the estimators of the parameters remain the same.

We now consider the concentration properties of this criterion. Unlike the other pseudo-distances presented here, this one can be treated independently of theorem 4.5.

Proposition 4.8. *Assume that the distributions p_θ are bounded above by some constant M . Then the criterion defined in equation (4.47), with $a \in (0, 1]$ satisfies hypothesis (*).*

Remark 4.11. *A particular case is when the model (P_θ) is a Gaussian distribution with mean θ and fixed variance σ^2 . Under such model, the term $\int p_{\theta_{kl}}^{a+1}$ is equal to $\frac{1}{\sqrt{1+a}\sigma^{-a}}$. This term being independent of θ_{kl} , it can be removed from the optimization problem.*

Even though the estimator based on the empirical distribution is well-defined, it implies that the last term in the estimation can be neglected from the optimization. However, using as density estimate the kernel density estimator gives a result a bit different. Indeed, if we consider $a = 1$, i.e. the L^2 distance, we have

$$(n_k n_l)^4 \int f_{h_{kl}}^{(k,l)}(x)^2 dx = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l} \frac{1}{\sqrt{4\pi h_{kl}^2}} e^{-\frac{1}{4h_{kl}}(W_{ij} - W_{i'j'})^2}. \quad (4.48)$$

This implies that

$$(n_k n_l)^4 \int f_{h_{kl}}^{(k,l)}(x)^2 dx \leq \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l} \frac{1}{\sqrt{4\pi h_{kl}^2}}. \quad (4.49)$$

Now considering that the matrix $\mathbf{c} \in \{0, 1\}^{n \times K}$ and $h_{kl} = h$ for any k, l , we have that $\sum_k c_{ik}c_{i'k} = \delta_{c_i, c_{i'}}$. So it gives the upper bound

$$(n_k n_l)^4 \int f_{h_{kl}}^{(k,l)}(x)^2 dx \leq \frac{1}{\sqrt{4\pi h_{kl}^2}} \left(\sum_{i,i'} \delta_{c_i, c_{i'}} \right) \left(\sum_{i,i'} \delta_{c_i, c_{i'}} \right) = \frac{1}{\sqrt{4\pi h_{kl}^2}} \left(\sum_k n_k^2 \right)^2. \quad (4.50)$$

Such an equation is minimal when $n_k \propto \frac{n}{K}$ which leads to a term in $\frac{1}{\sqrt{4\pi h_{kl}^2}} \frac{1}{K}$. Thus, it invites taking partition

with the most number of blocks possible, unlike in the case of the empirical distribution where the equivalent terms are proportional to $\frac{K^2}{n^2}$, which is smaller for small K .

Now we consider the case of Cramér-von Mises minimum discrepancies.

Corollary 4.5.3 (Cramér-von Mises minimum discrepancies). *Let us consider*

$$D(\hat{F}, P_\theta) = \int (F_n - P_\theta)^2 w_\theta \quad . \quad (4.51)$$

Assume that $\sup_\theta \int |w_\theta(F_n - F)| \leq L < \infty$. Then $\hat{Q}^c$ with this statistic satisfies assumption (*).

Remark 4.12. The case where $w_\theta = dF_\theta$ satisfies the hypothesis, and it corresponds to the Cramér von Mises statistic. However, it is not the case of $w_\theta = \frac{P_\theta}{P_\theta(1-P_\theta)}$, which corresponds to the Anderson-Darling discrepancy.

Finally, it is easy to see that the Kolmogorov Smirnov (KS) statistic can be used.

Corollary 4.5.4 (KS statistic). *The KS statistic satisfies assumption (*).*

Note that again, the hypothesis of Theorem 4.4 are difficult to verify.

4.2.4 Optimization of the New Criteria

Optimization of $\hat{Q}^c$

While we expect theoretically this family of criteria to exhibit good properties regardless of the domain of $\mathbf{c}$, in practice, finding the optimal partition is not feasible if the c_{ik} are restricted to $\{0, 1\}$. This is because the criterion requires optimization over the space of partitions, which is an NP-hard problem (Kovalyov and Pesch, 2010). To address such challenge, much of the SBM literature relies on variational bounds, which involve finding a well-suited term to the likelihood so that the sum of the two terms is easier to optimize and offers control over the likelihood. Another approach found in the literature, especially for block models without overlapping, is to rely on a convex relaxation of the problem. Here, we focus on this approach to provide some results, particularly proposing a proximal gradient descent algorithm.

It is important to note that in many graphs, it is natural to consider $c_{ik} = I(c_i = k) \in \{0, 1\}$. However, in this paper, we consider $c_i \in \Delta$ the probability simplex. As discussed in the introduction (c.f. Section 4.2.2), this can be linked to a particular misspecified SBM.

Therefore, we aim to minimize $\hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$ with $c_{ik} \in [0, 1]$ and $\sum_k c_{ik} = 1$. We expect this approach to be particularly effective when the optimal solution belongs to $\{0, 1\}$.

To minimize this criterion, we employ a proximal gradient descent algorithm in $\mathbf{c}$. The proximal operator is used to handle the projection of the data onto the space of probability simplex. The algorithm is outlined in Algorithm 4.

Algorithm 4 Optimization of $\hat{Q}^c$

Input: A weighted matrix $\mathbf{W}$ of size $n \times n$, a number of blocks K , gradient step η , initial parameter $\mathbf{c}^{(0)}$ and number of iterations T .

Output: Optimized parameters $\mathbf{c}$ and $\boldsymbol{\theta}$.

```

1: for  $t = 1$  to  $T$  do
2:   Compute  $\theta_{kl}^{(t)} = \operatorname{argmin}_\theta D(\hat{F}^{(k,l)}(\mathbf{c}^{(t-1)}), P_\theta)$ , for  $1 \leq k, l \leq K$ .
3:   Compute  $\nabla_{\mathbf{c}} \hat{Q}^c(\mathbf{c}^{(t-1)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)})$ 
4:   for  $i = 1$  to  $n$  do
5:      $(\mathbf{c}_i^{(t)})_{1 \leq k \leq K} = \operatorname{Proj} \left( \left( \mathbf{c}^{(t-1)} - \eta \nabla_{\mathbf{c}} \hat{Q}^c(\mathbf{c}^{(t-1)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}) \right)_{i, 1 \leq k \leq K} \right)$ .
6:   end for
7: end for
8: return  $\mathbf{c}^{(T)}$  and  $\boldsymbol{\theta}^{(T)}$ .
```

where Proj is the L_2 projection on the probability simplex of size K (see for example (J. Duchi et al., 2008)).

Proposition 4.9. Assuming that $\hat{Q}^c$ is L -smooth in $\mathbf{c}$, i.e. it is twice differentiable in $\mathbf{c}$ and its derivative is L -lipschitz in $\mathbf{c}$, and that $\eta \leq \frac{1}{L}$, then Algorithm 4 converges to a local minimum of the relaxed version of the criterion $\hat{Q}^c$ (see Equation (4.17)).

Remark 4.13. The optimal parameters at each step often do not admit closed form. Thus, an additional optimization algorithm may be required to ensure their estimation.

The methods used to estimate the partition based on likelihood, such as those presented in (J. Wang et al., 2023) have complexity of $n^2 K^2$ with simple calculations at each step. The number of steps correspond in some sense to the number of iterations needed for convergence of an EM algorithm, where each M step requires a particular optimization procedure.

Consequently, to have a competitive method, we would need a method with the same orders of magnitude. However, this is not generally the case. Indeed, we have the following property, which looks at the complexity of Algorithm 4 for different divergence estimators.

Proposition 4.10. *The algorithmic complexity of Algorithm 4 with the calculation of the criterion at each step depends on the choice of pseudo-distance. In particular, for the families described in section 4.2.2, we have*

- $n^2 K^2$ for φ -divergences estimated with a kernel estimator, where each step requires the calculation of several integrals;
- $n^2 K^2$ for BHHJ divergences where all calculations are simple.
- $n^2 K^2$ for the Cramér-von Mises criterion with calculation of integrals or $n^4 K^2$ without calculation of integrals.

Thus, although having comparative complexity in cases such as φ -divergences or Cramér-von Mises discrepancies, our method takes more time than likelihood-based methods. However, BHHJ's divergence-based approach has comparable algorithmic complexity.

Optimization of $\hat{Q}^p$

This optimization problem for $\hat{Q}^p$ is equivalent to the estimation of mixture parameters based on divergences. This has been studied by different authors, see for example (Cutler and Cordero-Braña, 1996; Mohamad and Broniatowski, 2019) and reference therein.

In the case of $\hat{Q}^p$, we have

$$\operatorname{argmin}_{\pi, \theta} \hat{Q}^p(\pi, \theta) = \operatorname{argmin}_{\pi, \theta} D(\hat{P}, \sum_{kl} \pi_k \pi_l P_{\theta_{kl}}) = \operatorname{argmin}_{\pi, \theta} \sum_{kl} \pi_k \pi_l \int p_{\theta_{kl}}(x) \varphi \left(\frac{\hat{p}(x)}{\sum_{kl} \pi_k \pi_l p_{\theta_{kl}}(x)} \right) dx \quad (4.52)$$

This general case is challenging to deal with and, for this reason, we restrict ourselves to the case of γ -power divergences. In case where $\gamma \in (0, 1)$, we have

$$\begin{aligned} \operatorname{argmin}_{\pi, \theta} \hat{Q}^p(\pi, \theta) &= \operatorname{argmax}_{\pi, \theta} \sum_{kl} \pi_k \pi_l \int p_{\theta_{kl}}(x) \left(\frac{\hat{p}(x)}{\sum_{kl} \pi_k \pi_l p_{\theta_{kl}}(x)} \right)^\gamma dx \\ &= \operatorname{argmax}_{\pi, \theta} \sum_{kl} (\pi_k \pi_l)^{1-\gamma} \int p_{\theta_{kl}}(x)^{1-\gamma} (\hat{p}(x))^\gamma \left(\frac{\pi_k \pi_l p_{\theta_{kl}}(x)}{\sum_{kl} \pi_k \pi_l p_{\theta_{kl}}(x)} \right)^\gamma dx \\ &= \operatorname{argmax}_{\pi, \theta} \sum_{kl} (\pi_k \pi_l)^{1-\gamma} \int p_{\theta_{kl}}(x)^{1-\gamma} (\hat{p}(x))^\gamma a_{kl}(x)^\gamma dx \quad (4.53) \end{aligned}$$

(Cutler and Cordero-Braña, 1996) propose for the case of the Hellinger distance ($\gamma = 0.5$) to alternatively optimize the criterion at the last line of equation (4.53) in π , θ , and $\mathbf{a}(\cdot)$ as in EM-like algorithm. We provide in algorithm 5 a more general version for any value of γ between 0 and 1.

Also note that this procedure has a complexity in $n^2 K^2$ per iteration considering the complexity of optimizing functions defined through integrals and the resolution of constraints optimizations as constants. However, to the best of our knowledge, there are no convergence guarantees even to a local optimum. In addition, this formulation of the mixture model associated to the observations of the SBM is not identifiable for all the possible parametrization. For example, when $\theta = \begin{pmatrix} \theta_{in} & \theta_{out} \\ \theta_{out} & \theta_{in} \end{pmatrix}$, the algorithm cannot ensure the estimated proportions in each block correspond to the true one.

4.2.5 Model Selection for Minimum Distance Estimators

Now that we have ensured asymptotic consistency and propose algorithms to estimate the parameters of interest, another important question is how to choose the number of classes K .

In block models, there are various methods for model selection. One commonly used technique involves employing penalty terms such as those found in AIC or BIC, although modifications are often made to account for model specifications. However, when considering divergences or Cramér-von Mises discrepancy, these penalty terms are not inherently defined.

Algorithm 5 Optimization of $\hat{Q}^p$

Input: a weighted matrix $\mathbf{W}$ of size $n \times n$, a number of blocks K , an initial block proportion $\pi^{(0)}$ initial parameters values $\theta^{(0)}$ and number of iterations T .

Output: optimized parameters θ .

- 1: **for** $t = 1$ to T **do**
- 2: Set

$$a_{kl}^{(t)}(\cdot) = \frac{\pi_k^{(t-1)} \pi_l^{(t-1)} p_{\theta_{kl}^{(t-1)}}(\cdot)}{\sum_{kl} \pi_k^{(t-1)} \pi_l^{(t-1)} p_{\theta_{kl}^{(t-1)}}(\cdot)} \quad (4.54)$$

- 3: Compute

$$\theta_{kl}^{(t)} = \operatorname{argmax}_{\theta} H_{kl}^{(t)}(\theta) \quad (4.55)$$

and

$$\pi^{(t)} = \operatorname{argmin}_{\pi \in \Delta} \left\| \pi \pi^T - \left(\frac{H_{kl}^{(t)}(\theta_{kl}^{(t)})^{1/\gamma}}{\sum_{k'l'} H_{k'l'}^{(t)}(\theta_{k'l'}^{(t)})^{1/\gamma}} \right)_{kl} \right\|_2 \quad (4.56)$$

where

$$H_{kl}^{(t)}(\theta) = \int a_{kl}^{(t)}(x)^\gamma \hat{f}(x)^\gamma p_\theta^{1-\gamma} dx \quad (4.57)$$

- 4: **end for**
- 5: **return** $\theta^{(T)}$.

For maximum likelihood estimation, several model selection criteria have been proposed, including the well-known AIC and BIC. In the context of robust divergence estimation, some researchers have explored the concept of Divergence Information Criterion (DIC), which consists in studying $E[\hat{D}(F, P_\theta) | \theta = \hat{\theta}]$. For instance, (Mattheou et al., 2009) studied this concept when D is the BHHJ divergence (Basu, Harris, et al., 1998). Similarly, (Toma, 2014) investigated this idea using the dual divergence estimator proposed by (Broniatowski and Keziou, 2006) for the specific family of γ -power divergences.

Divergence Information Criterion

In this section, we simply use the notation $\hat{Q}$ instead of $\hat{Q}^c$.

We first give a general theorem for minimum distance estimators (this theorem is used by (Mattheou et al., 2009) and (Toma, 2014) for particular divergence estimators). Then we will provide examples that verify this theorem.

We also denote the pseudo distance (sometimes called overall discrepancy) $W_\theta = D(F, F_\theta)$ and its empirical version $Q_\theta = D(F_n, F_\theta)$.

Theorem 4.6 (State for particular cases by (Mattheou et al., 2009) and (Toma, 2014)). *Let $(P_\theta)_\theta$ be a parametric model with p parameters and $(f_n)_n$ a sequence of consistent density estimators of a density f . Let φ be a convex function differentiable on $\mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ such that $\varphi(1) = 0$. Assume that*

1. Q_θ and W_θ are regular enough to apply Taylor development of order 2.
2. $\psi_n(\theta^*) \xrightarrow{\mathbb{P}} \psi(\theta^*)$ and $\psi_n(\theta^*) \xrightarrow{\mathbb{P}} B(\theta^*)$, where

$$\psi_n(\theta) = \int \varphi^\sharp \left(\frac{f_n(x)}{p_\theta(x)} \right) \nabla p_\theta(x) dx \quad (4.58)$$

$\varphi^\sharp(x) = x\varphi'(x) - \varphi(x)$. Then $\hat{\theta}$ is defined such that $\psi_n(\hat{\theta}) = 0$, and $\theta^* = \operatorname{argmin}_\theta W_\theta$.

3. $n^{1/2}(\hat{\theta} - \theta^*) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{d} N(0, B^{-1}(\theta^*)V(\theta^*)B^{-1}(\theta^*))$

Then an asymptotically unbiased estimator of $W_{\hat{\theta}}$ is

$$Q_{\hat{\theta}} - \operatorname{Bias}(\theta^*) + \frac{1}{n} E[N^T B^{-1}(\theta^*) N] \quad (4.59)$$

with $N \sim N(0, V(\theta^*))$ and $\operatorname{Bias}(\theta^*) = E[Q_{\theta^*}] - W_{\theta^*}$.

Theorem 4.7. *Under the hypothesis of Theorem 4.6, assuming moreover that $F = F_{\theta^*}$ and $V(\theta^*) \stackrel{\mathbb{P}}{=} B(\theta^*)$, then*

$$Q_{\hat{\theta}_n} - \operatorname{Bias}(\theta^*) + \frac{p}{n} \quad (4.60)$$

is an asymptotic unbiased estimator of $E[W_{\hat{\theta}_n}]$ and the bias term simplifies in $Bias(\theta^*) = E[Q_{\theta^*}]$.

In particular, such results applied to the BHHJ divergence estimator considered in equation (4.47) have been studied by (Mattheou et al., 2009) and does not admit a simple form in the general case. However, in the case of a normal distribution, a possible penalty to do model selection is given by

$$\frac{(1+a)}{(2\pi)^{a/2}} \left(\frac{1+a}{1+2a} \right)^{3/2} \frac{p}{n} . \quad (4.61)$$

First, we generalized their results to general ϕ -divergences with kernel density estimators. To do so, we use the framework of (Kuchibhotla and Basu, 2015) for the class of minimum disparity estimators using kernel density estimation. Combined with our theorem 4.7, we obtain the following result.

Theorem 4.8. *Under the hypothesis (A1) to (A10) of (Kuchibhotla and Basu, 2015), assuming $\nabla^2 \Psi_n(\theta)$ is continuous and bounded in a neighborhood of θ^* for n large enough*

$$n^{1/2}(\hat{\theta}_n - \theta^*) \xrightarrow{d} N(0, B^{-1}(\theta^*)V(\theta^*)B^{-1}(\theta^*)) .$$

Corollary 4.8.1. *Under the assumptions of theorem 4.8, if $f \in (p_\theta)_{\theta \in \Theta}$, $\Theta \subset \mathbb{R}^p$, i.e. the true density belongs to the model, then*

$$Q_{\hat{\theta}_n} - Bias(\theta^*) + \frac{p}{n} \quad (4.62)$$

is an asymptotic unbiased estimator of $E[W_{\hat{\theta}_n}]$ and $Bias(\theta^*) = E[Q_{\theta^*}]$.

Proposition 4.11 (Analysis of the bias under the model). *Under the model, the bias term of a kernel density estimator is constant for fixed n , so $Q_{\hat{\theta}_n} + \frac{p}{n}$ can be used as a model selection criterion. Also, if φ is γ -Hölder,*

$$0 \leq Bias(\theta^*) \leq O(h^{2\gamma}) + O((nh)^{-\gamma}) \quad (4.63)$$

if $\int \nabla^2 f(x)dx$ is finite. Note the bias is upper bounded by $n^{-2\gamma/3}$ if $h = O(n^{-1/3})$.

Moreover, if it exists $\mu \in \mathbb{R}$ and $\sigma > 0$ such that the true distribution can be written $\frac{1}{\sigma}p(\frac{x-\mu}{\sigma})$ and $f_{\theta_0} = q(\frac{x-\mu}{\sigma})$, then the bias is independent of μ and is independent of σ if $h = \tilde{h} * \sigma$, where $\tilde{h}$ is independent of σ .

Remark 4.14. In SBM, as the bias term depends on the size of the blocks, it is not a constant anymore. However, in this setting, it is often convenient to assume that $n_k \approx \frac{n}{K}$. In addition, assuming a location-scale parametric family makes that one can bound explicitly the bias term and so use it to do model selection.

Now we are studying the Cramér-von Mises minimum discrepancy estimators. To do so, we recall the convergence results of (Ozturk and Hettmansperger, 1997).

Theorem 4.9 (Ozturk and Hettmansperger, 1997).

$$n^{1/2}(\hat{\theta}_n - \theta^*) \rightarrow N(0, B(\theta^*)^{-1}V(\theta^*)B(\theta^*)^{-1}) \quad (4.64)$$

for some matrices $B(\theta^*)$ and $V(\theta^*)$.

Corollary 4.9.1. *Using the results of (Ozturk and Hettmansperger, 1997) and of theorem 4.6, we have that an asymptotically unbiased estimator of $W_{\hat{\theta}}$ is given by*

$$Q_{\hat{\theta}} - Bias(\theta^*) + \frac{1}{n}E[N^T B^{-1}(\theta^*)N] \quad (4.65)$$

with $N \sim N(0, V(\theta^*))$.

Here, contrary to the φ -divergence case, for the Cramér-von Mises discrepancy, the bias is easy to compute while the expectation does not simplify under the model. In particular, we have the following proposition.

Proposition 4.12. *The bias terms $Bias(\theta)$ is equal to*

$$\frac{1}{n} \int w_\theta(x) F(x)(1 - F(x))dx \quad (4.66)$$

which simplifies into $\frac{1}{6n}$ if $F(x) = P_\theta(x)$.

Divergence Information Criterion with φ -Divergence under Discrete SBM

In the discrete case, as there is no kernel in the estimator, it is easier to deal with the bias term.

Proposition 4.13. *Consider a φ -divergence with φ C^2 in a neighborhood of 1, and $\dot{\varphi}(1) = 0$. Let $\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, (P_\theta), \theta^*)$, with P_θ taking $T \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ distinct values.*

For an SBM with a parametric model having p parameters, under the model, an asymptotically unbiased estimator of Q is given by

$$\hat{Q}(\mathbf{c}^*; \mathbf{W}) + (p + \dot{\varphi}(1)(1 - T)) \frac{K^2}{n^2} . \quad (4.67)$$

Model Selection Properties

Here we provide some insights on the ability of the model selection criterion. To do so, we consider an approach similar to the one described in (Claeskens and Hjort, 2001). Let K^* be the true number of blocks in the model.

If $K < K^*$ then, by hypothesis, we have that $Q_{\hat{\theta}_n(K^*)} \rightarrow 0$ while $Q_{\hat{\theta}_n(K)} \rightarrow \epsilon$, for some value $\epsilon > 0$. As both bias terms go to 0 as $n \rightarrow \infty$, the model selection procedure will select with high probability the model with K^* blocks and not the one with K .

Now we look at the situation where K is greater than K^* . In such cases, both criteria correspond to an adapted model. Thus, differencing the two cases is more difficult. Indeed, as both criterion values go to 0, it requires an analysis of the bias term, which will not be covered here.

Therefore, without further analysis, we can say that the DIC can distinguish between models with fewer blocks than required but not between models with larger numbers of blocks.

When simply looking at a sample and not a graph, penalty terms of the form $\frac{K}{n}$ are, in general, not able to select the true number of parameters in the model and other criteria have to be used (Claeskens and Hjort, 2001). This is notably the interest of BIC which is defined proportional to $\frac{K \log(n)}{n}$. Adding this factor $\log(n)$ makes the penalty a dominant term compared to the difference between criteria values.

Here, we can also modify our model selection criterion to provide a similar alternative. Assuming that the difference between the two criteria is negligible compared to the bias terms, these are the only terms of interest.

Then instead of considering a penalty terms in $\frac{K^2}{n^2}$ assuming that the bias is at most of the order $n^{-2\gamma/3}$, we consider a penalty term of the form

$$P_n(\mathbf{c}) = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} (n_k n_l)^{-2\gamma/3} \log(n) . \quad (4.68)$$

This criterion is thus larger than the bias term, and so will be the dominant term when comparing the two numbers of parameters.

In particular, as, $P_n(\mathbf{c}) \leq K^2 n^{-2\gamma/3} \log(n)$. Thus, as long as $K = o(n^{\gamma/3}/\log(n))$, this model selection criterion will allow selecting the correct number of blocks in the model with high probability for sufficiently large n . Notice that it requires $\gamma < 3/2$ so that $P_n(\mathbf{c}) \rightarrow 0$ as n goes to infinity, and so we have in all cases $K = o(\sqrt{n}/\log(n))$, which is not too restrictive as theoretical limitation on K .

In the case of the BHHJ divergence, the model selection criterion is proportional to $\frac{K^2}{n^2}$. Again, this model selection criterion will be able to differentiate models with $K < K^*$ from models having at least K^* blocks. However, when $K > K^*$, it is quite likely that the difference between the two criteria is at least of order $\frac{1}{n^2}$ thus the penalty terms not being dominant enough to select the correct model. It is possible to imagine that the DIC can be modified following the BIC approach to be able to differentiate also $K > K^*$ from K .

4.2.6 Robustness Properties

The construction of a criterion based on divergences rather than on likelihood is motivated by the expectation of having more robust estimators to deviations from the model. To quantify this, several approaches are possible. The first that we will see is a generic approach which also applies to criteria based on likelihood. It consists of expressing the probability of the same event for two different distributions as a function of the φ -divergence between the two distributions. The second approach is based on the influence function. It is a measure of the influence of a deviation from a reference model. In particular, this notion is used to evaluate the influence of the estimator in the presence of outliers.

Misspecification in Terms of Divergence

To the best of our knowledge, the first concentration result for the probability of an event E for two distributions P and Q based on divergence is given by (Makarychev et al., 2016). Their results based on the Kullback-Leibler divergence is recalled in proposition 5.25.

Proposition 4.14 (Makarychev et al., 2016). *Let two distributions P and Q on the same sample space Ω . For any event $E \subset \Omega$, we have*

$$Q(E) \leq \max \left(\frac{2KL(Q, P)}{1 - \log(P(E))}, e\sqrt{2P(E)} \right) \quad (4.69)$$

with $KL(Q, P)$, the Kullback-Leibler divergence between the distributions Q and P and $e = \exp(1)$.

This property implies that we must know the probability $P(E)$ or an upper bound as well as the value of the divergence $KL(Q, P)$. Having information about the probability $P(E)$ suggests that P is easier to handle than Q . However, $KL(Q, P)$ requires integration regarding Q which can be complex. So firstly, we propose a version of this proposition involving the reverse Kullback-Leibler divergence (RKL).

Proposition 4.15. *Let two distributions P and Q be defined on a same space Ω . For any event $E \subset \Omega$, so that $P(E) \leq 0.5$, we have*

$$Q(E) \leq \max \left\{ \left(\frac{12RKL(P, Q)}{1 - \log(P(E))} \right)^{1/4}, \sqrt{P(E)} \right\} \quad (4.70)$$

with $RKL(Q, P)$, the reverse Kullback-Leibler divergence between the distributions Q and P .

Remark 4.15. *Compared to the proposition 5.25, our proposition 4.15 may be far from optimal if we are interested in exact rate of consistency. However, when the aim is only to see that $Q(E)$ will be small when $KL(P, Q)$ and $P(E)$ are both small, then the two results are equivalent.*

However, as the Kullback-Leibler (and its reverse version) may be very sensitive to some misspecifications such as outliers, other divergences may be less affected by such deviations. To benefit from this, we generalized the above results to γ -power divergences with $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0, 1\}$.

Proposition 4.16. *Let P and Q be two distributions with the same sample space Ω . For any event $E \subset \Omega$, we have*

$$\max \left\{ 2P(E), P(E)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{\gamma(\gamma-1)}{1-2^{1-\gamma}} D_\gamma(Q, P) \right)^{1/\gamma} \right\} \geq Q(E) \quad (4.71)$$

for φ the power divergence with parameter $\gamma > 1$.

For φ the power divergence with parameter $0 < \gamma < 1$, we have

$$\max \left\{ P(E), P(E)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{\gamma(1-\gamma)}{2^{\frac{1}{1-\gamma}} - 1} D_\gamma(Q, P) \right)^{\frac{1}{\gamma}} \right\} \geq Q(E) \quad (4.72)$$

In graphs, several misspecifications can arise. A first kind of misspecification, which is the one considered by (Makarychev et al., 2016), consists in misspecification in edge labels. In particular, the idea is that distribution Q corresponds to the following process

1. a weighted adjacency matrix $\mathbf{W}^*$ is generated from a SBM,
2. the values of some coefficients of $\mathbf{W}^*$ are changed, potentially adversely, to give a new adjacency matrix $\mathbf{W}$.

There are several ways to make assumptions on the way of changing edges values (see for example (Acharya et al., 2022)). In a general manner, we can assume that there is a fraction ϵ of edges that differs from the SBM models.

Even if using the Kullback-Leibler divergence may overestimate the probability $Q(E)$, compared to other divergences, it is often easier to compute. Thus, we use it in the following.

Combining proposition 5.25 and theorem 4.3 leads to

Theorem 4.10. *Let $\mathbf{W}^*, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{SBM}(n, \Pi, (P_\theta)_{\theta \in \Theta}, \boldsymbol{\theta}^*)$. Assume that we observe a weighted graph $\mathbf{W}$ which is a misspecified version of $\mathbf{W}^*$ where a fraction t_n of the edges have been changed according to a distribution such that the Kullback-Leibler divergences of the initial value and the modified one is bounded by some constant.*

Consider a criterion of the form

$$\hat{Q}(\mathbf{c})^c = \sum_{k \leq l} \frac{n_k n_l}{n^2} \inf_{\theta_{kl}} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}). \quad (4.73)$$

Assume that:

1. for any $\epsilon > 0$, there exists $\beta \geq 0$ and n_ϵ such that for any $n > n_\epsilon$,

$$\mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} |\hat{D}(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}})| > \epsilon \right) \leq C_1 e^{-C_2 \frac{n}{K^\beta} \epsilon^2} \quad (*)$$

where C_1 and C_2 are two strictly positive constants.

2. $t_n K^\beta \log(n) \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$;
3. $\|\mathbf{F}(\mathbf{c}) - \mathbf{F}(\mathbf{c}^*)\| \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0 \Rightarrow \frac{1}{n} \|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0$.

Putting $\tilde{\mathbf{c}} = \underset{\mathbf{c}}{\operatorname{argmin}} \hat{Q}(\mathbf{c})$, we have with probability going to 1 as n goes to infinity

$$\frac{1}{n} \|\tilde{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \rightarrow 0. \quad (4.74)$$

Thus, in particular, we have that for a fixed number of blocks, the fraction of misspecified edges can grow almost to $\epsilon = o\left(\frac{\log(n)}{n}\right)$. This result is similar to the one of (Makarychev et al., 2016).

However, an SBM may differ from real graphs in other ways. For instance, (Schweinberger, 2020) highlights that real-world graphs may not satisfy the assumption of conditional independence of the graph weights.

Consider, for example, correlation matrices treated as graphs, as seen in studies like (Huang et al., 2022). In this context, the assumption of conditional independence is violated as soon as there are significant correlation coefficients between variables. For such models, the criteria can be interpreted as a marginal or composite version of the true model. Here, "composite" refers to the consideration of only marginals of the model, neglecting possible dependencies, as seen in works like (Saldaña et al., 2017). This broader perspective underscores the relevance of robustness to misspecifications in diverse applications beyond block models.

Assuming that the dependency within blocks is done according to a Gaussian Copula, we can again combine 5.25 and theorem 4.3 to deduce robustness to some misspecification.

Theorem 4.11. *Assume that we observe a weighted graph $\mathbf{W}$ with n nodes and a parametric model $(P_\theta)_{\theta \in \Theta}$ where a fraction t_n of the K blocks have within blocks dependence according to a Gaussian Copula with correlation ρ_k between all the coefficients. Denoting $C \subset \{1, \dots, K\}$, we consider thus that $\sum_{k \in C} n_k = t_n n$.*

Consider a criterion of the form

$$\hat{Q}(\mathbf{c})^c = \sum_{k \leq l} \frac{n_k n_l}{n^2} \inf_{\theta_{kl}} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}). \quad (4.75)$$

Assume that:

1. *for any $\epsilon > 0$, there exists n_ϵ such that for any $n > n_\epsilon$,*

$$\mathbb{P} \left(\sup_{\theta_{kl}} \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} |\hat{D}(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}})| > \epsilon \right) \leq C_1 e^{-C_2 n \epsilon^2} \quad (*)$$

where C_1 and C_2 are two strictly positive constants.

2. $t_n \frac{\log(n)^2}{K} \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$.
3. $\|\mathbf{F}(\mathbf{c}) - \mathbf{F}(\mathbf{c}^*)\| \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0 \Rightarrow \frac{1}{n} \|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathbb{P}} 0$.
4. $\rho_k \in [0, \rho]$, where $\rho < 1$ and is independent of n .

Putting $\tilde{\mathbf{c}} = \underset{\mathbf{c}}{\operatorname{argmin}} \hat{Q}(\mathbf{c})$, we have with probability going to 1 as n goes to infinity

$$\frac{1}{n} \|\tilde{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} \rightarrow 0. \quad (4.76)$$

Thus, when the number of blocks increases with the number of nodes and that the proportion of blocks with dependency is not too high, our method can still recover the wanted latent partition. The fact that the number of blocks has to grow to ensure recovery is not surprising. Indeed, as it grows, the proportion of the network on which misspecifications arise compared to SBM reduces.

Influence Function

Another approach to analyze the robustness properties of an estimator is to look at its influence function (Huber and Ronchetti, 2009). This consists in looking at the effect on the estimator of a small change in the data distribution. More precisely, denoting $\mathbf{T}(F)$ an estimator under distribution F , the influence function of T is defined as

$$IF(F, G) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathbf{T}((1-t)F + tG) - \mathbf{T}(F)}{t} \quad (4.77)$$

where $G = \delta_x$ for some x and $t \in (0, 1)$.

First, we consider the case where the partition c is known. In this case, assuming that the estimator is uniquely defined, we have

$$T(F)_{kl} = \operatorname{argmin}_{\theta_{kl}} D \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij}, P_{\theta_{kl}} \right) \quad (4.78)$$

To derive the influence function, we can use the same approach as the one used in the case of M-estimation (Huber and Ronchetti, 2009). This uses the fact that $T(F)_{kl}$ is defined as the solution in θ_{kl} of

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{kl}} D \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij}, P_{\theta_{kl}} \right) = \mathbf{0}^T \quad (4.79)$$

In case of γ -divergence, this becomes

$$\mathbf{0}^T = \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij} \right)^{\gamma} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.80)$$

for all k, l .

Then putting the distribution $(1-t)F + tG$ in place of F and taking the derivative in t , leads to

$$\begin{aligned} \mathbf{0}^T &= \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int (\nabla_t \mathbf{T}((1-t)F + tG))_{kl} H_{\theta} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * ((1-t)F_{ij} + tG_{ij}) \right)^{\gamma} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}}^{-\gamma} + \\ &\quad \gamma \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * (G_{ij} - F_{ij}) \right) \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * ((1-t)F_{ij} + tG_{ij}) \right)^{-\gamma} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}}^{\gamma-2} + \\ &\quad - \gamma \int (\nabla_t \mathbf{T}((1-t)F + tG))_{kl} \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}} \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}}^T p_{\mathbf{T}((1-t)F + tG)_{kl}}^{\gamma-3} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * ((1-t)F_{ij} + tG_{ij}) \right)^{-\gamma} \end{aligned} \quad (4.81)$$

Arranging the terms and taking $t \rightarrow 0^+$,

$$IF_{kl}(F, G) = \mathbf{A}_{kl}^{-1} \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * (G_{ij} - F_{ij}) \right) \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij} \right)^{\gamma-1} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.82)$$

where $\mathbf{A}_{kl}$ is assumed to be invertible and defined as

$$\mathbf{A}_{kl} = \int \left(\frac{\nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)} \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)}^T}{p_{\mathbf{T}(F)}} - \frac{1}{\gamma} H_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)} \right) \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij} \right)^{\gamma} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.83)$$

Under the model, with $\mathbf{c} = \mathbf{c}^*$, we have $F_{ij} = P_{kl}$ for $c_i = k, c_j = l$ and therefore, the influence function simplifies to

$$IF_{kl}(F, G) = \mathbf{A}_{kl}^{-1} \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * (G_{ij} - P_{kl}) \right) (K_h * P_{kl})^{\gamma-1} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.84)$$

and

$$\mathbf{A}_{kl} = \int \left(\frac{\nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)} \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)}^T}{p_{\mathbf{T}(F)}} - \frac{1}{\gamma} H_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)} \right) (K_h * P_{kl})^{\gamma} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.85)$$

And in addition, replacing G by $\delta_{\{0\}}$,

$$IF_{kl}(F, G) = \gamma \mathbf{A}_{kl}^{-1} \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} (K_h(x_0) - K_h * P_{kl}) \right) (K_h * P_{kl})^{\gamma-1} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.86)$$

Remark 4.16. In this case, assuming that $h \rightarrow 0$, this influence function shares some similarities with the one

of (Toma and Broniatowski, 2011) and (Al Mohamad, 2018). Indeed, in such cases, $\mathbf{A}_{kl}$ becomes

$$\mathbf{A}_{kl} = I(\theta) - \frac{1}{\gamma} J_{p_\theta} \quad (4.87)$$

where J_{p_θ} is the matrix of second derivative of p_θ regarding θ and $I(\theta)$ is the Fisher information matrix for $\theta = \theta_{kl}$, $1 \leq k, l \leq K$. Also

$$IF(F, G) = \mathbf{A}^{-1} \frac{\nabla p_\theta(x_0)}{p_\theta(x_0)} \quad (4.88)$$

The influence function derived by (Toma and Broniatowski, 2011) and (Al Mohamad, 2018) are respectively of the form

$$I(\theta)^{-1} \frac{\nabla p_\theta(x_0)}{p_\theta(x_0)} \text{ and } \left(I(\theta) + \frac{1}{\gamma - 1} J_{p_\theta} \right)^{-1} \frac{\nabla p_\theta(x_0)}{p_\theta(x_0)} \quad (4.89)$$

On the other hand, looking at the influence function of the partial likelihood, we can derive the influence function directly. This criterion can be written as

$$\sum_{kl} \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} \log \mathbb{P}_{\theta_{kl}}(W_{ij}) \quad (4.90)$$

For sake of simplicity, we consider the case where $\mathbb{P}_\theta$ correspond to the density of a Gaussian with mean θ and variance σ^2 . Thus, in its theoretical form, we have

$$\begin{aligned} T(F)_{kl} &= \operatorname{argmin}_\theta \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E[\log \mathbb{P}_{\theta_{kl}}(W_{ij})] \\ &= \operatorname{argmin}_\theta \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E[-\frac{1}{2\sigma^2} (W_{ij} - \theta)^2] \\ &= \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n_k n_l} E_{F_{ij}}[W_{ij}] \end{aligned} \quad (4.91)$$

Then considering $G_{ij} = \delta_{\{x_{ij}\}}$, the influence function of the profile likelihood is given by

$$IF_{kl}(F, G) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{T((1-t)F + tG)_{kl} - T(F)_{kl}}{t} = \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n_k n_l} x_{ij} \quad (4.92)$$

which as for the divergence cases depends on the outliers $\mathbf{x}$ and the difference between $\mathbf{c}$ and $\mathbf{c}^*$.

With this equation, we clearly see that if the value $x_{ij} \rightarrow \infty$, the influence function is divergent and thus the estimator is not robust (Toma and Broniatowski, 2011).

We also consider the case of the estimator derived from the BHHJ divergence given in equation (4.47). We can repeat the same analysis, leading to

$$\mathbf{0}^T = \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E_{F_{ij}}[\nabla_\theta p_{T(F)}(W_{ij}) p_{T(F)}(W_{ij})^{a-1}] \quad (4.93)$$

Again, replacing F by $(1-t)F + tG$ and taking the derivative regarding t leads to

$$\begin{aligned} \mathbf{0}^T &= \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E_{F_{ij}-G_{ij}}[\nabla_\theta p_{T((1-t)F+tG)} p_{T((1-t)F+tG)}^{a-1}] + \\ &\quad \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E_{(1-t)F+tG}[(a-1) \nabla_\theta p_{T((1-t)F+tG)} \nabla_\theta p_{T((1-t)F+tG)}^T p_{T((1-t)F+tG)}^{a-2} \nabla_t \mathbf{T}((1-t)F+tG)] + \\ &\quad \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E_{(1-t)F+tG}[H_\theta p_{T((1-t)F+tG)} p_{T((1-t)F+tG)}^{a-1} \nabla_t \mathbf{T}((1-t)F+tG)] \quad (4.94) \end{aligned}$$

Rearranging the terms and taking $t \rightarrow 0$, leads to

$$IF_{kl}(F, G) = A_{kl}^{-1} \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} \int \nabla_\theta p_{\theta_{kl}}(W_{ij}) p_{\theta_{kl}}(W_{ij})^{a-1} d(F_{ij} - G_{ij}) \quad (4.95)$$

where

$$A_{kl} = \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} E_{F_{ij}}[(1-a) \nabla_\theta p_{\theta_{kl}}(W_{ij}) p_{\theta_{kl}}(W_{ij})^{a-1} + H_\theta p_{\theta_{kl}}(W_{ij}) p_{\theta_{kl}}(W_{ij})] \quad (4.96)$$

In general, the Influence Function is used to see the potential impact of outliers in the data. However, here because of the graph structure, it can also be used to recover the results of the previous section, allowing a proportion of edges to be misspecified. Going back to equation (4.82) and assuming that for a fraction $1 - \epsilon$ of the pairs (i, j) , $G_{ij} = F_{ij}$, we have that

$$IF_{kl}(F, G) = \mathbf{A}_{kl}^{-1} \int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} \left(\sum_{ij: G_{ij} \neq F_{ij}} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * (G_{ij} - F_{ij}) \right) \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij} \right)^{\gamma-1} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma} \quad (4.97)$$

Denoting by $\mathbf{g}$ the upper bound of $\int \nabla_{\theta} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}} K_h * (G_{ij} - F_{ij}) \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} K_h * F_{ij} \right)^{\gamma-1} p_{\mathbf{T}(F)_{kl}}^{-\gamma}$ for the $ij : G_{ij} \neq F_{ij}$, it leads to

$$IF_{kl}(F, G) \leq \mathbf{A}_{kl}^{-1} \mathbf{g} \left(\sum_{ij: G_{ij} \neq F_{ij}} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} \right) \leq \epsilon \mathbf{A}_{kl}^{-1} \mathbf{g} \quad . \quad (4.98)$$

In particular, if the influence function associated to G is bounded, i.e. $\mathbf{A}^{-1} \mathbf{g}$ is bounded, then the influence function is bounded and in particular, allowing a constant fraction of misspecified edges does not change this result.

4.2.7 Conclusion

In this paper, we generalized a criterion recently proposed by (Ferraris, 2024) for estimation in SBM using divergences. Our generalization allows, on the one hand, not to be limited to the case where the weights of the edges in the graphs are discrete with a finite number of values but to consider weights with continuous laws. On the other hand, where the initial result is limited in the results to the Cressie-Read divergences, we consider the case of φ -divergences in a fairly general way, the BHHJ divergences as well as the Cramér divergences. For these different criteria, we demonstrate the convergence of the estimators without limiting ourselves to cases where the model is truly a block model. In the case where the data come from a block model, we show that the criterion then corresponds well to the latent partition and the parameters of the laws in the blocks.

To optimize these criteria and calculate the associated estimators, we propose an optimization algorithm based on a relaxed version of the problem. We demonstrate that our algorithm converges to a local minimum of the criterion despite it being non-convex. Furthermore, we calculate the complexity of the criterion and show that in particular for the divergence of BHHJ, the complexity of our algorithm is similar to that of algorithms in the literature. Furthermore, to make the method comparable to likelihood, we propose, depending on the divergence used, a model selection criterion to determine the number of blocks.

Finally, the introduction of divergences rather than using likelihood is motivated by a gain in robustness, for example to outlier values. By generalizing the results of (Makarychev et al., 2016), we demonstrate that the criterion is naturally robust to certain bad specifications of the edges and the assumption of independence of the weights conditional on the partition. Finally, we calculate the influence function for different divergences, the latter containing information on the robustness of the divergences. We show that the criterion has the same robustness properties as the chosen divergence. In particular, we illustrate this in the case of a Gaussian model with normal to illustrate the gain in comparison to the likelihood.

This work leaves several perspectives. Indeed, the proposed optimization algorithm does not converge towards a global optimum and can be very slow depending on the divergence chosen. A first avenue for improvement will be to look for an optimization method with better convergence properties or, failing that, which is faster whatever the divergence chosen.

In addition, the method aims to be able to be used in the presence of bad specifications, it is important to be able to test using the criterion whether the model is adapted to the data. This is the case, for example, for the likelihood ratio in SBM models (Y. X. R. Wang and P. J. Bickel, 2017) or even in the case of certain divergences (Broniatowski and Keziou, 2009). One perspective would therefore be to better understand the asymptotic properties of the criterion to be able to construct tests. Furthermore, this knowledge coupled with an in-depth study of the criterion bias could make it possible to refine the model selection criterion proposed in this article.

4.2.8 Proofs of the Theoretical Properties Section

Proofs of Theoretical Properties

Proof of theorem 4.3. First, we show that the criterion and a mean version of it are asymptotically close. Then we show that this implies that the argmin of the criterion is close to the true partition of the data.

Step 1:

$$\begin{aligned} |\hat{Q}^c(\mathbf{c}) - Q^c(\mathbf{c})| &= \left| \sum_{k \leq l} \frac{n_{kl}}{n^2} \left(\inf_{\theta_{kl}} D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - \inf_{\theta_{kl}} D(p^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right) \right| \\ &\leq \sum_{k \leq l} \frac{n_k n_l}{n^2} \sup_{\theta_{kl}} \left| D(\hat{F}^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D(p^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right|. \end{aligned} \quad (4.99)$$

So using a union bound, it gives for all $\epsilon > 0$

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} |\hat{Q}^c(\mathbf{c}) - Q^c(\mathbf{c})| > \epsilon \right) \leq \sum_{\mathbf{c}} \mathbb{P} \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sup_{\theta_{kl}} \left| \hat{D}(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) - D(F^{(k,l)}, P_{\theta_{kl}}) \right| > \epsilon \right). \quad (4.100)$$

By hypothesis, for any $n > n_\epsilon$,

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} |\hat{Q}^c(\mathbf{c}) - \bar{Q}^c(\mathbf{c})| > \epsilon \right) \leq C_1 K^n e^{-C_2 \frac{n^2}{K^\beta} \epsilon^2}. \quad (4.101)$$

Then, if $\frac{n}{K^\beta \log(K)} \rightarrow \infty$ this goes to 0 as n goes to infinity.

Now that we have bounded the distance between the empirical criterion and its mean version, we can study the properties of the optimal partition.

The second step of the proof is the same as the step 2 in the proof of the Theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012). $\square$

Proof of theorem 4.4. Here, we work with probability going to 1.

From the proof of theorem 4.3 we have that $\sup_{\theta} |\hat{Q}(\tilde{\mathbf{c}}, \theta) - Q(\mathbf{c}^*, \theta)| \xrightarrow{\mathbb{P}} 0$ and $\|F^{(k,l)}(\tilde{\mathbf{c}}) - F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*)\|_1 \xrightarrow{\mathbb{P}} 0$. Thus, we have

$$\sup_{\theta} |\hat{Q}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\theta}) - Q(\mathbf{c}^*, \theta^*)| \xrightarrow{\mathbb{P}} 0. \quad (4.102)$$

Applying Theorem 5.7 of (Van der Vaart, 1998) gives the result. $\square$

Proof of proposition 4.3. We proceed by contraposition, i.e. we want to show that if $\frac{1}{n}|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*|$ does not converge in probability to 0, then $\|F^{(k,l)}(\mathbf{c}) - F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*)\|$ does not converge in probability to 0.

So assuming that $\frac{1}{n}|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*|$ does not converge in probability to 0, there exist $\epsilon > 0$ and n_ϵ such that $\frac{1}{n_\epsilon}|\mathbf{c} - \mathbf{c}^*| > \epsilon$. Thus, there exists a node i with $\mathbf{c}_i^* \neq \mathbf{c}_i$. Without loss of generality we can assume that there exists $k' \neq k$ so that $c_{ik'} = c_{ik'}^* - \epsilon_{ik} = 1 - \epsilon_{ik}$ and $c_{ik} = c_{ik}^* + \epsilon_{ik} = \epsilon_{ik}$ with $\epsilon_{ik} > 0$. In other words, it means that we have moved the node i from class k' to class k . By identifiability conditions, there exists l such that $P_{k'l} \neq P_{kl}$. Then if $k \neq l$,

$$\begin{aligned} F^{(k,l)}(\mathbf{c}) &= \sum_{jj'} \frac{(c_{jk} c_{j'l})}{n_k^2} \mathbb{P}(X_{jj'} \leq x) \\ &= \frac{(c_{ik} c_{il})}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ii} \leq x) + \sum_{j \neq i} \frac{(c_{jk} c_{il})}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ji} \leq x) + \sum_{j' \neq i} \frac{(c_{ik} c_{j'l})}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ij'} \leq x) + \sum_{j \neq i, j' \neq i} \frac{(c_{jk} c_{j'l})}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{jj'} \leq x) \\ &= \frac{(c_{ik}^* c_{il}^*)}{n_k^2} \mathbb{P}(X_{ii} \leq x) - \frac{(\epsilon_{ik} c_{il}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ii} \leq x) + \sum_{j \neq i} \frac{(c_{jk}^* c_{il}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ji} \leq x) + \\ &\quad \sum_{j' \neq i} \frac{(c_{ik}^* c_{j'l}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ij'} \leq x) - \sum_{j' \neq i} \frac{(\epsilon_{ik} c_{j'l}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ij'} \leq x) + \sum_{j \neq i, j' \neq i} \frac{(c_{jk}^* c_{j'l}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{jj'} \leq x) \\ &= \sum_{j, j'} \frac{(c_{jk}^* c_{j'l}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{jj'} \leq x) - \sum_{j'} \frac{(\epsilon_{ik} c_{j'l}^*)}{n_k n_l} \mathbb{P}(X_{ij'} \leq x) \\ &= \frac{n_k^* n_l^*}{n_k n_l} P^{(k,l)}(x) - \frac{\epsilon_{ik} n_l^*}{n_k n_l} P^{(k',l)}(x). \end{aligned} \quad (4.103)$$

This corresponds to a mixture of distributions $P^{(k,l)}$ and $P^{(k',l)}$ which by the identifiability condition are different. So $\|F^{(k,l)}(\mathbf{c}) - F^{(k,l)}(\mathbf{c}^*)\| > 0$ and $\|F(\mathbf{c}) - F(\mathbf{c}^*)\| > 0$. This implies that the contraposition is true. $\square$

Proof of theorem 4.5. We start by the case 1.

Note that we do not look for tight constants in the concentration inequalities we derived here.

Let $\hat{\mu} = \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_\infty = g((X_{ij})_{ij})$. By definition of $\|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_\infty$ if we change the value of one X_{ij} , the value of $\|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_\infty$ will change by at most $\frac{1}{n_k n_l}$ so finally $g((X_{ij})_{ij})$ can change at most by $\frac{2K}{n^2}$.

Then by McDiarmind's Inequality (H. Zhang and S. X. Chen, 2021), for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(\hat{\mu} \geq \epsilon + \mu) \leq e^{-\frac{1}{2}\epsilon^2 \frac{n^2}{K^2}} \quad (4.104)$$

where $\mu = E[\hat{\mu}]$.

Moreover, using that $\mu \leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \frac{c}{\sqrt{n_k n_l}}$ leads, combined with the Cauchy-Schwartz inequality, to

$$\mu \leq c \sqrt{\left(\sum_{kl} n_k n_l\right) \left(\sum_{kl} \frac{1}{n^4}\right)} = c \frac{K}{n} \quad (4.105)$$

Thus let $\epsilon > c \frac{K}{n} \geq \mu$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\hat{\mu} \geq \epsilon) &\leq e^{-\frac{1}{2}(\epsilon - \mu)^2 \frac{n^2}{K^2}} \\ &= \exp\left(-\frac{\epsilon^2 n^2}{2K^2} + \mu \frac{\epsilon n^2}{K^2} - \frac{\mu^2 n^2}{K^2}\right) \\ &\leq \exp\left(-\frac{\epsilon^2 n^2}{2K^2} + c \frac{K}{n} \frac{\epsilon n^2}{K^2}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\epsilon^2 n^2}{K^2} \left(1 - c \frac{K}{n\epsilon}\right)\right) \end{aligned} \quad (4.106)$$

Thus, if $\frac{n\epsilon}{K} \rightarrow \infty$, $1 - c \frac{K}{n\epsilon} \geq 2$. As sufficient condition is then to take $\epsilon > \frac{K \log(n)}{n}$.

Now we look at case 2.

Following Devroye (Devroye, 1983), we have that for any $\epsilon > 0$, there exists a function g so that $g(x) \rightarrow 0$ as $x \rightarrow 0$ and for any k, l that there exists positive constants L_{kl} , R_{kl} and C_{kl} , and a partition Ψ_{kl} in disjoint intervals of $\mathbb{R}$ such that

$$\begin{aligned} \int |\hat{f}_{h_{kl}}^{(k,l)} - f^{(kl)}| &\leq L_{kl}\epsilon + g(h_{kl}) + \\ C_{kl} &\left(\sum_{B_{kl} \in \Psi_{kl}, B_{kl} \cap B(0, R_{kl}) \neq \emptyset} |\hat{F}^{(k,l)}(B_{kl}) - F^{(k,l)}(B_{kl})| + \right. \\ &\left. \left(\hat{F}^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) - F^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) \right) \right) \end{aligned} \quad (4.107)$$

with $B(0, R_{kl})$ the ball of center 0 and of radius R_{kl} .

Thus, denoting $C = \max_{kl} C_{kl}$, and $L = \max_{kl} L_{kl}$

$$\begin{aligned} \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int |\hat{f}_{h_{kl}}^{(k,l)} - f^{(kl)}| &\leq L\epsilon + g((h_{kl})_{kl}) + \\ C \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} &\left(\sum_{B_{kl} \in \Psi_{kl}, B_{kl} \cap B(0, R_{kl}) \neq \emptyset} |\hat{F}^{(k,l)}(B_{kl}) - F^{(k,l)}(B_{kl})| + \right. \\ &\left. \left(\hat{F}^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) - F^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) \right) \right) \end{aligned} \quad (4.108)$$

If we want to prove (*), assuming that the h_{kl} are small enough so that $g((h_{kl})_{kl}) = O(\epsilon)$, we just have to look at the term on the second line.

First noticing that

$$\begin{aligned}
& \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \left(\hat{F}^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) - F^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) \right) \\
&= \sum_{kl} \frac{1}{n^2} \sum_{ij} (I(X_{ij} \in B(0, R_{kl})^c) c_{ik} c_{jl} - E[I(X_{ij} \in B(0, R_{kl})^c) c_{ik} c_{jl}]) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{kl} (I(X_{ij} \in B(0, R_{kl})^c) c_{ik} c_{jl} - E[I(X_{ij} \in B(0, R_{kl})^c) c_{ik} c_{jl}]) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{kl} (I(X_{ij} \in B(0, R_{c_i c_j})^c) c_{ik} c_{jl} - E[I(X_{ij} \in B(0, R_{c_i c_j})^c) c_{ik} c_{jl}]) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{ij} (I(X_{ij} \in B(0, R_{c_i c_j})^c) - E[I(X_{ij} \in B(0, R_{c_i c_j})^c])) \quad .
\end{aligned} \tag{4.109}$$

So since the X_{ij} are independent, by Hoeffding inequality (H. Zhang and S. X. Chen, 2021), we have that

$$\mathbb{P} \left(\left| \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \left(\hat{F}^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) - F^{(k,l)}(B(0, R_{kl})^c) \right) \right| > \epsilon \right) \leq 2e^{-2n^2 \epsilon^2} \quad . \tag{4.110}$$

Now we look at $\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_{B_{kl} \in \Psi_{kl}, B_{kl} \cap B(0, R_{kl}) \neq \emptyset} |\hat{F}^{(k,l)}(B_{kl}) - F^{(k,l)}(B_{kl})|$

Let $A_{kl} = \{B_{kl} | B_{kl} \in \Psi_{kl}, B_{kl} \cap B(0, R_{kl}), \hat{F}^{(k,l)}(B_{kl}) - F^{(k,l)}(B_{kl}) \geq 0\}$.

$$\begin{aligned}
& \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_{B_{kl} \in \Psi_{kl}, B_{kl} \cap B(0, R_{kl}) \neq \emptyset} |\hat{F}^{(k,l)}(B_{kl}) - F^{(k,l)}(B_{kl})| \\
&= \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_{A \subset A_{kl}} \hat{F}^{(k,l)}(A) - F^{(k,l)}(A) \\
&\quad - \sum_{A \subset A_{kl}^c} \hat{F}^{(k,l)}(A) - F^{(k,l)}(A) \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{kl} \sum_{A \subset A_{kl}} I(X_{ij} \in A) c_{ik} c_{jl} - E[I(X_{ij} \in A) c_{ik} c_{jl}] \\
&\quad - \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{kl} \sum_{A \subset A_{kl}^c} I(X_{ij} \in A) c_{ik} c_{jl} - E[I(X_{ij} \in A) c_{ik} c_{jl}] \\
&= \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{A \subset A_{c_i, c_j}} I(X_{ij} \in A) - E[I(X_{ij} \in A)] \\
&\quad - \frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{A \subset A_{c_i, c_j}^c} I(X_{ij} \in A) - E[I(X_{ij} \in A)] \quad .
\end{aligned} \tag{4.111}$$

It is possible to analyze the two sums in the same way. The set A_{c_i, c_j} can have at most $O(h_{c_i, c_j}^{-1}) \leq O(h^{-1})$ terms,

So,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n^2} \sum_{ij} \sum_{A \subset A_{c_i, c_j}} I(X_{ij} \in A) - E[I(X_{ij} \in A)] &\leq \max_{kl} \max_{A \subset A_{kl}} \frac{1}{n^2} \left(\sum_{ij} I(X_{ij} \in A) - E[I(X_{ij} \in A)] \right) \\
&\leq 2^{LK^2/h} \mathbb{P} \left(\frac{1}{n^2} \sum_{ij} I(X_{ij} \in A) - E[I(X_{ij} \in A)] > \epsilon \right) \\
&\leq 2^{LK^2/h} e^{-\frac{2}{L^2} \epsilon^2 n^4 h^2} \\
&= e^{-\epsilon^2 n^2 \left(\frac{2}{L^2} n^2 h^2 - L \log(2) \frac{K^2}{n^2 h \epsilon^2} \right)} \quad .
\end{aligned} \tag{4.112}$$

By hypothesis, $\frac{n^4 h^3}{K^2} \rightarrow \infty$, thus for n large enough, $\left(\frac{2}{L^2} n^2 h^2 - L \frac{K^2}{n^2 h \epsilon^2} \right) > 0$, which gives the desired result. $\square$

Proof of corollary 4.5.1. Let f, p, q be three probability densities.

Since the function φ is Lipschitz,

$$\begin{aligned} |D(p, q) - D(f, q)| &= \int q \left| \varphi\left(\frac{p}{q}\right) - \varphi\left(\frac{f}{q}\right) \right| \\ &\leq \int q L \left| \frac{p}{q} - \frac{f}{q} \right| \\ &= L \int |p - f|. \end{aligned} \quad (4.113)$$

If the divergence is γ -Hölder we have from the Hölder inequality,

$$\begin{aligned} |D(p, q) - D(f, q)| &= \int q \left| \varphi\left(\frac{p}{q}\right) - \varphi\left(\frac{f}{q}\right) \right| \\ &\leq \int q L \left| \frac{p}{q} - \frac{f}{q} \right|^\gamma \\ &= L \int q^{1-\gamma} |p - f|^\gamma \\ &\leq L \left(\int q \right)^{1-\gamma} \left(\int |p - f| \right)^\gamma \\ &= L \left(\int |p - f| \right)^\gamma. \end{aligned} \quad (4.114)$$

Thus

$$\begin{aligned} \left| \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \left(D(\hat{F}^{(k,l)}, G^{(k,l)}) - D(F^{(k,l)}, G^{(k,l)}) \right) \right| &\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \left| D(\hat{F}^{(k,l)}, G^{(k,l)}) - D(F^{(k,l)}, G^{(k,l)}) \right| \\ &\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_1^\gamma L. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Since $x \mapsto x^\gamma$ is concave,

$$\left| \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \left(D(\hat{F}^{(k,l)}, G^{(k,l)}) - D(F^{(k,l)}, G^{(k,l)}) \right) \right| \leq L \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \|\hat{F}^{(k,l)} - F^{(k,l)}\|_1 \right)^\gamma. \quad (4.116)$$

Then using result 2 of the theorem 4.5 gives the result. $\square$

Proof of Proposition 4.5. The proof relies on the McDiarmind's inequality. Assuming we have a random matrix $\mathbf{W}$. To use the McDiarmind's inequality, we look at the influence of the change of the value of $W_{i',j'}$ from t to t' . Denote $\tilde{\mathbf{W}}$ the matrix such that $\tilde{W}_{ij} = W_{ij}$ for all $(i, j) \neq (i', j')$ and $\tilde{W}_{i',j'} = t'$.

Thus using that φ is Lipschitz (as it is γ -Hölder $\gamma \in (0, 1]$), there exists a constant $L_1 > 0$ such that

$$\begin{aligned} |\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W}) - \hat{Q}^c(\mathbf{c}; \tilde{\mathbf{W}})| &\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t L_1 \left| \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n_k n_l} (I(W_{ij} = t) - I(\tilde{W}_{ij} = t)) \right| \\ &= L_1 \sum_{kl} \frac{1}{n^2} \left[\left| \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} (I(W_{ij} = t) - I(\tilde{W}_{ij} = t)) \right| + \left| \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} (I(W_{ij} = t') - I(\tilde{W}_{ij} = t')) \right| \right] \\ &= L_1 \sum_{kl} \frac{1}{n^2} [|c_{i'k} c_{j'l} I(W_{i',j'} = t)| + |c_{i'k} c_{j'l} I(\tilde{W}_{i',j'} = t')|] \\ &= 2L_1 \sum_{kl} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} \\ &= \frac{2L_1}{n^2}. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Thus, we have for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(|\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W}) - E[\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W})]| > \epsilon) \leq 2e^{-\frac{n^2 \epsilon^2}{2L_1^2}}. \quad (4.118)$$

To conclude, we have to show that $E[\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W})]$ is close to $Q^c(\mathbf{c}; \mathbf{W})$. We have

$$\begin{aligned}
\left| E[\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W})] - Q^c(\mathbf{c}; \mathbf{W}) \right| &\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t g^{(k,l)}(t) E \left[\left| \varphi \left(\frac{\hat{F}^{(k,l)}(t)}{g^{(k,l)}(t)} \right) - \varphi \left(\frac{F^{(k,l)}(t)}{g^{(k,l)}(t)} \right) \right| \right] \\
&\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t E \left[\left| \hat{F}^{(k,l)}(t) - F^{(k,l)}(t) \right| \right] \\
&\leq \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t \sqrt{E \left[\left(\hat{F}^{(k,l)}(t) - F^{(k,l)}(t) \right)^2 \right]} \\
&= \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t \text{StandardDeviation}(\hat{F}^{(k,l)}(t)) \\
&= \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_t \sqrt{\frac{F^{(k,l)}(t)(1 - F^{(k,l)}(t))}{n_k n_l}} \\
&\leq \sum_{kl} \frac{\sqrt{n_k n_l}}{n^2} \\
&\leq \frac{K}{n}
\end{aligned} \tag{4.119}$$

where the last line comes from the Cauchy-Schwartz inequality.

Therefore, for any $\epsilon > 0$, there exists n_ϵ such that for any $n \geq n_\epsilon$,

$$\mathbb{P}(|\hat{Q}^c(\mathbf{c}; \mathbf{W}) - Q^c(\mathbf{c}; \mathbf{W})| > \epsilon) \leq 2e^{-\frac{n^2 \epsilon^2}{2}} . \tag{4.120}$$

□

Proof of corollary 4.5.2. The first part is the same as in the proof of corollary 4.5.1. Therefore, we just have to study the consistency of the kernel estimator.

In case of the Gamma kernel, the definition

$$f_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n G(X_i, \frac{x}{h} + 1, h) . \tag{4.121}$$

The Beta kernel estimator is defined by

$$f_n(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n B(X_i, \frac{x}{h} + 1, \frac{x}{h} + 1) . \tag{4.122}$$

We show the analysis of the Beta kernel, the case of Gamma can be achieved with the same steps.

We want to study the concentration properties of $\|f_n - f\|_1$. To do so, we look at each term

$$\int |f_n(x) - f(x)| dx \leq \int |f_n(x) - E[f_n(x)]| dx + \int |E[f_n(x)] - f(x)| dx . \tag{4.123}$$

Following (Bouezmarni and Rolin, 2003), the second term in the upper bound (4.123) is a sequence that converges toward 0 as n goes to infinity. Denoting δ_n this sequence, we thus have for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(\int |f_n(x) - f(x)| dx > \delta_n + \epsilon) \leq \mathbb{P}(\int |f_n(x) - E[f_n(x)]| dx > \epsilon) \tag{4.124}$$

So we have to look at the first term of (4.123). We have

$$|f_n(x) - E[f_n(x)]| = \int B(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1) d(F_n(t) - F(t)) = \int (F_n(t) - F(t)) dB(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1) . \tag{4.125}$$

So

$$\int |f_n(x) - E[f_n(x)]| dx \leq \|F_n - F\|_\infty \int dx \int \left| dB(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1) \right| . \tag{4.126}$$

So if we can show that $\int dy \int |dK(t, \frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})|$ is bounded, this allows us to apply the result 1 of theorem 4.5. And it concludes the proof.

$$\begin{aligned}
dB(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1) &= \frac{1}{\beta(\frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1)} t^{\frac{x}{h}-1} (1-t)^{\frac{1-x}{h}-1} \left(\frac{1-x}{h} t - \frac{x}{h} (1-t) \right) \\
&= \frac{\beta(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})}{\beta(\frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1)} \frac{1}{\beta(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})} t^{\frac{x}{h}-1} (1-t)^{\frac{1-x}{h}-1} \left(\frac{1-x}{h} t - \frac{x}{h} (1-t) \right) \\
&= \frac{\beta(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})}{\beta(\frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1)} \frac{1}{\beta(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})} t^{\frac{x}{h}-1} (1-t)^{\frac{1-x}{h}-1} \left(\frac{t-x}{h} \right) \\
&= \frac{h(1+h)}{x(1-x)} \frac{1}{\beta(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})} t^{\frac{x}{h}-1} (1-t)^{\frac{1-x}{h}-1} \left(\frac{t-x}{h} \right) \\
&= \frac{h(1+h)}{y(1-y)} \frac{1}{\beta(\frac{y}{h}, \frac{1-y}{h})} t^{\frac{x}{h}-1} (1-t)^{\frac{1-x}{h}-1} \left(\frac{t-x}{h} \right) \quad .
\end{aligned} \tag{4.127}$$

Noticing that if $Z \sim B(\frac{x}{h}, \frac{1-x}{h})$, then $E[Z] = x$ and $Var(Z) = \frac{x(1-x)h}{1+h}$, we have that

$$\int |dB(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1)| = \frac{h}{Var(Z)} E[|Z - E[Z]|] \quad . \tag{4.128}$$

By Jensen Inequality, it is well-known that $E[|Z - E[Z]|] \leq \sqrt{Var(Z)}$, so

$$\int |dB(t, \frac{x}{h} + 1, \frac{1-x}{h} + 1)| \leq \frac{h}{\sqrt{Var(Z)}} = \frac{1+h}{\sqrt{x(1-x)}} \quad . \tag{4.129}$$

Therefore, if this upper bound is integrable, we have our bound.

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{1+h}{\sqrt{x(1-x)}} dx &= \int_0^{1/2} \frac{1+h}{\sqrt{x(1-x)}} dx + \int_{1/2}^1 \frac{1+h}{\sqrt{x(1-x)}} dx \\
&= \int_0^{1/2} \frac{(1+h)\sqrt{2}}{\sqrt{x}} dx + \int_{1/2}^1 \frac{(1+h)\sqrt{2}}{\sqrt{(1-x)}} dx \\
&= 2\sqrt{2}(1+h) \int_0^{1/2} \frac{dx}{\sqrt{x}} \leq 2(1+h) \quad .
\end{aligned} \tag{4.130}$$

As $h \rightarrow 0$, for n large enough, $h \leq 1$ and so finally

$$\int |f_n(x) - E[f_n(x)]| dx \leq 4\|F_n - F_\infty\| \quad . \tag{4.131}$$

So we have for n large enough that (*) is satisfied using case of theorem 4.5. $\square$

Proof of proposition 4.6. A function of one parameter is convex if its second derivative is positive. Thus, we show that this condition implies that the second derivative is positive.

We have that for any x and θ , $\dot{p}_\theta(x) = \frac{x-\theta}{\sigma^2} p_\theta(x)$ and $\ddot{p}_\theta(x) = p_\theta(x)(-1 + (\frac{x-\theta}{\sigma^2})^2)$. Before continuing, we need to compute the second derivative H_θ . To do so

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 D_\gamma(\theta)}{d\theta^2} &= \frac{1}{\gamma-1} \int \ddot{p}_\theta \left[\left(\frac{p_\theta}{p} \right)^{\gamma-1} - 1 \right] + \int (\dot{p}_\theta)^2 p_\theta^{\gamma-2} p^{1-\gamma} \\
&= \frac{1}{1-\gamma} \int \ddot{p}_\theta - \frac{1}{1-\gamma} \int \ddot{p}_\theta \left(\frac{p_\theta}{p} \right)^{\gamma-1} + \int (\dot{p}_\theta)^2 p_\theta^{\gamma-2} p^{1-\gamma} \\
&= \frac{1}{1-\gamma} \int \frac{\ddot{p}_\theta}{p_\theta} p_\theta - \frac{1}{1-\gamma} \int \frac{\ddot{p}_\theta}{p_\theta} p_\theta^\gamma p^{1-\gamma} + \int \left(\frac{\dot{p}_\theta}{p_\theta} \right)^2 p_\theta^\gamma p^{1-\gamma} \quad .
\end{aligned} \tag{4.132}$$

Thus, we have

$$\begin{aligned}
H_\theta &= \frac{1}{1-\gamma} \left[\int \left(-1 + \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 \right) p_\theta - \int p_\theta^\gamma p^{1-\gamma} \left(-1 + \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 \right) + (1-\gamma) \int p_\theta^\gamma p^{1-\gamma} \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 \right] \\
&= \frac{1}{1-\gamma} \int [-p_\theta + p_\theta^\gamma p^{1-\gamma}] + \frac{1}{1-\gamma} \int p_\theta^\gamma \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 [p_\theta^{1-\gamma} - p^{1-\gamma} + (1-\gamma)p^{1-\gamma}] \\
&= \gamma D_\gamma(P_\theta, F) + \frac{1}{1-\gamma} \int p_\theta^\gamma \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 p_\theta^{1-\gamma} - \frac{\gamma}{1-\gamma} \int p_\theta^\gamma \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 p^{1-\gamma} \\
&= \gamma D_\gamma(P_\theta, F) + \frac{1}{\sigma^2(1-\gamma)} - \frac{\gamma}{1-\gamma} \int p_\theta^\gamma \left(\frac{x-\theta}{\sigma^2} \right)^2 p^{1-\gamma} .
\end{aligned} \tag{4.133}$$

The second term of the last equation comes from the fact that the integral corresponds to the variance of p_θ .

Using the Hölder inequality, we have

$$\begin{aligned}
-\frac{\gamma\sigma^{-4}}{1-\gamma} \int p_\theta^\gamma (x-\theta)^2 p^{1-\gamma} &\geq -\frac{\gamma\sigma^{-4}}{1-\gamma} \left(\int p (x-\theta)^2 \right)^{1-\gamma} \left(\int p_\theta (x-\theta)^2 \right)^\gamma \\
&= -\frac{\gamma\sigma^{-4}}{1-\gamma} \sigma^{2\gamma} \left(\int p (x-\theta)^2 \right)^{1-\gamma} \\
&= -\frac{\gamma\sigma^{-4}}{1-\gamma} \sigma^{2\gamma} (E_p[X^2] - 2\theta E_p[X] + \theta^2)^{1-\gamma} \\
&= -\frac{\gamma\sigma^{-4}}{1-\gamma} \sigma^{2\gamma} (V_p[X] + (\theta - E_p[X])^2)^{1-\gamma} .
\end{aligned} \tag{4.134}$$

Thus

$$H_\theta \geq \frac{1}{\sigma^2(1-\gamma)} + \gamma D_\gamma(P_\theta, F) - \frac{\gamma}{1-\gamma} \sigma^{2(\gamma-1)-2} (V_p[X] + (\theta - E_p[X])^2)^{1-\gamma} . \tag{4.135}$$

As the divergence term is always positive, this gives the result. $\square$

Proof of proposition 4.7. Using properties of mixture distributions,

$$\begin{aligned}
\frac{V_p[X]}{\sigma^2} + \left(\frac{E_p[X] - \theta}{\sigma} \right)^2 &= [(1-\pi)(\sigma^2 + \theta^2) + \pi(\sigma_\delta^2 + \theta_\delta^2) - ((1-\pi)\theta + \pi\theta_\delta)^2 + \pi^2\theta_\delta^2] \\
&= (1-\pi)\sigma^2 + (1-\pi)\theta^2 + \pi\sigma_\delta^2 + \pi\theta_\delta^2 - (1-\pi)^2\theta^2 - 2\pi(1-\pi)\theta\theta_\delta - \pi^2\theta_\delta^2 + \pi^2\theta_\delta^2 \\
&= (1-\pi)\sigma^2 + \pi\sigma_\delta^2 + \pi(\theta - \theta_\delta)^2 + 2\pi^2\theta\theta_\delta \\
&\leq (1-\pi)\sigma^2 + \pi\sigma_\delta^2 + \pi(1+\pi)(\theta - \theta_\delta)^2 .
\end{aligned} \tag{4.136}$$

Proof of proposition 4.8. First, we study the concentration properties of the criterion for a given partition $\mathbf{c}$. Using that

$$\left| \inf_{\theta} \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \theta) - \inf_{\theta} Q^c(\mathbf{c}, \theta) \right| \leq 2 \sup_{\theta} \left| \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \theta) - Q^c(\mathbf{c}, \theta) \right| \tag{4.137}$$

and as Q^c and $\hat{Q}^c$ are bounded, the $\sup$ exists. Let simply denotes it by θ .

$$\begin{aligned}
\left| \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \theta) - Q^c(\mathbf{c}, \theta) \right| &= \sup_{\theta} \left| \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int p_{\theta_{kl}}^{1+a}(x) dx - \sum_{kl} \left(1 + \frac{1}{a} \right) \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij}) \right) - \right. \\
&\quad \left. \left(\sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \int p_{\theta_{kl}}^{1+a}(x) dx - \sum_{kl} \left(1 + \frac{1}{a} \right) \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} E[p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij})] \right) \right| \\
&= \left(1 + \frac{1}{a} \right) \sup_{\theta} \left| \sum_{kl} \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} E[p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij})] - \sum_{kl} \sum_{ij} \frac{c_{ik} c_{jl}}{n^2} p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij}) \right| .
\end{aligned} \tag{4.138}$$

Then as the p_θ are bounded by M , so are the random variables $p_{\theta_{kl}}^a(W_{ij})$ ($a \in (0, 1]$). Thus using a weighted version of the Hoeffding inequality (see for example (H. Zhang and S. X. Chen, 2021) proposition 3.3), it leads

to

$$\mathbb{P} \left(\left| \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) - Q^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) \right| > \epsilon \mid \mathbf{c}^* \right) \leq 2 \exp \left(-\frac{2\epsilon^2 n^4}{M^2 (\sum_{ik} c_{ik}^2)^2} \right) \leq 2 \exp \left(-\frac{2\epsilon^2 n^4}{M^2 (\sum_{ik} c_{ik})^2} \right) \quad (4.139)$$

for any $\epsilon > 0$. This leads to

$$\mathbb{P} \left(\left| \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) - Q^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta}) \right| > \epsilon \mid \mathbf{c}^* \right) \leq 2 \exp \left(-\frac{2\epsilon^2 n^2}{M^2} \right) \quad . \quad (4.140)$$

Thus, assumption $*$ is satisfied for $\beta = 0$. $\square$

Proof of corollary 4.5.3. Noticing that $x \mapsto x^2$ is 2-Lipschitz on $[-1, 1]$, we have

$$\begin{aligned} |D(\hat{F}, P_\theta) - D(F, P_\theta)| &= \left| \int (F_n - P_\theta)^2 w_\theta - \int (F - P_\theta)^2 w_\theta \right| \\ &\leq \int |w_\theta [(F_n - P_\theta)^2 - (F - P_\theta)^2]| \\ &\leq 2 \int |w_\theta (F_n - F)| \\ &\leq 2L \|F_n - F\|_\infty \quad . \end{aligned} \quad (4.141)$$

Then we can use theorem 4.5 to conclude the proof. $\square$

Proof of corollary 4.5.4. We have that

$$\begin{aligned} |D(\hat{F}, P_\theta) - D(F, P_\theta)| &= |\sup_t |F_n(t) - P_\theta(t)| - \sup_t |F(t) - P_\theta(t)| \\ &\leq \sup_t ||F_n(t) - P_\theta(t)| - |F(t) - P_\theta(t)|| \\ &\leq \sup_t |F_n(t) - F(t)| \\ &= \|F_n - F\|_\infty \quad . \end{aligned} \quad (4.142)$$

Then using case 1 of theorem 4.5 concludes the proof. $\square$

Proof of the Optimization Section

Proof of proposition 4.9. By definition, $\hat{Q}^c(\mathbf{c}_t, \boldsymbol{\theta}_t) - \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}, \boldsymbol{\theta}_{t-1}) = \hat{Q}^c(\mathbf{c}_t, \boldsymbol{\theta}_t) - \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}, \boldsymbol{\theta}_t) + \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}, \boldsymbol{\theta}_t) - \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}, \boldsymbol{\theta}_{t-1})$. By definition, the difference on the right is negative. We omit for now $\boldsymbol{\theta}_t$ as it is fixed.

We have that the function $\hat{Q}^c$ is β -smooth regarding $\mathbf{c}_i$, for all node i (this means that the gradient of the function is β -Lipschitz). So we have from (Bubeck, 2015)

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}_t) \leq \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}) + \sum_i \nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1})^T (\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}) + \beta \sum_i \|\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}\|^2 \quad . \quad (4.143)$$

Noticing that

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{t,i} &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{q} \in \chi} \|\mathbf{q} - (\mathbf{c}_i - \eta \nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c}))\|^2 \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{q} \in \chi} 2\eta \nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c})^T (\mathbf{q} - \mathbf{c}_i) + \|\mathbf{q} - \mathbf{c}_i\|^2 \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{q} \in \mathbb{R}^K} \nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c})^T (\mathbf{q} - \mathbf{c}_i) + \frac{\|\mathbf{q} - \mathbf{c}_i\|^2}{2\eta} + h_\chi(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.144)$$

where $h_\chi(\mathbf{x}) = 0$ if $\mathbf{x} \in \chi$, $+\infty$ otherwise. Since χ is a convex set, h is convex. And so $\mathbf{c}_{t,i}$ is defined as the minimum of a non-differentiable convex function f . This means that $0 \in \partial f(\mathbf{c}_{t,i})$. And so, there exists $\mathbf{v}_i \in \partial h(\mathbf{c}_{t,i})$ such that

$$\nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c}) + \frac{1}{\eta} (\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}) + \mathbf{v}_i = \mathbf{0} \quad . \quad (4.145)$$

Thus combined with equation (4.143), it gives

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}_t) \leq \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}) - \sum_i \mathbf{v}_i^T (\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}) - \left(\frac{1}{\eta} - \beta \right) \|\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}\|^2 \quad . \quad (4.146)$$

Noticing that by the definition of $\mathbf{v}_i$, $-\mathbf{v}_i^T(\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}) \leq h_\chi(\mathbf{c}_{t-1,i}) - h_\chi(\mathbf{c}_{t,i}) = 0$, so

$$\hat{Q}^c(\mathbf{c}_t) \leq \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}) - \frac{1}{\eta}(1 - \beta\eta)\|\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}\|^2. \quad (4.147)$$

Thus we have $\hat{Q}^c(\mathbf{c}_t, \boldsymbol{\theta}_t) \leq \hat{Q}^c(\mathbf{c}_{t-1}, \boldsymbol{\theta}_{t-1}) - \frac{1}{\eta}(1 - \beta\eta)\|\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}\|^2$. So each iteration decreases the criterion with equality if and only if for all i , $\|\mathbf{c}_{t,i} - \mathbf{c}_{t-1,i}\|^2$ and so $\nabla_i Q_n(\mathbf{c}) + \mathbf{v}_i = 0$.

Since χ is a compact set and that $\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta} \mapsto \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$ is continuous and lower bounded, the sequence $(\mathbf{c}_t, \boldsymbol{\theta}_t)_t$ converges to a limit $\mathbf{c}^*, \boldsymbol{\theta}^*$. By definition, $\mathbf{c}^*$ satisfies $Proj(\mathbf{c}_i^* - \eta \nabla_i Q_n(\mathbf{c}^*)) = \mathbf{c}_i^*$, so it is a fixed point for the update rule and so is $\boldsymbol{\theta}$. Moreover, for any i $\nabla_i \hat{Q}^c(\mathbf{c}^*, \boldsymbol{\theta}^*) + \mathbf{v}_i = \mathbf{0}$, for some $\mathbf{v}_i \in \partial h_\chi(\mathbf{c}_i^*)$.

This implies that $\mathbf{c}^*, \boldsymbol{\theta}^*$ is a local optimum of the function $\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta} \mapsto \hat{Q}^c(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$. $\square$

Proof of proposition 4.10. To demonstrate those results, we compute the derivative of the criterion in each case. Before looking at each criterion separately, we consider the general form.

First, we compute the $\frac{\partial p^{l,l'}}{\partial c_{ik}}$. We denote $K_{jj'}$ as one of $\{K_h(x - X_{jj'}), I(X_{jj'} \leq x)\}$.

$$p^{(l,l')} = \frac{1}{n_l n_{l'}} \sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \quad (4.148)$$

We have

$$\frac{\partial p^{l,l'}}{\partial c_{ik}} = - \left(\sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \right) \frac{\partial n_l n_{l'}}{\partial c_{ik}} \frac{1}{(n_l n_{l'})^2} + \frac{\partial}{\partial c_{ik}} \left(\sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \right) \frac{1}{n_l n_{l'}} \quad (4.149)$$

We look at $\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \left(\sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \right)$. We write

$$\begin{aligned} \sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} &= c_{il} c_{il'} K_{ii} \quad (A) \\ &+ \sum_{j \neq i} c_{jl} c_{il'} K_{ji} \quad (B) \\ &+ \sum_{j' \neq i} c_{il} c_{j'l'} K_{ij'} \quad (C) \\ &+ \sum_{j \neq i, j' \neq i} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \quad (D) \end{aligned} \quad (4.150)$$

Clearly, $\frac{\partial(D)}{\partial c_{ik}} = 0$. Moreover

$$\frac{\partial(A)}{\partial c_{ik}} = \begin{cases} 0 & k \neq l, k \neq l' \\ 2c_{ik} K_{ii} & k = l = l' \\ c_{il'} K_{ii} & k = l, k \neq l' \\ c_{il} K_{ii} & k \neq l, k = l' \end{cases} \quad (4.151)$$

$$\frac{\partial(B)}{\partial c_{ik}} = \begin{cases} 0 & k \neq l, k \neq l' \\ \sum_{j \neq i} c_{jk} K_{ji} & k = l = l' \\ 0 & k = l, k \neq l' \\ \sum_{j \neq i} c_{j'l'} K_{ji} & k \neq l, k = l' \end{cases} \quad (4.152)$$

$$\frac{\partial(C)}{\partial c_{ik}} = \begin{cases} 0 & k \neq l, k \neq l' \\ \sum_{j' \neq i} c_{j'k} K_{ij'} & k = l = l' \\ \sum_{j' \neq i} c_{j'l'} K_{ij'} & k = l, k \neq l' \\ 0 & k \neq l, k = l' \end{cases} \quad (4.153)$$

and so

$$\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \left(\sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \right) = \begin{cases} 0 & k \neq l, k \neq l' \\ \sum_j c_{jk} K_{ji} + \sum_{j'} c_{j'k} K_{ij'} & k = l = l' \\ \sum_{j'} c_{j'l'} K_{ij'} & k = l, k \neq l' \\ \sum_j c_{jk} K_{ji} + \sum_{j'} c_{j'l'} K_{ij'} & k \neq l, k \neq l' \end{cases} . \quad (4.154)$$

Denoting $D^{(l,l')} = \int \varphi(p^{(l,l')})$, which covers both φ -divergences and Cramér-von Mises discrepancies by using $\varphi^{k,l}(x) = (x - P_{\theta_{kl}})w_{\theta_{kl}}$ (for sake of simplicity, we focus on the case where the φ does not depend on the blocks, but it remains true in the more general case). This gives,

$$\frac{\partial D^{(l,l')}}{\partial c_{ik}} = \frac{1}{n_l n_{l'}} \left[-\frac{\partial(n_l n_{l'})}{\partial c_{ik}} \int p^{(l,l')} \dot{\varphi}(p^{(l,l')}) + \int \left(\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \sum_{jj'} c_{jl} c_{j'l'} K_{jj'} \right) \dot{\varphi}(p^{(l,l')}) \right] . \quad (4.155)$$

Now we can give the complete derivative of Q :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_n}{\partial c_{ik}} &= 2 \frac{\partial n_k}{\partial c_{ik}} D_{kk} + \left[-\frac{\partial(n_k^2)}{\partial c_{ik}} \int p^{(k,k)} \dot{\varphi}(p^{(k,k)}) + \int \left(\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \sum_{jj'} c_{jk} c_{j'k} K_{jj'} \right) \dot{\varphi}(p^{(k,k)}) \right] \\ &+ \sum_{l \neq k} n_l D_{lk} + \sum_{l \neq k} \left[-\frac{\partial n_l n_k}{\partial c_{ik}} \int p^{(l,k)} \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) + \int \left(\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \sum_{jj'} c_{jl} c_{j'k} K_{jj'} \right) \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) \right] \\ &+ \sum_{l' \neq k} n_{l'} D_{kl'} + \sum_{l' \neq k} \left[-\frac{\partial n_k n_{l'}}{\partial c_{ik}} \int p^{(k,l')} \dot{\varphi}(p^{(k,l')}) + \int \left(\frac{\partial}{\partial c_{ik}} \sum_{jj'} c_{jk} c_{j'l'} K_{jj'} \right) \dot{\varphi}(p^{(k,l')}) \right] \\ &= \sum_l n_l D_{lk} + \sum_{l'} n_{l'} D_{kl'} - \left(\sum_l n_l \int p^{(l,k)} \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) + \sum_{l'} n_{l'} \int p^{(k,l')} \dot{\varphi}(p^{(k,l')}) \right) \\ &+ \left(\sum_l \int \left(\sum_j c_{jl} K_{ji} \right) \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) + \sum_{l'} \int \left(\sum_{j'} c_{j'l'} K_{ij'} \right) \dot{\varphi}(p^{(k,l')}) \right) . \end{aligned} \quad (4.156)$$

In case where there is a symmetry between k and l , we have

$$\frac{\partial Q_n}{\partial c_{ik}} = 2 \left[\sum_l n_l D_{lk} + \sum_l \int \left(\sum_j c_{jl} K_{ji} \right) \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) - \sum_l n_l \int p^{(l,k)} \dot{\varphi}(p^{(l,k)}) \right] . \quad (4.157)$$

This gives directly the result for the estimator using kernel density estimation. For each of the $n \times K$, c_{ik} it requires an integral of a sum of nK terms. Furthermore, it requires the calculation of the criteria D_{lk} thus the computation is in $n^2 K^2$ but requires computing several integrals.

In case of the Cramér-von Mises, we can go further to remove the integrals.

This is a bit more complex as a natural φ choice would be $(x - 1)^2 w_{\theta_{ll'}} p_{\theta_{ll'}}$. However, this time the function depends on the block (l, l') . Taking this as function, however, does not change the previous calculation, except in adding a terms $w_{\theta_{ll'}} p_{\theta_{ll'}}$ in each sums of equation (4.157). As, $K_{ij}(x) = I(X_{ij} \leq x)$ and $\varphi(x) = (x - P_{\theta_{kl}})^2 p_{\theta_{kl}}$, this leads to,

$$\frac{\partial Q_n}{\partial c_{ik}} = 2 \left[\sum_l n_l D_{lk} + 2 \sum_l \int \left(\sum_j c_{jl} K_{ji} \right) (P^{(l,k)} - P_{\theta_{lk}}) w_{\theta_{lk}} - 2 \sum_l n_l \int P^{(l,k)} (P^{(l,k)} - P_{\theta_{lk}}) w_{\theta_{lk}} \right] . \quad (4.158)$$

To remove the integral, we replace the K_{ij} by their expressions, we consider a block k, l .

$$\begin{aligned}
D^{k,l} &= \int \left(\sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} I(X_{ij} \leq x) - P_{\theta_{kl}}(x) \right)^2 p_{\theta_{kl}}(x) dx \\
&= \int \sum_{ij} \left(\frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} I(X_{ij} \leq x) \right)^2 p_{\theta_{kl}}(x) dx - 2 \int \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} I(X_{ij} \leq x) P_{\theta_{kl}}(x) p_{\theta_{kl}}(x) dx + \int (P_{\theta_{kl}}(x))^2 p_{\theta_{kl}}(x) dx \\
&= \sum_{ij} \sum_{i'j'} \frac{c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l}}{(n_k n_l)^2} (1 - P_{\theta_{kl}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\})) - \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} (1 - P_{\theta_{kl}}(X_{ij})^2) + \frac{1}{3} \\
&= \frac{1}{3} + \sum_{ij} \frac{c_{ik}c_{jl}}{n_k n_l} P_{\theta_{kl}}(X_{ij})^2 - \sum_{ij} \sum_{i'j'} \frac{c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l}}{(n_k n_l)^2} P_{\theta_{kl}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\}) \quad .
\end{aligned} \tag{4.159}$$

The same can be done with the equation of the gradient. From equation 4.157, using the particularity of the Cramér-von Mises distance, where $w_\theta = p_\theta$,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q_n}{\partial c_{ik}} &= 2 \left[\sum_l n_l D_{lk} + 2 \sum_l \int \left(\sum_j c_{jl} I(X_{ji} \leq \cdot) \right) (P^{(l,k)} - P_{\theta_{lk}}) p_{\theta_{lk}} - 2 \sum_l n_l \int P^{(l,k)} (P^{(l,k)} - P_{\theta_{lk}}) p_{\theta_{lk}} \right] \\
&= 2 \left[\sum_l n_l D_{lk} + 2 \sum_l \int \left(\sum_j c_{jl} I(X_{ji} \leq \cdot) P^{(l,k)} - \sum_j c_{jl} I(X_{ji} \leq \cdot) P_{\theta_{lk}} \right) p_{\theta_{lk}} - 2 \sum_l n_l \int (P^{(l,k)^2} - \right. \\
&\quad \left. P^{(l,k)} P_{\theta_{lk}}) p_{\theta_{lk}} \right] \\
&= 2 \sum_l n_l D_{lk} + 4 \sum_l \sum_j c_{jl} \int I(X_{ji} \leq x) \sum_{i'j'} \frac{c_{i'k}c_{j'l}}{n_k n_l} I(X_{i'j'} \leq x) p_{\theta_{kl}} - \\
&\quad 4 \sum_l \sum_j c_{jl} \int I(X_{ij} \leq \cdot) P_{\theta_{kl}} p_{\theta_{kl}} - 4 \sum_l n_l \int (P^{(l,k)} p_{\theta_{lk}} + 4 \sum_l n_l \int \sum_{i'j'} I(X_{ji} \leq \cdot) P_{\theta_{lk}} p_{\theta_{lk}} \\
&= 2 \sum_l n_l D_{lk} + 4 \sum_{l,j} \sum_{i',j'} c_{jl} \frac{c_{i'k}c_{j'l}}{n_k n_l} [1 - P_{\theta_{lk}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\})] - 4 \sum_{l,j} c_{jl} [1 - P_{\theta_{lk}}(X_{ij})^2] \\
&\quad - 4 \sum_l n_l \sum_{i',j',\tilde{i},\tilde{j}} \frac{c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l}}{(n_k n_l)^2} [1 - P_{\theta_{lk}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\})] + 4 \sum_l n_l \sum_{i'j'} \frac{c_{i'k}c_{j'l}}{n_k n_l} [1 - P_{\theta_{lk}}(X_{i'j'})^2] \\
&= 2 \sum_l n_l D_{lk} - 4 \sum_{l,j} \sum_{i',j'} c_{jl} \frac{c_{i'k}c_{j'l}}{n_k n_l} P_{\theta_{lk}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\}) + 4 \sum_{l,j} c_{jl} P_{\theta_{lk}}(X_{ij})^2 \\
&\quad + 4 \sum_l n_l \sum_{i',j',\tilde{i},\tilde{j}} \frac{c_{ik}c_{jl}c_{i'k}c_{j'l}}{(n_k n_l)^2} P_{\theta_{lk}}(\max\{X_{ij}, X_{i'j'}\}) - 4 \sum_l n_l \sum_{i'j'} \frac{c_{i'k}c_{j'l}}{n_k n_l} P_{\theta_{lk}}(X_{i'j'})^2 \quad .
\end{aligned} \tag{4.160}$$

Thus, the cost of removing the integrals in the formulation leads to a cost in $K^2 n^4$. However, as we may expect the c_{ik} to be sparse, in the sense that for a node i the number of values k such that $c_{ik} \neq 0$ may be small. Thus, it is probable that we can still improve the computation of the gradient, reducing then its algorithmic complexity.

Note also that for both the kernel density-based divergence estimator and the Cramér-von Mises cases, the complexity of the estimation of the model parameters at each step has the same complexity of optimizing K^2 functions requiring n^2 operations and defined by an integral.

Last, we now look at the criterion based on BHHJ divergence

$$\frac{n_k n_l}{n^2} \int p_{\theta_{kl}}^{1+a} - \left(1 + \frac{1}{a}\right) \sum_{kl} \frac{n_k n_l}{n^2} \sum_{ij} c_{ik} c_{jl} p_{\theta_{kl}}(W_{ij})^a \quad . \tag{4.161}$$

It is easy to see that the gradient regarding c_{ik} requires only nK operations, thus in total corresponds to $n^2 K^2$ simple operations. In addition, computing the criterion requires $n^2 K^2$ iterations. $\square$

Proof of Model Selection Section

Proof of theorem 4.6.

$$\begin{aligned}
W_{\hat{\theta}} &= W_{\theta^*} + (\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \psi(\theta^*) + \frac{1}{2}(\hat{\theta}_n - \theta^*)^T B(\theta^*)(\hat{\theta}_n - \theta^*) + o(\|\hat{\theta}_n - \theta^*\|^2) \\
&= Q_{\theta^*} - (Q_{\theta^*} - W_{\theta^*}) + (\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \psi(\theta^*) + \frac{1}{2}(\hat{\theta}_n - \theta^*)^T B(\theta^*)(\hat{\theta}_n - \theta^*) + o(\|\hat{\theta}_n - \theta^*\|^2) \\
&\stackrel{\mathbb{P}}{=} W_{\theta^*} - (Q_{\theta^*} - W_{\theta^*}) + (\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \psi_n(\theta^*) + \frac{1}{2}(\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \nabla \psi_n(\theta^*)(\hat{\theta}_n - \theta^*) + o(\|\hat{\theta}_n - \theta^*\|^2) \\
&= Q_{\hat{\theta}_n} - (Q_{\theta^*} - W_{\theta^*}) + (\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \nabla \psi_n(\hat{\theta}_n - \theta^*) + o(\|\hat{\theta}_n - \theta_0\|^2) \\
&= Q_{\hat{\theta}_n} - (Q_{\theta^*} - W_{\theta^*}) + (\hat{\theta}_n - \theta^*)^T \nabla \psi(\hat{\theta}_n - \theta^*) + o(\|\hat{\theta}_n - \theta^*\|^2) .
\end{aligned} \tag{4.162}$$

The first line is the application of Taylor development, the third by hypothesis 2 and the penultimate line again by Taylor development. Now taking the expectation and using hypothesis 3, gives

$$E[W_{\hat{\theta}}] = E[Q_{\hat{\theta}_n}] - Bias(\theta^*) + \frac{1}{n}E[N^T B(\theta^*)^{-1}N] . \tag{4.163}$$

□

Proof of theorem 4.7. First, note that $\|\hat{\theta}_n - \theta^*\|^2 \rightarrow 0$. Moreover since $B(\theta^*) = V(\theta^*)$,

$$N^T B(\theta^*)N = N(0, B(\theta^*))B(\theta^*)^{-1}N(0, B(\theta^*)) = N(0, I)N(0, I) = \chi^2(p) . \tag{4.164}$$

Moreover, by definition of the divergence $W_{\theta^*} = 0$.

□

Proof of theorem 4.8.1. Under the model, $f = p_{\theta^*}$ so $V(\theta^*) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} I(\theta^*)$ and $B(\theta^*) = I(\theta_0)$. So $N^T B^{-1}N \sim C''(0)\chi^2(p)$, which is uniformly integrable and $E[\chi^2(p)] = p$. Moreover, $W_{\theta_0} = 0$.

□

Proof of proposition 4.11. Under the model, we can rewrite Q_{θ^*} as $\int \varphi(\frac{f_n}{f})f$ since $p_{\theta^*} = f$. Moreover, the estimator f_n is independent of the model $(p_{\theta})_{\theta \in \Theta}$, so Q_{θ^*} is independent of the model and so is constant for fixed n .

Moreover,

$$Bias(\theta^*) = E[D(F_n, P_{\theta^*})] - D(F, P_{\theta^*}) = E[D(F_n, P_{\theta^*})] - D(E[F_n], P_{\theta^*}) + D(E[F_n], P_{\theta^*}) - D(F, P_{\theta^*}) . \tag{4.165}$$

Using Jensen inequality and the fact that under the model $D(F, P_{\theta^*}) = 0$, we have $Bias(\theta^*) \geq 0$.

For the difference on the right hand side, as φ is Hölder, a second order Taylor expansion gives

$$\begin{aligned}
D(E[F_n], P_{\theta^*}) - D(F, P_{\theta^*}) &\leq L \int |E[f_n(x)] - f(x)|^\gamma f(x)^{1-\gamma} dx \\
&= L \int \sigma_K^{2\gamma} h^{2\gamma} \int |\nabla^2 f(x)|^\gamma f(x)^{1-\gamma} dx \\
&= O(h^{2\gamma})
\end{aligned} \tag{4.166}$$

where $\sigma_K^2 = \frac{1}{2} \int x^2 K(x) dx$.

For the difference on the left hand side, using that φ is Hölder and a normal approximation of the kernel estimator leads to

$$\begin{aligned}
E[D(F_n, P_{\theta^*})] - D(E[F_n], P_{\theta^*}) &\leq L \int E[|f_n(x) - E[f_n(x)]|^\gamma] f^{1-\gamma}(x) dx \\
&= L_\gamma \int \left(\frac{f(x)}{nh} \right)^\gamma f^{1-\gamma}(x) dx \\
&= O((nh)^{-\gamma}) .
\end{aligned} \tag{4.167}$$

Therefore, $Bias(\theta^*) \leq O(h^{2\gamma}) + O((nh)^{-\gamma})$. This upper bound is optimal when $h = O(n^{1/3})$.

For the second part of the proposition, assuming that X has density $\frac{1}{\sigma}p(\frac{\cdot - \mu}{\sigma})$ implies that $X \stackrel{d}{\sim} \mu + \sigma Y$, Y

having for density p . We have

$$\begin{aligned}
 f_n(\mu + \sigma x) &= f_h^{(X)}(\mu + \sigma x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{\mu + \sigma x - X_i}{h}\right) \\
 &= \frac{1}{n\tilde{h}\sigma} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x}{\tilde{h}} + \frac{\mu - X_i}{\sigma\tilde{h}}\right) \\
 &= \frac{1}{n\tilde{h}\sigma} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - Y_i}{\tilde{h}}\right) \\
 &= \frac{1}{\sigma} f_{\tilde{h}}^{(Y)}(x) \quad .
 \end{aligned}$$

And so

$$\begin{aligned}
 D(f_h^{(X)}, f_{\theta^*}) &= \int \varphi\left(\frac{f_h^{(X)}(x)\sigma}{q\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)}\right) \frac{1}{\sigma} q\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) dx \\
 &= \int \varphi\left(\frac{f_h^{(X)}(x\sigma + \mu)\sigma}{q(x)}\right) q(x) dx \\
 &= \int \varphi\left(\frac{f_{\tilde{h}}^{(Y)}(x)}{q(x)}\right) q(x) dx \\
 &= D(f_{\tilde{h}}^{(Y)}, q) \quad .
 \end{aligned}$$

So clearly $E[D(f_h^{(X)}, f_{\theta^*})]$ is a function of p , q and $\tilde{h}$ which is independent of μ and independent of σ if $\tilde{h}$ does not depend on it. $\square$

Proof of proposition 4.12.

$$\begin{aligned}
 Bias(\theta) &= E\left[\int (F_n(x) - P_\theta(x))^2 w_\theta(x) dx\right] - \int (F(x) - P_\theta(x))^2 w_\theta(x) dx \\
 &= \int E[(F_n(x) - P_\theta(x))^2] w_\theta(x) dx - \int (E[F_n(x)] - P_\theta(x))^2 w_\theta(x) dx \\
 &= \int w_\theta(x) Var(F_n(x)) dx \\
 &= \frac{1}{n} \int w_\theta(x) F(x)(1 - F(x)) dx \quad .
 \end{aligned} \tag{4.168}$$

Under the model, we have $w_\theta = p_\theta = f$. The bias can then be integrated and reduces to $\frac{1}{6n}$, independently of the value of θ . $\square$

Proof of proposition 4.13. Recall that in this case, we consider the divergence between the target distribution $(p_k)_k$ and the empirical distribution $(\hat{\pi}_k)_k$, i.e. $D_\varphi(p, \hat{\pi}) = \sum_k \hat{\pi}_k \varphi\left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k}\right)$, with the convention $0 \times \varphi\left(\frac{\cdot}{0}\right) = 0$.

The bias term as the form $E[D_\varphi(p, \hat{\pi})] - \lambda$, where $\lambda \geq 0$, and $\lambda = 0$ if and only if we are under the model. Our model selection penalty thus has, under the model, the form

$$p \frac{K^2}{n^2} - E[D_\varphi(p, \hat{\pi})] \quad . \tag{4.169}$$

We start by giving an approximation of the bias term in case of discrete divergence under the model.

By the Taylor Lagrange theorem,

$$\varphi\left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k}\right) = \varphi(1) + \dot{\varphi}(1) \left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k} - 1\right) + \ddot{\varphi}(c_k) \left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k} - 1\right)^2 \tag{4.170}$$

where c_k is between 1 and $\frac{p_k}{\hat{\pi}_k}$. By definition of φ , $\varphi(1) = 0 = \dot{\varphi}(1)$ and $\ddot{\varphi}(c) \geq 0$. Thus there exists some value $a_k \geq 0$ such that $\varphi\left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k}\right) = a_k \left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k} - 1\right)^2$.

Note that as $\frac{\hat{\pi}_k}{p_k}$ converges in probability to 1, thus a_k converges in probability to $\ddot{\varphi}(1)$ as $\ddot{\varphi}$ is continuous.

Therefore, with probability going to 1,

$$\begin{aligned}
 0 \leq \text{Bias} &= \ddot{\varphi}(1)E \left[\sum_k p_k \left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k} - 1 \right)^2 \right] \\
 &= \ddot{\varphi}(1) \sum_k p_k V \left(\frac{\hat{\pi}_k}{p_k} \right) \\
 &= \ddot{\varphi}(1) \sum_k p_k \frac{p_k(1-p_k)}{p_k^2 n} \\
 &= \frac{\ddot{\varphi}(1)(T-1)}{n} .
 \end{aligned} \tag{4.171}$$

So finally, the penalty for a model with K blocks has the form

$$p \frac{K^2}{n^2} - \frac{K^2(T-1)\ddot{\varphi}(1)}{n^2} . \tag{4.172}$$

□

Proof of proposition 4.15. From the Jensen inequality, we have that

$$KL(P, Q) \geq P(E) \log \left(\frac{P(E)}{Q(E)} \right) + (1 - P(E)) \log \left(\frac{1 - P(E)}{1 - Q(E)} \right) . \tag{4.173}$$

To show the equation 4.70, we will study the variations of the function

$$y \in (0, 1) \mapsto f(y) = x \log \left(\frac{x}{y} \right) + (1 - x) \log \left(\frac{1 - x}{1 - y} \right) - \frac{y^4}{12} (1 - \log(x)) \tag{4.174}$$

where $x \in [0, 0.5]$. This simply correspond to equation (4.173) where $x = P(E)$ and $y = Q(E)$. Proceeding this way, we expect to find an easier form for the lower bound.

We have

$$f'(y) = \frac{x}{y} + \frac{1 - x}{1 - y} + \frac{y^3}{3} (1 - \log(x)) \tag{4.175}$$

and

$$f''(y) = \frac{x}{y^2} + \frac{1 - x}{(1 - y)^2} - y^2 (1 - \log(x)) . \tag{4.176}$$

Using the software Mapple, we see that $f''(y) \geq 0$ for any tuple (x, y) . Thus, the function f' is increasing. Taking $y \geq \sqrt{x}$, this leads to

$$f'(y) \geq f'(\sqrt{x}) = -\sqrt{x} + \frac{1 - x}{1 - \sqrt{x}} - \frac{x^{3/2}}{3} (1 - \log(x)) = 1 - \frac{x^{3/2}}{3} (1 - \log(x)) \geq 1 - \frac{\sqrt{x}}{3} \geq 0 . \tag{4.177}$$

The second equality comes from $1 - x = (1 - \sqrt{x})(1 + \sqrt{x})$ and the inequality from the fact that $\log(x) - 1 \geq -\frac{1}{x}$.

Then we also have that f is increasing if $y \geq \sqrt{x}$. And from the software Mapple, the function

$$f(\sqrt{x}) = x \log(\sqrt{x}) + (1 - x) \log(1 + \sqrt{x}) - \frac{x^2}{12} (1 - \log(x)) \tag{4.178}$$

is greater or equal to 0 as long as $x \leq 0.5$.

Thus, $f(y) \geq 0$ for any $y \geq \sqrt{x}$ when $x \leq 0.5$. Combining this with equation (4.173), it leads that $P(E) \leq 0.5$ implies either $Q(E) < \sqrt{P(E)}$ or $KL(P, Q) \geq \frac{Q(E)^4}{12} (1 - \log(P(E)))$. Rearranging the terms leads to the wanted results. □

Proof of proposition 4.16. Let $(E_i)_i$ be a disjoint partition of the space. Since φ is convex, we get by Jensen inequality :

$$D_\varphi(Q, P) = \sum_i \int_{\sigma \in E_i} \varphi \left(\frac{dQ}{dP} \right) dP = \sum_i P(E_i) \int_{\sigma \in E_i} \frac{dP}{P(E_i)} \varphi \left(\frac{dQ}{dP} \right) \geq \sum_i P(E_i) \varphi \left(\frac{Q(E_i)}{P(E_i)} \right) . \tag{4.179}$$

Applying this to $\Omega = E \cup E^c$, it gives

$$D_\varphi(Q, P) \geq P(E)\varphi\left(\frac{Q(E)}{P(E)}\right) + (1 - P(E))\varphi\left(\frac{1 - Q(E)}{1 - P(E)}\right) \quad (4.180)$$

Now, we look for to replace the right term by a simple function which relates $P(E)$ and $Q(E)$. As we restrict to Cressie-Read divergences, the function φ as simple form $\varphi(x) = \frac{x^{\gamma-\gamma x+\gamma-1}}{\gamma(\gamma-1)}$. A particularity of this class of divergences is that for a parameter γ the divergence is the same as the one with $\varphi(x) = \frac{x^{\gamma-1}}{\gamma(\gamma-1)}$. Thus in the remainder of the proof, we consider this simpler expression for the function φ .

Now, replacing φ by its expression in 4.180 leads to

$$\begin{aligned} D_\varphi(Q, P) &\geq P(E)\varphi\left(\frac{Q(E)}{P(E)}\right) + (1 - P(E))\varphi\left(\frac{1 - Q(E)}{1 - P(E)}\right) \\ &= \frac{P(E)}{\gamma(\gamma-1)} \left(\left(\frac{Q(E)}{P(E)}\right)^\gamma - 1 \right) + \frac{1 - P(E)}{\gamma(\gamma-1)} \left(\left(\frac{1 - Q(E)}{1 - P(E)}\right)^\gamma - 1 \right) \\ &= \frac{1}{\gamma(\gamma-1)} (Q(E)^\gamma P(E)^{1-\gamma} + (1 - Q(E))^\gamma (1 - P(E))^{1-\gamma} - 1) \end{aligned} \quad (4.181)$$

Now we consider the case where $\gamma > 1$. This implies that $\gamma(\gamma-1) > 0$ and $2^{1-\gamma} < 1$ so

$$\gamma(\gamma-1)D_\varphi(Q, P) \geq 2^{1-\gamma}Q(E)^\gamma P(E)^{1-\gamma} + (1 - Q(E))^\gamma (1 - P(E))^{1-\gamma} - 1 \quad (4.182)$$

We are interested in simplifying the right part of the equation. To do so, replacing $P(E)$ by x and $Q(E)$ by y , we study the variations of the function

$$g(x, y) = 2^{1-\gamma}x^{1-\gamma}y^\gamma + (1 - x)^{1-\gamma}(1 - y)^\gamma - 1 \quad .$$

Taking the derivative with respect to y , it gives

$$\frac{\partial g(x, y)}{\partial y} = \gamma(2^{1-\gamma})\left(\frac{y}{x}\right)^{\gamma-1} - \gamma\left(\frac{1-y}{1-x}\right)^{\gamma-1} = \gamma\left[\left(\frac{y}{2x}\right)^{\gamma-1} - \gamma\left(\frac{1-y}{1-x}\right)^{\gamma-1}\right] \quad (4.183)$$

Assuming $y > 2x > x > 0$, it gives $\frac{y}{2x} > 1$ and $\frac{1-y}{1-x} < 1$. Thus, the function $y \mapsto g(x, y)$ is increasing under those conditions as its derivative is positive.

In particular,

$$\begin{aligned} g(x, y) &\geq g(x, 2x) \\ &= 2^{1-\gamma}x^{1-\gamma}(2x)^\gamma + (1 - x)^{1-\gamma}(1 - 2x)^\gamma - 1 \\ &\geq 2^{1-\gamma}x^{1-\gamma}(2x)^\gamma + (1 - 2x)^{1-\gamma}(1 - 2x)^\gamma - 1 \\ &= 2x + (1 - 2x) - 1 = 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.184)$$

Thus, $g(x, y) \geq 0$ if $y > 2x$ implies that

$$x^{1-\gamma}y^\gamma + (1 - x)^{1-\gamma}(1 - y)^\gamma - 1 \geq (1 - 2^{1-\gamma})x^{1-\gamma}y^\gamma \quad (4.185)$$

for $y > 2x$.

Thus applying this to equation 4.180, $Q(E) > 2P(E)$ gives $\gamma(\gamma-1)D_\gamma(Q, P) \geq (1 - 2^{1-\gamma})P(E)^{1-\gamma}Q(E)^\gamma$ from which,

$$P(E)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{\gamma(\gamma-1)}{1 - 2^{1-\gamma}} D_\gamma(Q, P) \right)^{1/\gamma} \geq Q(E) \quad (4.186)$$

Now we consider the case $0 < \gamma < 1$. In this case we have $\gamma(\gamma-1) < 0$ and $-1 \geq -2^{\frac{1}{1-\gamma}}$ so

$$\gamma(1-\gamma)D_\varphi(Q, P) \geq 1 - 2^{\frac{1}{1-\gamma}}Q(E)^\gamma P(E)^{1-\gamma} + (1 - Q(E))^\gamma (1 - P(E))^{1-\gamma} \quad (4.187)$$

We keep the same notations as for $\gamma > 1$, but this time, we consider the function

$$g(x, y) = 1 - x^{1-\gamma}y^\gamma \left(2^{\frac{1}{1-\gamma}} \right) - (1 - x)^{1-\gamma}(1 - y)^\gamma \quad .$$

Taking the derivative with respect to x , it gives

$$\frac{\partial g(x, y)}{\partial x} = -(1 - \gamma)2^{\frac{1}{1-\gamma}} \left(\frac{y}{x}\right)^\gamma + (1 - \gamma) \left(\frac{1-x}{1-y}\right)^\gamma \leq (1 - \gamma) \left[\left(\frac{1-x}{1-y}\right)^\gamma - \left(\frac{y}{x}\right)^\gamma \right] . \quad (4.188)$$

Assuming $y > x > 0$, it gives $\frac{y}{x} > 1$ and $\frac{1-y}{1-x} < 1$. Thus, the function $y \mapsto g(x, y)$ is decreasing under those conditions. Moreover,

$$\begin{aligned} g(x, y) &\geq g(2y, y) \\ &= 1 - (2^{\frac{1}{1-\gamma}})(2^{1-\gamma}y) - (1 - 2y)^{1-\gamma}(1 - y)^\gamma \\ &= 1 - y - (1 - 2y)^{1-\gamma}(1 - y)^\gamma \\ &\geq 1 - y - (1 - y) = 0 . \end{aligned} \quad (4.189)$$

Thus assuming $Q(E) > 2P(E)$ (it implies $Q(E) > P(E)$), it gives $\gamma(1-\gamma)D_\gamma(Q, P) \geq (2^{\frac{1}{1-\gamma}} - 1)P(E)^{1-\gamma}Q(E)^\gamma$. Thus

$$P(E)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \left(\frac{\gamma(1-\gamma)}{2^{\frac{1}{1-\gamma}} - 1} D_\gamma(Q, P) \right)^{\frac{1}{\gamma}} \geq Q(E) . \quad (4.190)$$

This concludes the proof. $\square$

Proof of theorem 4.11. Let c_k be the Gaussian copula associated with the block k, k and $\mathbf{W}_{(k,k)}$ the associated part in the adjacency matrix, i.e. $\mathbf{W}_{(k,k)} = (W_{ij})_{c_i=k, c_j=k}$.

To prove the theorem, we have to study the Kullback-Leibler divergence between the models with and without dependency in the diagonal blocks.

$$\begin{aligned} KL(Q, P) &= \int \left(\prod_{ij} q_{ij}(\mathbf{W}) \prod_k c_k(\mathbf{W}_{k,k}) \right) \log \left(\frac{\prod_{ij} q_{ij}(\mathbf{W}) \prod_k c_k(\mathbf{W}_{k,k})}{\prod_{ij} q_{ij}(\mathbf{W})} \right) d\mathbf{W} \\ &= \int \left(\prod_k c_k(\mathbf{W}_{k,k}) \right) \log \left(\frac{\prod_k c_k(\mathbf{W}_{k,k})}{1} \right) d\mathbf{W} \\ &= \sum_k \int c_k(\mathbf{W}_{k,k}) \log \left(\frac{c_k(\mathbf{W}_{k,k})}{1} \right) d\mathbf{W}_{k,k} \\ &= \sum_k \int \prod_{i:c_i=k, j:c_j=k} \phi(W_{ij}) c_k(\mathbf{W}_{k,k}) \log \left(\frac{\prod_{i:c_i=k, j:c_j=k} \phi(W_{ij}) c_k(\mathbf{W}_{k,k})}{\prod_{i:c_i=k, j:c_j=k} \phi(W_{ij})} \right) d\mathbf{W}_{k,k} \\ &= \sum_k KL(\text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_k), \text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_k)) . \end{aligned} \quad (4.191)$$

Thus, we now have to compute the KL divergence between two normal distributions, with the same means. This is a well-known result of the literature that

$$KL(\text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_k), \text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_k)) = \frac{1}{2} \left[\log \frac{|\mathbf{I}_k|}{|\mathbf{\Sigma}_k|} - d + \text{Tr}(\mathbf{I}_k^{-1} \mathbf{\Sigma}_k) \right] = -\frac{\log |\mathbf{\Sigma}_k|}{2} \quad (4.192)$$

as $\mathbf{\Sigma}_k$ is a correlation matrix.

To compute the determinant of $\mathbf{\Sigma}_k = (1 - \rho_k)\mathbf{I}_k + (\sqrt{\frac{\rho_k}{n_k}} \mathbb{1})(\sqrt{\frac{\rho_k}{n_k}} \mathbb{1})^T$, we can use the matrix determinant lemma, which gives

$$|\mathbf{\Sigma}_k| = |(1 - \rho_k)\mathbf{I}_k| \left(1 + \left(\sqrt{\frac{\rho_k}{n_k}} \mathbb{1} \right)^T \mathbf{I}_k^{-1} \left(\sqrt{\frac{\rho_k}{n_k}} \mathbb{1} \right) \right) = (1 - \rho_k)^d \left(1 + \frac{\rho_k}{n_k} \right) . \quad (4.193)$$

Using this, we have that

$$KL(\text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_k), \text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_k)) = -\frac{\log |\mathbf{\Sigma}_k|}{2} \leq -n_k \log(1 - \rho_k) . \quad (4.194)$$

Thus, from hypothesis, denoting $\eta = -\log(1 - \rho)$,

$$KL(Q, P) = KL(\text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}_k), \text{Normal}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_k)) \leq \eta \sum_{k \in C} n_k = \eta t_n n \quad (4.195)$$

Then, as from the proof of theorem 4.3 we have $P(E) \leq \exp(-L \frac{n}{\log(K)})$, proposition 5.25 implies that $Q(E)$ goes to 0 as long as

$$t_n \log(n) \rightarrow 0 \quad . \quad (4.196)$$

□

Fast and Efficient Block Model Classification

5.1 Modularity Clustering

5.1.1 Introduction

Networks are ubiquitous across various disciplines including biology, sociology, finance, marketing, and communication, often exhibiting large-scale complexity that poses challenges for analysis (Conde-Céspedes et al., 2017). Addressing this complexity involves identifying groups of nodes within networks that display denser connections than the surrounding network or exhibit similar behaviors (Seshadhri et al., 2012). This pursuit, commonly referred to as community detection (Girvan and Newman, 2002), graph clustering (Holloco et al., 2019), or modularization (Conde-Céspedes et al., 2017), has led to the development of diverse methods.

Some methods, such as K-means (Hartigan and M. A. Wong, 1979), focus on minimizing similarity within groups, while others aim to maximize a criterion between the observed network and a reference model lacking community structure, exemplified by the modularity approach (Newman and Girvan, 2004). Furthermore, certain methods assume network generation from specific model families and seek the best-fit model within these families. Notably, the Stochastic Block Model (SBM) and its extension, the Degree Corrected SBM (DCSBM), stand out in this regard. SBM posits a block structure in the network’s adjacency matrix, with links drawn from the same distribution within each block (Holland et al., 1983). However, DCSBM corrects for heterogeneity within blocks by introducing node-specific parameters, addressing limitations of the original SBM (Karrer and Newman, 2011).

Despite its simplicity, modularity has been extensively utilized due to its computational efficiency, particularly on sparse graphs (Decelle et al., 2011). However, it is plagued by the resolution limit problem (Fortunato and Barthélemy, 2007), wherein certain communities may be overlooked based on the ratio of edges to community size. To mitigate this, approaches such as modularity with resolution parameter (Berry et al., 2011) or resolution parameter integration (Traag et al., 2011) have been proposed, necessitating additional parameter tuning.

Recently, (Newman, 2016) established a link between modularity and the likelihood of DCSBM, facilitating automatic parameter estimation. This approach assumes a planted model scenario where distributions within and outside blocks follow Poisson distributions with parameters adjusted for node degrees, a scenario observed in real networks (Rohe, Qin, et al., 2014). Evaluating this approach, we adopt the framework of (Laarhoven and Marchiori, 2014), which outlines seven properties a criterion should satisfy. Additionally, we extend conditions from (Zhao et al., 2012) to ensure consistency under DCSBM.

However, the Poisson assumption may not always hold, especially for graphs with continuous or even negative weights (Rubinov and Sporns, 2010; Tse et al., 2010). Moreover, overlapping node memberships in social networks (Santamaría and Therón, 2008) deviates from standard models. Thus, we propose examining alternative null models and distribution assumptions within the block model framework.

Another challenge lies in parameter estimation for modularity and SBM likelihood, both of which involve NP-hard optimization over partition spaces. Numerous algorithms have been developed to address this, including heuristic methods (Blondel et al., 2008) and convex relaxation approaches (X. Li et al., 2021). Expanding on the modularity-based convex relaxation method proposed by (Holloco et al., 2019), we analyze the estimation properties and demonstrate convergence to global maxima. Additionally, for cases requiring discrete solutions, we present a method to shrink the estimators accordingly.

5.1.2 Modularity and SBM

First, we start by defining the SBM and DCSBM, then we recall the link between those models and the modularity with resolution parameter.

Block models

A Stochastic Block Model (SBM) (Holland et al., 1983) with K blocks, is defined through $K \times K$ probability distributions $(P_{kl})_{1 \leq k, l \leq K}$, often belonging to a parametric family, and a probability distribution Π on $\{1, \dots, K\}$.

Then we say that a random graph is generated according to an SBM if its distribution is the same as the following process

Definition 5.1. Let (P_ψ) , $\psi \in \Psi$ be a parametric family of distributions on $\mathbb{R}$, from which the weights of the graph edges will be drawn.

- Let π be a probability on $\{1, \dots, K\}$. There is a latent partition $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$ generated as

$$c_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} \pi \quad . \quad (5.1)$$

This is interpreted as : $c_i = k$ means that the node i belongs to the class k .

- Let $\boldsymbol{\theta} = (\theta_{k,l})_{1 \leq k, l \leq K}$ be a $K \times K$ matrix of elements of Ψ .
- Conditionally on $\mathbf{c}$, the weighted matrix of the graph is drawn from

$$W_{ij} \mid c_i, c_j \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} P_{\theta_{c_i, c_j}}, \text{ for } i \geq j \quad (5.2)$$

$$W_{ij} = W_{ji} \quad . \quad (5.3)$$

We then denote

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{SBM}(n, \pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}) \quad .$$

We also denote $\pi_k = \Pi(\{k\})$.

To have an identifiable model, we assume that the product distributions $\bigotimes_{1 \leq l \leq K} P_{\theta_{k,l}}$, $1 \leq k \leq K$ are distinct. Note that some definitions consider that for all i , W_{ii} has some constant value (such as 0 or 1).

To allow heterogeneity in the blocks, a generalization of this model has been proposed by (Karrer and Newman, 2011). It is called Degree Corrected SBM (DCSBM). The idea is to introduce additional coefficients, called degree correction, that are assigned to each node such that in a block the distributions of the edge weights may not have the same distribution anymore.

Definition 5.2. • Let P_ψ , $\psi \in \Psi$ be a parametric family of distributions on $\mathbb{R}$, from which the weights of the graph edges will be drawn.

- Let $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}$ be a finite subset of cardinal M and Π a probability on $\{1, \dots, K\} \times \mathcal{X}$. There is a *latent partition* $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$ and a vector $\mathbf{x} \in \mathcal{X}^n$ generated as

$$(c_i, x_i) \stackrel{i.i.d.}{\sim} \Pi \quad (5.4)$$

This is interpreted as : $c_i = k$ means that the node i belongs to the class k and x_i is the *degree correction* of the node i .

- Let $\Theta \subseteq \mathbb{R}$ such that $\forall \theta \in \Theta, \forall x, x' \in \mathcal{X}, xx' \in \Psi$ and let $\boldsymbol{\theta} = (\theta_{k,l})$ be a $K \times K$ matrix of parameters, $\theta_{k,l} \in \Theta$.
- Conditionally on $\mathbf{c}$ and $\mathbf{x}$, the weighted matrix of the graph is drawn from

$$W_{ij} \mid c_i, c_j, x_i, x_j \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} P_{x_i, x_j \theta_{c_i, c_j}}, \text{ for } i \geq j ; \quad (5.5)$$

$$W_{ij} = W_{ji} \quad . \quad (5.6)$$

We then denote

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}) \quad .$$

We also denote $\pi_k = \Pi(\{k\} \times \mathcal{X})$ the probability, for each node, to be in class k and denoting $y_1, \dots, y_M$ the elements of $\mathcal{X}$, $\Pi_{au} = \Pi(\{a\} \times \{y_u\})$.

Note that for the identifiability of the model, an assumption on the distribution of degree correction is needed. (Karrer and Newman, 2011) propose to use $\sum_i I(c_i = k)x_i = 1$, while (Zhao et al., 2012) consider

$E[x_i] = 1$. In the remainder, when considering a DCSBM, with general degree corrections factor $\mathbf{x}$, we assume that it satisfies $E[x_i] = 1$.

The case of the SBM can be recovered from the DCSBM by assuming $\mathbf{x}$ is a vector of 1 or equivalently $M = 1$.

In the case where $\theta_{kl} = \theta_{in} + (\theta_{out} - \theta_{in})\delta_{kl}$ the model is said to be planted. To express that a graph is generated from a planted DCSBM, we write

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, P_{\theta_{in}}, P_{\theta_{out}}) \quad . \quad (5.7)$$

If, in addition, we have $\theta_{in} > \theta_{out}$, the model is said to be assortive. We denote $\tilde{\pi}_a = \sum_u \Pi_{au} x_u$. In particular, $\sum_a \tilde{\pi}_a = 1$. Moreover, if $M = 1$ (SBM case) or if the latent partition is independent of the degree, then $\tilde{\pi} = \pi$.

Another particular case of interest is when the probability $\pi_k = \frac{K}{n}$, which means that all classes have the same expected size. It is called equal size case.

We say that a block model is with sparsity pattern $\rho_n \in (0, 1]$, if it is such that the weighted matrix of the graph is given by $W_{ij} \stackrel{\text{ll}}{\sim} P_{x_i x_j \theta_{c_i, c_j}}$ with probability ρ_n and 0 otherwise for all pairs of nodes i, j . In particular, in the case of Bernoulli distribution, this can be simply written as $W_{ij} \stackrel{\text{ll}}{\sim} \text{Bernoulli}(\rho_n x_i x_j \theta_{c_i, c_j})$.

Since the latent partition, which is unknown, is often the motivation for looking at this kind of model, one approach to estimating it from the observation of a realization $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ of a random graph model with K blocks is to maximize a criterion $Q(\mathbf{c}) = Q(\mathbf{c}; \mathbf{W})$. To measure the difference between the estimated partition $\hat{\mathbf{c}} = \text{argmax}_{\mathbf{c}} Q(\mathbf{c})$ and $\mathbf{c}^*$ the true latent partition, a classical measure is

$$\|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} = \min_{\sigma} \sum_i I(\hat{c}_i = \sigma(c_i^*)) \quad (5.8)$$

where the minimum is taken over all the permutation σ of $\{1, \dots, K\}$. Indeed, often criteria to recover the latent partition based on a SBM assumption are functions of the values of the edges weights in each blocks. However, the block structure is the same up to a permutation of the block labels.

We said that a criterion Q is consistent if

1. $|\mathbf{c}^* - \tilde{\mathbf{c}}| = 0$, where

$$\tilde{\mathbf{c}} = \text{argmax}_{\mathbf{c}} Q(\mathbf{c}; E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) \quad (5.9)$$

and

2. for any $\epsilon > 0$, as $n \rightarrow \infty$,

$$\mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}} - \tilde{\mathbf{c}}\|_{P_n} > \epsilon \right) \rightarrow 0 \quad . \quad (5.10)$$

The first condition implies that maximizing the criterion Q on the expectation of the graph allows to recover the graph latent partition.

Remark 5.1. *The condition defined in (5.9) is similar to the condition (*) of (Zhao et al., 2012).*

Link between modularity and SBM

We consider a graph with n nodes and its (possibly weighted) adjacency matrix $\mathbf{W}$. We denote by $2m$ the total weight of the graph $\sum_{ij} W_{ij}$ and d_i the empirical degree of the node i given by $\sum_j W_{ij}$.

In the following, except if mentioned, we consider that the weighted adjacency matrix has positive weights.

The modularity (Newman and Girvan, 2004) is a widely used method for classifying large graphs. It consists in comparing, for nodes in the same class, the observed graph and a null model that may be dependent upon the observed graph. When combined with the Louvain algorithm (Blondel et al., 2008), it allows discovering block structure quickly in graph.

The modularity was originally defined as

$$Q(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} (W_{ij} - \bar{W}_{ij}) \delta_{c_i, c_j} \quad , \quad (5.11)$$

where $\bar{W}_{ij}$ represents some null model of random graph called the configuration model (Frieze and Karoński, 2015). The configuration model is defined as $\bar{W}_{ij} = \frac{d_i d_j}{2m}$. This corresponds approximately to the expectation of the graph, where the weights of the graph are randomly permuted while keeping the same empirical degrees sequence.

Moreover, sometimes, the modularity is defined with a coefficient $\gamma \in \mathbb{R}_*^+$ (Reichardt and Bornholdt, 2006) called resolution parameter:

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} (W_{ij} - \gamma \bar{W}_{ij}) \delta_{c_i, c_j} \quad . \quad (5.12)$$

In the remainder of this paper, we refer to modularity as the modularity with a resolution parameter.

Remark 5.2. *In the expression of the modularity, the usual null model is the configuration model (Newman and Girvan, 2004). Nevertheless, there are other possibilities, for example the indetermination (Bertrand et al., 2022) or the uniformity (Conde-Céspedes et al., 2017) (also known in case of resolution parameter as CPM (Traag et al., 2011)).*

For now, we consider the configuration model as the null model. We discuss in section 5.1.4 some of the impact of changing the null model.

Remark 5.3. *In fact, the modularity can be rewritten directly as a sum by blocks. This corresponds to*

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_k \left[\mathbf{c}W_{k,k} - \left(\frac{\mathbf{c}W_k}{2m} \right)^2 \right] \quad , \quad (5.13)$$

where for any $1 \leq k, l \leq K$,

$$\mathbf{c}W_{k,l} = \sum_{i,j} I(c_i = k, c_j = l) W_{i,j} \quad , \quad (5.14)$$

and

$$\mathbf{c}W_k = \sum_{l=1}^K \mathbf{c}W_{k,l} \quad . \quad (5.15)$$

Even if it was not the aim at the introduction, the modularity with resolution parameter is closely related to the likelihood of some particular DCSBM. As this relation is the start of our paper, we recall this result. Let us consider the model $\mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, \text{Poisson}(\theta_{in}), \text{Poisson}(\theta_{out}))$. Assume that we have an undirected graph $\mathbf{W}$ with no loop and that we use $\frac{d_i}{\sqrt{2m}}$ to estimate of the degree correction factor of the node i . Then, the product of the log-likelihood of each W_{ij} , also called profile log-likelihood, according to the model is given by (Newman, 2016),

$$\text{llk}(\mathbf{c}, \theta_{in}, \theta_{out}) = 2m \left(\frac{B}{2m} \sum_{i,j} \left[W_{ij} - \gamma \frac{d_i d_j}{2m} \right] \delta_{c_i, c_j} + D \right) \quad (5.16)$$

with

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{\theta_{in} - \theta_{out}}{\log(\frac{\theta_{in}}{\theta_{out}})} \\ B &= \log(\frac{\theta_{in}}{\theta_{out}}) \\ D &= \log(\theta_{out}) - \theta_{out} \quad . \end{aligned} \quad (5.17)$$

Note that it always implies that $\gamma \in \mathbb{R}_*^+$.

If θ_{in} and θ_{out} are fixed, then the quantities B , D and γ become constant. In addition, the model is assortive, i.e. if $\theta_{in} > \theta_{out}$, then $B > 0$ and the optimization problem in $\mathbf{c}$ can be rewritten as maximizing

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left[W_{ij} - \gamma \frac{d_i d_j}{2m} \right] \delta_{c_i, c_j} \quad (5.18)$$

which is precisely the formula for the modularity with resolution parameter.

This approach has several interests. The first one is that it gives a natural procedure to automatically select the resolution parameter of the modularity. The second one is that by changing the Poisson distribution, it may give better results in terms of classification than the classical modularity.

If we do not assume that there is a degree correction in the data, it is easy to provide an equivalent result.

Proposition 5.1. *Let us consider an assortive $\mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, \text{Poisson}(\theta_{in}), \text{Poisson}(\theta_{out}))$, where $|\mathcal{X}| = 1$. Assume that we have an undirected graph $\mathbf{W}$ with no loop and that we use $\frac{1}{\sqrt{2m}}$ for the estimate of the degree correction factor x_1 . Then, maximizing the profile log-likelihood, according to the model with fixed parameters is equivalent to maximizing*

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left[W_{ij} - \frac{\gamma}{2m} \right] \delta_{c_i, c_j} \quad (5.19)$$

which is a well-known criterion in the literature (see for example (Conde-Céspedes et al., 2017)).

5.1.3 Modularity with Automatic Resolution Parameter

AutoResMod

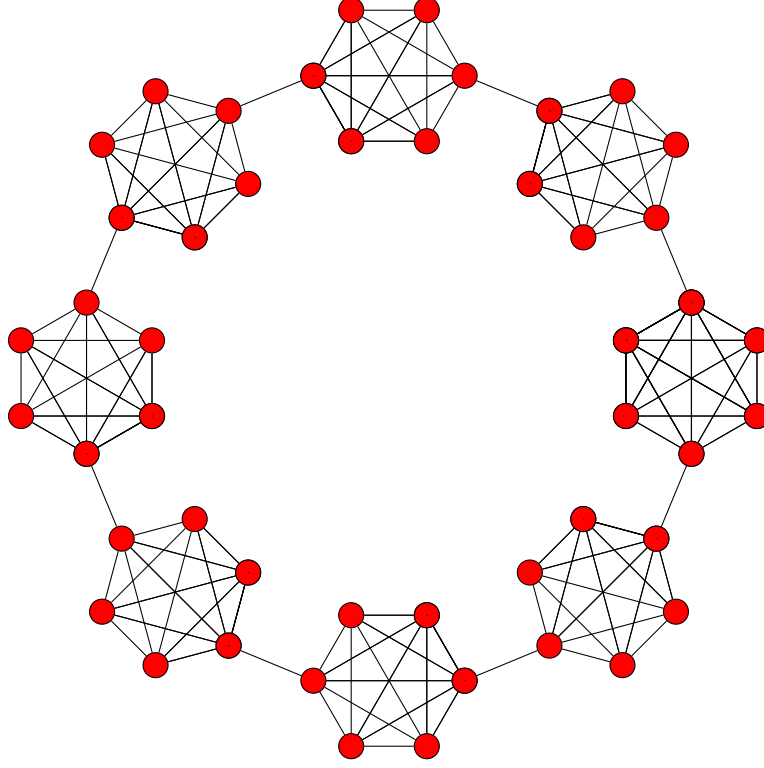


Figure 5.1 – Ring of cliques graph with 8 cliques of 6 nodes.

One limitation of modularity is known as the resolution limit (Fortunato and Barthélemy, 2007). It manifests when maximizing modularity tends to amalgamate small communities while fragmenting larger ones (Lancichinetti and Fortunato, 2011). An illustrative example of this phenomenon is the ring of cliques. This is a graph comprising interconnected cliques, each connected to precisely two others by a single link (c.f. Figure 5.1 for an example). In such cases, depending on the size of the cliques, the optimal partition may erroneously merge two cliques, contrary to expectations. A remedy for this scenario involves employing modularity with a carefully chosen resolution parameter. Consequently, our focus shifts to exploring the implications of automatically selecting the resolution parameter to address this issue. Using the notations α, β in place of θ_{in} and θ_{out} , equation (5.16) invites us to consider the criterion

$$\tilde{Q}(\mathbf{c}) = \sup_{\alpha, \beta \in \mathbb{R}^+} \left[\frac{\log(\frac{\alpha}{\beta})}{2m} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \left(W_{ij} - \frac{\alpha - \beta}{\log(\alpha/\beta)} p_{ij} \right) \delta_{c_i, c_j} + \log(\beta) - \beta \right] . \quad (5.20)$$

We call this criterion AutoResMod.

We denote, for any matrix $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ and partition $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$, $s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} W_{ij} \delta_{c_i c_j}$, the intra-class relative weight.

Thus

$$Q_\gamma(\mathbf{c}) = s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) - \gamma s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c}) \quad (5.21)$$

and also

$$\tilde{Q}(\alpha, \beta, \mathbf{c}) = \log\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) * s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) - (\alpha - \beta) * s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c}) + \log(\beta) - \beta . \quad (5.22)$$

Before analyzing the properties of $\tilde{Q}(\mathbf{c})$, we start by getting rid of the supremum in its expression.

Proposition 5.2. *For any partition $\mathbf{c}$, the function $\alpha, \beta \mapsto \tilde{Q}(\alpha, \beta, \mathbf{c})$ is concave and is maximal for*

$$\alpha = \frac{s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})}, \quad \beta = \frac{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} . \quad (5.23)$$

The criterion can then be written as

$$\tilde{Q}(c) = \log \left(\frac{s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \frac{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})}{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})} \right) s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) + \log \left(\frac{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \right) - 1 \quad (5.24)$$

Remark 5.4. We can also rewrite the criterion as

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(\mathbf{c}) &= s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) \log \left(\frac{s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \right) + (1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})) \log \left(\frac{1 - s(\mathbf{W}, \mathbf{c})}{1 - s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})} \right) - 1 \\ &= KL_B(s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) | s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c})) - 1 \end{aligned} \quad (5.25)$$

where KL_B is the Kullback-Leibler divergence between two Bernoulli distributions.

Remark 5.5. This result is not limited to the use of the configuration model $\overline{\mathbf{W}}$. It remains true for if we replace $\overline{\mathbf{W}}$ by any matrix $\mathbf{M}$ such that $s(\mathbf{M}, \mathbf{c}) \in (0, 1)$ and $\sum_{ij} M_{ij} = \sum_{ij} W_{ij}$. For example, one can take $M_{ij} = \frac{1}{2m}$, which corresponds to a uniform model.

A similar finding was demonstrated by (Karrer and Newman, 2011) concerning the DCSBM, who demonstrated that the likelihood of a DCSBM can be rewritten as the Kullback-Leibler divergence between two particular distributions. It is noteworthy that we can extend this concept to a diverse range of criteria by substituting the Kullback-Leibler divergence with any other pseudo-distance, thus creating novel criteria.

Now, let us delve into some properties of AutoResMod. Specifically, we will begin by examining whether there exists a scenario where this criterion outperforms modularity.

The Resolution Limit Problem on the Ring of Cliques

On the ring of cliques' graph, (Fortunato and Barthélemy, 2007) demonstrate that maximizing the modularity cannot recover the cliques if

$$K < 2 + \frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) \quad (5.26)$$

for a graph with n nodes and K cliques.

To address this issue, the resolution parameter can be fine-tuned to enable the method to successfully recover the cliques (Kumpula et al., 2007). It is important to note that while we illustrate the problem with the ring of cliques for simplicity, the issue is more general, as explained by (Fortunato and Barthélemy, 2007; Berry et al., 2011).

Furthermore, using this straightforward example allows for a direct comparison between our method and modularity (without a resolution parameter), as they involve no additional parameters. The comparison results are presented in figure 5.2. The equations utilized to construct the graph are provided in proposition 5.19 of the appendix. From this example, it becomes evident that our method significantly outperforms modularity. This outcome is not unexpected. Since the AutoResMod criterion assesses quantities by blocks rather than individual links, and the emphasis lies on the number of edges within and between blocks rather than their specific positions, the graph can be viewed as a Bernoulli planted SBM with $\theta_{in} = 1$ and $\theta_{out} = \frac{K^2}{n^2}$. Thus, aside from potential misspecifications between the Poisson and Bernoulli distributions, the graph falls within the set where we anticipate AutoResMod to exhibit consistency. This may explain the superior performance of AutoResMod.

This example demonstrates that there is at least one type of graph where AutoResMod is more interesting than modularity. We will now compare these two criteria in a more general framework.

Consistency of AutoResMod

An approach to assess the performance of a classification criterion is to examine its estimation properties, particularly how the model parameters should behave to enable successful parameter estimation. In the case of planted DCSBM with equal-size groups and very sparse assumptions ($\rho_n = O(\frac{1}{n})$), (Gulikers et al., 2018) demonstrate that recovery becomes impossible for certain values of θ_{in} and θ_{out} .

Another relevant study is conducted by (Zhao et al., 2012), where they established conditions for general criteria to be consistent. Their notations and main theorem are recalled at the beginning of section 5.1.7. In particular, it requires that the maximal value of the criteria applied to an expected version of the observed graph is maximized by the latent partition (c.f. Condition (*) of theorem 5.2). Among the studied criteria, we find the modularity (without resolution parameter), which is shown to be a consistent under a DCSBM if some assumptions on the model are met. Assume that there is a sequence $\mathbf{c}_n^*, \mathbf{x}_n^*, \mathbf{W}_n \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (\text{Bernoulli}(\psi)), \rho_n \theta^*)$, where the number M of degree factors corrections and the number of blocks K are independent of n . Then, for

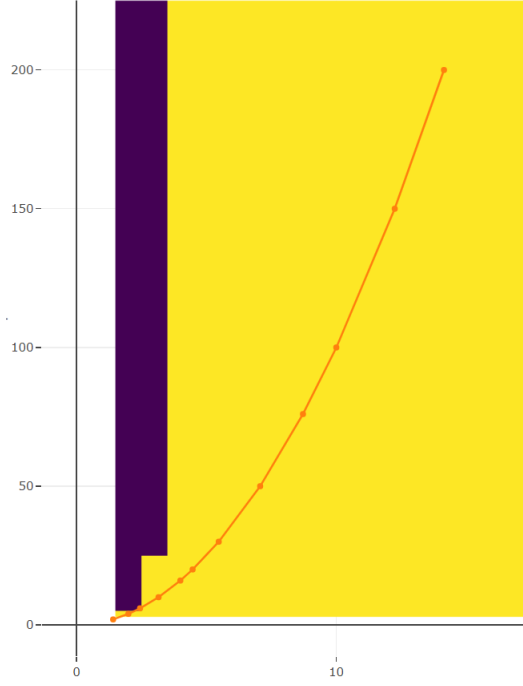


Figure 5.2 – Comparison of the modularity (orange line) and AutoMod resolution limit on the ring of cliques example (Yellow means that the true partition is preferred over a partition with merges cliques by AutoMod).

sufficiently large n and not overly sparse graphs (i.e., $\frac{n\rho_n}{\log(n)} \rightarrow \infty$), recovery is feasible if (Zhao et al., 2012)

$$\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} > 0 \text{ if } k = l \quad \text{and} \quad \tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} < 0 \text{ if } k \neq l \quad (\text{H1})$$

where $\tilde{\theta}_0 = \sum_{kl} \tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}$, $\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} = \frac{\tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}}{\tilde{\theta}_0}$, and $\tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} = (\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})(\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})^T$.

This implies that the model is assortive, in the sense that the matrix $\tilde{\epsilon}$ must be larger on the diagonal than on the off-diagonal. In particular, in the light of the formulation of the modularity given in equation (5.13), it is a sum of the values on the diagonal of the difference between the empirical mean of the diagonal blocks and the empirical mean of diagonal blocks of the null model, and $\tilde{\epsilon}$ correspond in some sense to the expected modularity for the latent partition. Thus, assuming that values on the diagonal of $\tilde{\epsilon}$ are positive, i.e. increase the criterion, while those on the off-diagonal are negative and should not be considered, seems logical.

For the case where $K = 2$, condition (H1) simplifies to

$$\theta_{11}\theta_{22} > \theta_{12}^2 \quad . \quad (\text{M})$$

Notably, in the planted model, this condition reduces to $\theta_{in} > \theta_{out}$. However, the analysis of this criterion is generally more complex and cannot be easily simplified.

Before analyzing properties of AutoResMod, we further investigate the modularity consistency under a planted DCSBM as well as the impact of the resolution parameter.

Proposition 5.3. *Let us consider a graph with equal size groups generated according to a $p\text{DCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\theta_{in}), \text{Bernoulli}(\theta_{out}))$. Assuming that the degrees are independent of the latent partition, and that the model is assortive, i.e. $\theta_{in} > \theta_{out}$, then the modularity (without resolution parameter) is consistent.*

When considering the modularity with resolution parameter γ , it is natural to expect that the condition (H1) for the consistency must be modified to include γ . In particular, as this condition is nothing more than a condition on an expectation of the criterion, we may expect that the same arises with γ . Thus, a natural condition is given by

$$\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} > 0 \text{ if } k = l \quad \text{and} \quad \tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} < 0 \text{ if } k \neq l \quad (\text{H1g})$$

where $\tilde{\theta}_0 = \sum_{kl} \tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}$, $\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} = \frac{\tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}}{\tilde{\theta}_0}$, and $\tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} = (\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})(\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})^T$. Therefore, the theorem 3.1 of (Zhao et al., 2012) can be generalized into

Proposition 5.4. Under a $\mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\rho_n \theta_{in}), \text{Bernoulli}(\rho_n \theta_{out}))$, condition (H1g) implies condition (*).

Corollary 5.0.1. Under a $\mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\psi), \rho_n \theta^*)$, which is planted with degrees independent of the latent partition and equal size groups, the condition given in equation (H1g) simplifies into

$$\theta_{in} > \max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\} \theta_{out} \quad . \quad (5.27)$$

In addition, we have that $\max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\} \geq 1$ for any $\gamma > 0$ with equality if and only if $\gamma = 1$.

From this corollary, we can see that the choice of a resolution parameter $\gamma \neq 1$ may not be the best idea to recover the partition of an assortative planted SBM. This may look strange because the ring of cliques' example shares similarities with this class of models. However, the difference may be due to the sparsity of the model. Indeed, viewing the ring of cliques graph as an SBM, the probability of having an edge between two blocks is $\frac{2}{n_k}$, where n_k is the size of a block. Assuming that all the blocks have the same size and there are K blocks, this leads to $\frac{2K^2}{n^2}$. Depending on the growth of K regarding n , the sparsity hypothesis in (Zhao et al., 2012) may not be met. On the contrary, the AutoResMod criterion is close to the estimator considered by (Rohe, Qin, et al., 2014), which allows sparser between blocks models.

An essential aspect is to examine the scenarios where AutoResMod demonstrates consistency, particularly in comparison to modularity. This consideration gives rise to the following proposition.

Corollary 5.0.2. Assuming the condition of proposition 5.4 hold, then if in addition $n\rho_n \rightarrow \infty$, the modularity is consistent.

Based on the modularity, we can provide some results for AutoResMod.

Proposition 5.5. Consider a $\mathbf{DCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\psi), \rho_n \theta^*)$. Defining

$$\gamma^* = \frac{\alpha^* - \beta^*}{\log(\alpha^*/\beta^*)} \quad (5.28)$$

with α^*, β^* the maximal values of

$$B(\alpha, \beta) \sum_k \left[\frac{H_{kk}}{\tilde{P}_0} - \gamma(\alpha, \beta) \left(\frac{H_k}{\tilde{P}_0} \right)^2 \right] + D(\alpha, \beta) \quad (5.29)$$

where equations of B, D and γ are given in equation (5.17) and $H_{kk} = H_{kk}(\mathbb{D})$, $H_k = H_k(\mathbb{D})$.

Denoting $\tilde{\theta}_0 = \sum_{kl} \tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}$, $\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} = \frac{\tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl}}{\tilde{\theta}_0}$, and $\tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} = (\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})(\tilde{\theta}^{(\Pi)} \mathbb{1})^T$, sufficient conditions for the criterion AutoResMod to satisfy condition (*) are given by

$$\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} > 0 \text{ if } k = l \quad \text{and} \quad \tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} < 0 \text{ if } k \neq l, \quad \text{when } \alpha^* > \beta^* \quad (5.30)$$

and

$$\tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} < 0 \text{ if } k = l \quad \text{and} \quad \tilde{\theta}_{kl}^{(\Pi)} - \gamma \tilde{M}_{kl}^{(\Pi)} > 0 \text{ if } k \neq l, \quad \text{when } \alpha^* < \beta^* \quad . \quad (5.31)$$

Remark 5.6. From this, we can clearly see that for dissortative models, the AutoResMod criterion may recover the latent partition. Indeed, under such models, the condition of the modularity is reversed.

Corollary 5.0.3. Assuming the conditions of proposition 5.5 hold, then if in addition $n\rho_n \rightarrow \infty$, the AutoResMod criterion is consistent.

A reasonable question is whether there exists at least one model that satisfies the requirements of proposition 5.5. This is the aim of the following proposition.

Proposition 5.6. Consider a $\mathbf{pSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(1), \text{Bernoulli}(0))$. Then condition 5.5 is verified.

While the modularity may fail to recover the true partition in dissortative cases, likelihood-based methods can do so. Hence, a natural question arises regarding whether AutoResMod inherits this property. Proving this directly using the same principle as previously is not straightforward. Therefore, to illustrate this point, we examine a particular example.

Proposition 5.7. There exists at least one model $\mathbf{pDCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\theta_{in}), \text{Bernoulli}(\theta_{out}))$ with $\theta_{in} < \theta_{out}$ on which the modularity with resolution parameter $\gamma \in (0, 1.5)$ is not consistent while AutoResMod is.

General Properties of AutoResMod

Among the literature, several authors point out some limits of the modularity (see for examples (Traag et al., 2011) or (Laarhoven and Marchiori, 2014)).

To compare criteria, (Laarhoven and Marchiori, 2014) provide several properties that a good clustering criterion should have. We keep this framework to analyze the modularity with automatic model selection. Note that they provide a criterion that satisfies all the properties that we recall here.

Definition 5.3 (Permutation invariance). A criterion Q is permutation invariant if for all graphs $G = (V, E)$, all partitions $\mathbf{c}$ of V , then applying the same permutation to σ to $\mathbf{c}$ and G , leads to $Q(G, \mathbf{c}) = Q(\sigma(G), \sigma(\mathbf{c}))$.

Definition 5.4 (Scale invariance). A criterion is scale invariant if for all graphs G , and all clustering $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$, and any $\alpha > 0$, $Q(G, \mathbf{c}_1) \leq Q(G, \mathbf{c}_2) \iff Q(\alpha G, \mathbf{c}_1) \leq Q(\alpha G, \mathbf{c}_2)$, where αG is the weighted graph with weights corresponding to the weights of G times α .

Definition 5.5 (Richness). A criterion is said to be rich if for all V , all non-trivial partition $\mathbf{c}^*$ of V , there exists a graph $G = (V, E)$ so that $\mathbf{c}^*$ is the optimal partition regarding the graph quality clustering.

Definition 5.6 (Monotonicity). A graph $\hat{G}$ is said to be a consistent improvement of a graph G for the partition $\mathbf{c}$ if the weights of edge (i, j) in $\hat{G}$ is greater than in G if $c_i = c_j$ and is lower than the one in G if $c_i \neq c_j$. Then, a graph clustering quality is said to be monotonic if for any graph $\hat{G}$ a $\mathbf{c}$ -improvement of a graph G , $Q(\hat{G}, \mathbf{c}) \geq Q(G, \mathbf{c})$.

Definition 5.7 (Locality). A criterion Q is local if for all graphs $G_1 = (V_1, E_1)$ and $G_2 = (V_2, E_2)$ so that for some set $V_a \subset V_1 \cap V_2$, G_1 and G_2 agree on a set V_a and its neighborhood, and if for all clustering C_a, D_a of V_a , C_1 of $V_1 \setminus V_a$, C_2 of $V_2 \setminus V_a$,

$$Q(G_1, C_a \cup C_1) \geq Q(G_1, D_a \cup C_1) \Rightarrow Q(G_2, C_a \cup C_2) \geq Q(G_2, D_a \cup C_2) \quad . \quad (5.32)$$

The idea behind this property is that a local change to the graph should only impact the clustering locally.

Definition 5.8 (Continuity). A quality function Q is continuous if for every $\epsilon > 0$ and any graph $G = (V, E)$, there exists a $\delta > 0$ such that for all graphs $G' = (V, E')$,

$$W_{ij} - \delta < W'_{ij} < W_{ij} + \delta \quad \forall i, j \quad \Rightarrow \quad Q(G', C) - \epsilon < Q(G, C) < Q(G', C) \quad (5.33)$$

for all clustering C of G .

This means that a small change in the graph will imply only a small change in the quality.

Proposition 5.8 (Laarhoven and Marchiori, 2014). *The modularity is permutation invariant, scale invariant, rich and continuous, but it is not monotonic nor local.*

Proposition 5.9. *The AutoResMod is permutation invariant, scale invariant, rich and continuous.*

Proposition 5.10. *AutoResMod is not monotonic. AutoResMod is not local.*

Thus, from the point of view of (Laarhoven and Marchiori, 2014), compared to the modularity, the AutoResMod, does not provide improvement.

5.1.4 Natural alternatives to modularity

Modification of the null model

As we have observed, the modularity is defined as the sum of differences between the weights and the null model within blocks. Several other criteria follow a similar principle but utilize different null models. Among these, one such criterion is the deviation to uniformity (Conde-Céspedes et al., 2017). This criterion is also known as the CPM (Constant Potts Model) (Traag et al., 2011) and is equivalent to the Owsinski-Zadrozny criterion (Owsinski and Zadrozny, 1986). It is defined by

$$Q_\gamma^U(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left(W_{ij} - \gamma \frac{1}{2m} \right) \delta_{c_i c_j} \quad . \quad (5.34)$$

Another criterion, called the deviation to indetermination (Bertrand et al., 2022), is given by:

$$Q_\gamma^I(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left(W_{ij} - \gamma \left(\frac{d_i}{n} + \frac{d_j}{n} - \frac{2m}{n^2} \right) \right) \delta_{c_i c_j} \quad . \quad (5.35)$$

Depending on the null model used, it is expected that these criteria may behave differently. For instance, (Laarhoven and Marchiori, 2014) demonstrates that, unlike modularity, the deviation to uniformity is monotonic and local, indicating that changing the null model can significantly affect criterion properties.

To analyze the impact of a change in the null model, we consider the modularity without resolution parameter, i.e. $\gamma = 1$. In this setting, (Conde-Céspedes, 2013) demonstrates that as well as the modularity, both the deviation to uniformity and the deviation to indetermination have a resolution limit. However, for modularity, introducing a resolution parameter can mitigate this issue (at least for examples like the ring of cliques). (Traag et al., 2011) demonstrate that for the deviation to uniformity, resolution parameters $\gamma > 0$ can also address the resolution limit problem. Thus, similar improvements can be expected for other deviation criteria, including the deviation to indetermination.

To compare these criteria, we adopt the same approach as in the previous section, based on asymptotic conditions for recovering the true partition. We have already examined conditions for modularity. In the case of the deviation to uniformity (without resolution limit), (Zhao et al., 2012) demonstrate that under a $\mathbf{SBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}, \rho_n \theta)$, recovery is feasible (assuming $\frac{\rho_n n}{\log(n)} \rightarrow \infty$) under the condition:

$$\theta_{kk} > \tilde{\theta}_0, \quad \theta_{kl} < \tilde{\theta}_0, \quad \forall k \neq l. \quad (5.36)$$

In the case where $K = 2$, this condition reduces to,

$$\min\{\theta_{11}, \theta_{22}\} > \theta_{12}. \quad (\text{U})$$

However, they do not provide conditions for the case of the Degree Corrected Stochastic Block Model (DCSBM). Here, we conduct a similar analysis for the deviation to indetermination.

Proposition 5.11. *Under a $\mathbf{SBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}, \rho_n \theta)$ with fixed number of blocks K , assuming $\frac{\rho_n n}{\log(n)} \rightarrow \infty$ and the condition*

$$\theta_{kk} > 2 \sum_v \pi_v \theta_{kv} - \tilde{\theta}_0, \quad \theta_{kl} < \sum_v \pi_v (\theta_{lv} + \theta_{kv}) - \tilde{\theta}_0, \quad \forall k \neq l \quad (5.37)$$

the deviation to indetermination (with $\gamma = 1$) is asymptotically consistent.

This condition is more complicated than the case of the deviation to the uniformity. Nevertheless, in the case where $K = 2$, it can be simplified.

Proposition 5.12. *In the case where $K = 2$, the condition (5.37) for the consistency of the deviation to indetermination reduces to*

$$\theta_{aa} + \theta_{bb} > 2\theta_{ab}. \quad (\text{I})$$

This last proposition makes it possible to compare the criteria in a simple case.

Proposition 5.13. *Under a $\mathbf{SBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}, \theta)$ with $K = 2$, the conditions for the consistency of the modularity, the deviation to uniformity and the deviation to indetermination follows the relationship*

$$U \Rightarrow M \Rightarrow I \quad (5.38)$$

If we assume in addition that the model is planted, then $U = M = I$.

However, those conditions are sufficient but not necessary. Thus, they do not really imply that there is a subset of SBM where the deviation to indetermination is always better than the modularity. Nevertheless, we can still provide an interesting example, which illustrates this proposition.

To illustrate the proposition 5.13, we consider three SBM with Bernoulli distribution scenarii with $K = 2$:

1. $\theta_{11} = 0.8, \theta_{12} = 0.4$ and $\theta_{22} = 0.16$,
2. $\theta_{11} = 0.8, \theta_{12} = 0.4$ and $\theta_{22} = 0.3$,
3. $\theta_{11} = 0.8, \theta_{12} = 0.4$ and $\theta_{22} = 0.5$.

These scenarios are such that in situation 1, only the condition (I) is fulfilled. In situation 2, only (M) and (I) are fulfilled and in situation 3, all three. We then look through simulations, for different numbers of nodes in the graph, at the behavior of the different criteria for the three situations. The results are summarized in tables 5.1, 5.2 and 5.3. We observe clearly that the deviation from indeterminacy is the only method to work in the three situations, which is consistent with our result.

On this example, we can observe that the deviation to indetermination criterion performs as expected, demonstrating better theoretical properties compared to modularity or deviation to uniformity. Additionally, the size of the graphs does not appear to impact the results.

Another limitation of modularity compared to other methods is its requirement for the weights of the graphs to be positive.

Table 5.1 – Percentage (minimum and maximum) of misclassified nodes for different criteria over 100 Monte Carlo replications of SBM with different numbers n of nodes for situation 1.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularity	40-50%	43-50%	45-50%	47-50 %	48-50%
Uniformity	13 – 34%	14-30%	16-27 %	17-27%	17-25%
Indetermination	23-50%	6 – 28%	1 – 6%	0 – 2%	0 – 1%

Table 5.2 – Percentage (minimum and maximum) of misclassified nodes for different criteria over 100 Monte Carlo replications of SBM with different numbers n of nodes for situation 2.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularity	23-50%	5-35%	1-7%	0-2 %	0-1%
Uniformity	9-31%	10-24%	11-22%	13-21%	12-20%
Indetermination	1-33%	0-2%	0-1%	0%	0%

To address this issue, an approach proposed by (S. Gómez et al., 2009) involves modifying the null model (assuming that the total weight of the graph is strictly positive). Specifically, they introduce the criterion $Q_\gamma^S(\mathbf{c})$, defined as:

$$Q_\gamma^S(\mathbf{c}) = \frac{1}{2(m^+ + m^-)} \sum_{ij} \left(W_{ij} - \gamma \left(\frac{d_i^+ d_j^+}{2m^+} - \frac{d_i^- d_j^-}{2m^-} \right) \right) \delta_{c_i c_j} \quad (5.39)$$

where $W_{ij}^+ = \max\{0, W_{ij}\}$, $W_{ij}^- = \max\{0, -W_{ij}\}$, $d_i^+ = \sum_j W_{ij}^+$, $d_i^- = \sum_j W_{ij}^-$, $2m^+ = \sum_i d_i^+$, and $2m^- = \sum_i d_i^-$. If $2m > 0$, this criterion reflects the deviation (between groups) of the graph from a null model where positive and negative links are distinct. However, in this scenario, the link between the likelihood equation of a Poisson DSCBM and the modularity may be broken due to the potential negativity of some weights, rendering the likelihood undefined. Nonetheless, we can still establish a connection with likelihood. Following (S. Gómez et al., 2009), an alternative formulation of the criterion is:

$$Q_\gamma^S(\mathbf{c}) = \frac{1}{2(m^+ + m^-)} \left[\left(\sum_{ij} W_{ij}^+ - \frac{d_i^+ d_j^+}{2m^+} \right) \delta_{c_i c_j} - \left(\sum_{ij} W_{ij}^- - \frac{d_i^- d_j^-}{2m^-} \right) \delta_{c_i c_j} \right] \quad (5.40)$$

This formulation is justified by considering positive weights as representing the true underlying community structure, while negative weights aim to disrupt them. Thus, the objective is to make the structure most likely for positive weights and less likely for negative weights. Consequently, computing the likelihood ratio under the planted Poisson assumption with the same parameters applied to W^+ with $\frac{d_i^+ d_j^+}{2m^+}$ as the null model and W^- with $\frac{d_i^- d_j^-}{2m^-}$ gives a likelihood ratio of the form:

$$BQ_\gamma^S(\mathbf{c}) + D \quad (5.41)$$

where B and D are functions of θ_{in} and θ_{out} .

Changing the graph model

As we have seen, the choice of the null model can influence the properties of the criterion. However, in certain cases, particularly when the weights are not positive, criteria derived from the modularity may encounter issues. In this section, we explore alternatives to AutoResMod, which are motivated by the definition of AutoResMod as the likelihood of a block model. We consider changing the edges distribution model from Poisson to any other with same support as the graph weights. We consider any null model such that the likelihood remains well-defined. This approach allows us to adapt the criterion to better suit the characteristics of the graph data, ensuring more accurate analysis and interpretation.

For any one parameter probability distribution (P_ψ), considering some null model $\mathbf{M} = (m_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$, we can define :

$$gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (P_\psi)) = \frac{1}{2m} \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [\log(P_{m_{ij}\alpha}(W_{ij})) - \log(P_{\beta m_{ij}}(W_{ij}))] \delta_{c_i c_j} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \log(P_{m_{ij}\beta}(W_{ij})) \right) \quad (5.42)$$

Table 5.3 – Percentage (minimum and maximum) of misclassified nodes for different criteria over 100 Monte Carlo replications of SBM with different numbers n of nodes for situation 3.

	n=100	n=300	n=500	n=750	n=1000
Modularity	0-5%	0-1%	0%	0 %	0%
Uniformity	1-14%	1-5%	0-2%	0-1%	0%
Indetermination	0-2%	0%	0%	0%	0%

Algorithm 6 Optimization of the modularity with resolution parameter proposed by (Newman, 2016)

Input: The observation of a graph $\mathbf{W}$ and an initial value for resolution parameter, for example $\gamma = 1$.

- 1: **while** not convergence **do**
- 2: apply the Louvain algorithm to the modularity to $\mathbf{W}$ with resolution limit γ to get a partition $\mathbf{c}$,
- 3: find the best parameters θ_{in} and θ_{out} associated to the partition $\mathbf{c}$ and update γ .
- 4: **end while**

Output: $\mathbf{c}$ the optimized partition and θ_{in} and θ_{out} the optimized parameters.

and

$$gQ(\mathbf{c}; (P_\psi)_\psi) = \sup_{\alpha, \beta} gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (P_\psi)_\psi) \quad . \quad (5.43)$$

This definition is motivated by the fact that if the coefficients of the null model m_{ij} are equal to the product of two quantity k_i and k_j depending of nodes i and j respectively, then equation (5.42) corresponds to the likelihood of a particular model of **pDCSBM**(n, Π, P, θ).

For example, if we take for P the Poisson distribution and m_{ij} the configuration model, i.e. $m_{ij} = \frac{d_i}{\sqrt{2m}} \frac{d_j}{\sqrt{2m}}$, for the graph $\mathbf{W}$, gQ is equal to the AutoResMod criterion

$$gQ(\mathbf{c}; (Poisson(\psi))) = KL_B(s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) | s(\mathbf{M}, \mathbf{c})) - 1 \quad . \quad (5.44)$$

If we consider the indetermination as null model, i.e. $m_{ij} = \frac{d_i}{n} + \frac{d_j}{n} - \frac{2m}{n^2}$, gQ does not correspond to the likelihood of a DCSBM.

Although this family of criteria may seem complex to handle, we can approach it in a manner similar to the method proposed by (Newman, 2016) for optimizing modularity with automatic selection of the resolution parameter. This method involves alternating between applications of the Louvain algorithm and a step of parameter optimization using likelihood with the partition found by the Louvain algorithm. This procedure is recalled in algorithm 6.

Remark 5.7. For $gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c})$, if α and β are fixed, the optimization problem in $\mathbf{c}$ can be rewritten as maximizing $\sum_{ij} \tilde{W}_{ij} \delta_{c_i, c_j}$, where $\tilde{W}_{ij}$ is a real matrix independent of $\mathbf{c}$. This can be achieved using the Louvain algorithm. Therefore, the procedure given in algorithm 6 can also be applied to optimize $gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c})$ by replacing step 2 by the maximization in $\mathbf{c}$ of $\sum_{ij} \tilde{W}_{ij} \delta_{c_i, c_j}$ and step 3 by the maximization of $gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c})$ in α and β .

Remark 5.8. If the graph weights are continuous, one may opt for a continuous distribution instead of the Poisson distribution. While classical distributions such as Gammas or Chi-squares will yield different criteria, employing a continuous version of the Poisson distribution (Iliencko, 2013) results in similar criteria as modularity, except for terms depending on the parameters of the model, which arise from the different normalizing constant of the continuous distribution.

Proposition 5.14. Let P be the normal distribution with fixed standard deviation $\sigma > 0$. Then, we have

$$gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (Normal(\mu, \sigma))_\mu) = B \sum_{ij} [m_{ij} W_{ij} - \gamma m_{ij}^2] \delta_{c_i c_j} + D \quad (5.45)$$

where B and γ depend on the parameters α and β and D depends on the parameters α, β and $\mathbf{W}$. In addition, replacing α and β by their estimates, leads to

$$gQ(\mathbf{c}; (Normal(\mu, \sigma))_\mu) = \frac{\hat{\alpha}^2}{\sigma} \left(\sum_{ij} (1 - \frac{m_{ij}^2}{2}) \delta_{c_i c_j} \right) + \frac{\hat{\beta}^2}{\sigma} \left(\sum_{ij} (1 - \frac{m_{ij}^2}{2}) (1 - \delta_{c_i c_j}) \right) + cst(\mathbf{W}) \quad (5.46)$$

with $cst(\mathbf{W})$ a constant that depends only on $\mathbf{W}$, $\hat{\alpha} = \frac{\sum_{ij} m_{ij} W_{ij} \delta_{c_i c_j}}{\sum_{ij} m_{ij}^2 \delta_{c_i c_j}}$ and $\hat{\beta} = \frac{\sum_{ij} m_{ij} W_{ij} (1 - \delta_{c_i c_j})}{\sum_{ij} m_{ij}^2 (1 - \delta_{c_i c_j})}$.

Comparing equation (5.48) with the one derived in with Poisson distribution given in equation 5.16, an analogous criterion to the modularity can be defined as

$$Q^G(\mathbf{c}; (\text{Poisson}(\psi))) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} (m_{ij} W_{ij} - \gamma m_{ij}^2) \delta_{c_i, c_j} \quad (5.47)$$

when $\alpha > \beta$.

Another particular case is the Pareto distribution.

Proposition 5.15. *Let P be a Pareto distribution with fixed scale parameter $x_m > 0$. Then, we have*

$$gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (\text{Pareto}(\psi, x_m))_\psi) = B \sum_{ij} \left[m_{ij} \log \left(\frac{W_{ij}}{\beta} \right) - \gamma \right] \delta_{c_i, c_j} + D \quad (5.48)$$

where B , depends on the parameters α and β and γ , D depends on the parameters α , β and $\mathbf{W}$. In addition, replacing α and β by their estimates, leads to

$$gQ(\mathbf{c}; (\text{Pareto}(\psi, x_m))_\psi) = - \left(\sum_{ij} (1 - \delta_{c_i, c_j}) \right) \log(\tilde{s}_2) - \left(\sum_{ij} \delta_{c_i, c_j} \right) \log(\tilde{s}_1) - n^2 + \sum_{ij} \log \left(\frac{x_m}{W_{ij}} \right) \quad (5.49)$$

where $\tilde{s}_1 = \frac{1}{2m} \sum_{ij} m_{ij} * \log \left(\frac{W_{ij}}{\beta} \right) \delta_{c_i, c_j}$ and $\tilde{s}_2 = \frac{\sum_{ij} m_{ij} * \log \left(\frac{W_{ij}}{\beta} \right) (1 - \delta_{c_i, c_j})}{\sum_{ij} (1 - \delta_{c_i, c_j})}$.

As for the case of Gaussian distribution, in case where $\beta > \alpha$, which implies that $E[P_\alpha] > E[P_\beta]$, leads to consider, instead of the modularity, the criterion

$$Q^P(\mathbf{c}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left[m_{ij} \log \left(\frac{W_{ij}}{\beta} \right) - \gamma \right] \delta_{c_i, c_j} \quad (5.50)$$

It is interesting to notice that maximizing this criterion is equivalent to maximizing the deviation to uniformity for the graph defined by $m_{ij} \log \left(\frac{W_{ij}}{\beta} \right)$.

5.1.5 Optimization of the new criteria

Convex relaxation of the problem

(Newman, 2016) suggests that, in case where the graph $\mathbf{W}$ is generated from a planted Poisson DCSBM, the algorithm 6 recovers the true latent partition. However, there is limited insight into its behavior outside this model. Therefore, we aim to gain a more in-depth understanding of this algorithm's properties. To do so, we will rely on a convex relaxation of modularity proposed by (Holloco et al., 2019), which we will adapt to our more general case. We choose this convex relaxation over others (such as (Y. Chen et al., 2018)) because (Holloco et al., 2019) establish a link between their convex relaxation and the Louvain algorithm under certain conditions. Additionally, we will discover that it shares similarities with the Evidence Lower Bound (ELBO) of the planted model log-likelihood. We briefly recall how they formulate the relaxation, and we encourage interested readers to consult their article for details on their convergence theorem (which can be adapted to our setting) and the connection between the relaxation and the Louvain algorithm.

The core idea is to introduce a matrix $\mathbf{c}$ with dimensions $n \times K$ (where, practically, K can be taken as n) such that $c_{ik} = 1$ if the class of node i is k and 0 otherwise. With these notations, the classical modularity maximization problem can be expressed as:

$$\max_{\mathbf{c} \in \{0,1\}^{n \times K}} \frac{1}{2m} \sum_{ij} \sum_{k=1}^n \left(W_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) c_{ik} c_{jl} = \max_{\mathbf{c} \in \{0,1\}^{n \times K}} \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left(W_{ij} - \frac{d_i d_j}{2m} \right) \mathbf{c}_i^T \mathbf{c}_j \quad (5.51)$$

Under the constraints that for any node i , $1^T \mathbf{c}_i = 1$, $\mathbf{c}_i \geq 0$, $c_{ik} \in \{0, 1\}$ for any i, j .

(Holloco et al., 2019) relaxed the problem by changing the conditions $c_{ik} \in \{0, 1\}$ to $c_{ik} \in [0, 1]$. Applied to the criterion gQ , its relaxed version is defined by

$$gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (P_\psi)) = \frac{1}{2m} \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [\log(P_{\alpha m_{ij}}(W_{ij})) - \log(P_{m_{ij} \beta}(W_{ij}))] \mathbf{c}_i^T \mathbf{c}_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \log(P_{m_{ij} \alpha}(W_{ij})) \right) \quad (5.52)$$

Algorithm 7 Optimization of the generalized modularity

Input: $\mathbf{c}^0$, an initial partition, I the maximal number of iterations, a parametric model (P_ψ) and a step size rules $\eta > 0$, $\eta_p > 0$. Let Θ the space of the parameters. If the step 4b is considered, initial parameters $\alpha^0, \beta^0 \in \Theta$ are needed.

1: **for** $t = 0, \dots, I - 1$ **do**

2: Do one of the following steps,

3: a)

$$(\alpha^{t+1}, \beta^{t+1}) \leftarrow \underset{\mathbf{a}, \mathbf{b}}{\operatorname{argmax}} gQ(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}^t; (P_\psi)) \quad (5.53)$$

4: b)

$$\begin{aligned} \alpha^{t+1} &\leftarrow \pi_\Theta(\alpha^t - \eta_p \nabla_\alpha gQ(\alpha^t, \beta^t, \mathbf{c}^t; (P_\psi))), \\ \beta^{t+1} &\leftarrow \pi_\Theta(\beta^t - \eta_p \nabla_\beta gQ(\alpha^t, \beta^t, \mathbf{c}^t; (P_\psi))) \end{aligned} \quad (5.54)$$

5: Set $\tilde{\mathbf{c}}^0 \leftarrow \mathbf{c}^t$

6: **for** $i = 1, \dots, n$ **do**

7: Set $\tilde{\mathbf{c}}^i \leftarrow \tilde{\mathbf{c}}^{i-1}$ and

$$\tilde{\mathbf{c}}_{i \cdot}^i \leftarrow \pi_\Delta(\tilde{\mathbf{c}}_{i \cdot}^{i-1} - \eta \nabla_{\mathbf{c}_{i \cdot}} gQ(\alpha^{t+1}, \beta^{t+1}, \tilde{\mathbf{c}}^{i-1})) \quad (5.55)$$

8: **end for**

9: Set $\mathbf{c}^{t+1} = \tilde{\mathbf{c}}^n$.

10: **end for**

Output: $\mathbf{c}^I$ the optimized partition and α^I, β^I the optimized parameters of the model.

Since the relaxed problem is, in general, non-concave in $\mathbf{c}$, (Hollocou et al., 2019) consider an alternate projected gradient descent in $\mathbf{c}_{i \cdot}$. Here we keep the same idea, but we replace the alternate projected gradient descent by a projected gradient descent, and we add a step to handle the parameters α and β . Our optimization algorithm for gQ is given in algorithm 7.

It gives the following theorem.

Theorem 5.1. *Let us consider the following hypothesis:*

- the function $\psi \mapsto P_\psi(x)$ is log-concave and two times differentiable for any x and its hessian is L -Lipschitz,
- $h_{ii} \geq 0$, where $-h_{ii} = \log(P_{m_{ii}\alpha}(W_{ii})) - \log(P_{m_{ii}\beta}(W_{ii}))$ for all nodes i ,
- $\eta \leq 1/\max_i h_{ii}$
- $\eta_p \leq 1/L$.
- $\log(P_{m_{ij}\alpha}(W_{ij}))$ is bounded.
- $m_{ij} > 0$.

Under those hypotheses, the sequence $(\mathbf{c}^t, \alpha^t, \beta^t)_t$ using algorithm 7 converges sub-linearly to a global maximum of gQ . In other terms, there exists a constant τ dependent on the model parameters such that

$$gQ(\alpha^I, \beta^I, \mathbf{c}^I; (P_\psi)) \geq gQ^* - \frac{\tau}{I} . \quad (5.56)$$

where $gQ^* = \max_{\alpha, \beta, \mathbf{c}} gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (P_\psi))$.

Remark 5.9. The order of the updates for the different parameters can be modified or taken as random.

Remark 5.10. In the case of a Poisson distribution, the second hypothesis of the theorem is verified if $A_{ii} = 0$ for all nodes i and $\alpha > \beta$.

Remark 5.11. Instead of taking fixed gradient step sizes η , η_p , they can vary in function of t and i .

Convex relaxation and fuzzy clustering

The above convex relaxation may seem arbitrary and purely analytic. However, the relaxed problem can be interpreted as a fuzzy clustering problem. Fuzzy clustering problem (Bezdek, 1981) consider classification when an object (here for us a node) can belong to several groups and not only one. Such models can appear, for example in communication networks, where researchers can work on different fields, or in biology.

To tackle fuzzy clustering using modifications of modularity, several methods have been proposed (see, for example, (M. Chen et al., 2014; D. Gómez et al., 2016)). In particular, (Nepusz et al., 2008) proposed a generalization of the modularity by replacing the coefficient δ_{c_i, c_j} with a coefficient $s_{ij} \in [0, 1]$, leading to:

$$Q^N(\mathbf{s}) = \frac{1}{2m} \sum_{ij} (W_{ij} - m_{ij}) s_{ij} . \quad (5.57)$$

In essence, they assign a coefficient a_{ik} for each pair (node, block), representing the probability that node i belongs to class k . This means that there is the relationship $s_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{jk}$, where $a_{ik} \geq 0$ and $\sum_k a_{ik} = 1$. Interestingly, this criterion aligns precisely with the one studied by (Holloco et al., 2019). The relaxed version of the criterion gQ given in equation (5.52) can then be considered a generalization of this approach.

Because the modularity can be related to the likelihood of a particular model, it may also be the case of its relaxed version. In the realm of SBM, various generalizations have been introduced to suit scenarios where nodes may belong to multiple classes. Two notable models are the Mixed Membership Stochastic Blockmodel (MMSBM) (Airoldi et al., 2008) and the Overlapping Block Model (P. Latouche et al., 2011).

In the MMSBM:

- for each node i , a vector $\pi_i \sim \text{Dirichlet}(\alpha)$ is drawn independently.
- Subsequently, vectors representing connections between nodes are drawn independently: $\mathbf{Z}_{i \rightarrow j} \sim \text{Mult}(\pi_i)$ and $\mathbf{Z}_{j \rightarrow i} \sim \text{Mult}(\pi_j)$.
- Weights are then determined such that $W_{ij} | \mathbf{Z}_{i \rightarrow j}, \mathbf{Z}_{j \rightarrow i} \sim B(\mathbf{Z}_{i \rightarrow j}^T \Theta \mathbf{Z}_{j \rightarrow i})$, where $\Theta \in [0, 1]^{K \times K}$ is a parameter matrix.

On the other hand, the Overlapping Block Model follows a similar process:

- $Z_{ik} \sim \text{Bernoulli}(\alpha_k)$, where vectors $\mathbf{Z}_i$ and $\mathbf{Z}_j$ are independent if $j \neq i$, and the Z_{ik} for $1 \leq k \leq K$ are independent.
- $W_{ij} | \mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j \sim \text{Bernoulli}(g(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j))$, where g is some function with value in $(0, 1)$.

One noteworthy aspect of the Overlapping Block Model is that a node may not belong to any of the model's classes. This feature can be advantageous when dealing with noise or outliers, for example. However, the direct connection between these models and the specific criterion proposed by (Nepusz et al., 2008) warrants further investigation.

(Daudin, Pierre, et al., 2010) provide quite the same model as (P. Latouche et al., 2011). However, the vectors $\mathbf{Z}_i$ are drawn such that $Z_{ik} \geq 0$ and $\sum_{k=1}^K Z_{ik} = 1$.

Several other models exist, see for example the references in (Daudin, Pierre, et al., 2010). In most cases, these models differ in how the vectors $\mathbf{Z}_i$ are simulated to represent node i 's membership to different classes. Subsequently, the weights are drawn conditioned on these vectors, such that $W_{ij} | \mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j \sim \text{Bernoulli}(g(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j))$.

Like the SBM scenario, it's possible to calculate the likelihood of the weights given the matrix $\mathbf{Z}$. For those models, assuming in particular that $g(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j) = \mathbf{Z}_i^T \Theta \mathbf{Z}_j$, in case of a planted model, i.e. $\theta_{ii} = \theta_{in}$, $\theta_{ij} = \theta_{out}$, $i \neq j$, the parameter is given by

$$\mathbf{Z}_i^T \Theta \mathbf{Z}_j = \theta_{out} + \left(\sum_k Z_{ik} Z_{jk} \right) (\theta_{in} - \theta_{out}) \quad . \quad (5.58)$$

In particular, if $Z_{ik} = \delta_{c_i, k}$, the same formula as for the planted model is recovered. However, in the case of fuzzy clustering, this equivalence does not hold. Specifically, when considering the profile likelihood of a Poisson distribution instead of a Bernoulli, there arises a term $W_{ij} \log(\theta_{out} + (\theta_{in} - \theta_{out}) \sum_k Z_{ik} Z_{jk})$, instead of $W_{ij} \log(\theta_{out}) + W_{ij} (\log(\theta_{in}) - \log(\theta_{out})) \sum_k Z_{ik} Z_{jk}$, where the hypothesis $\theta_{in} > 0$ and $\theta_{out} > 0$ is required to ensure that the model is well-defined. Nevertheless, in the case of the Poisson distribution, the relaxed version of gQ is a lower bound of the likelihood of a particular Overlapping Block Model.

Proposition 5.16. *Consider the planted Overlapping Block Model defined as follows,*

- $Z_{ik} \sim B(\alpha_k)$, where vectors $\mathbf{Z}_i$ and $\mathbf{Z}_j$ are independent if $j \neq i$, and the Z_{ik} for $1 \leq k \leq K$ are independent.
- $W_{ij} | \mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j \sim \text{Poisson}(g(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j))$, where

$$g(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j) = \theta_{out} + \left(\sum_k Z_{ik} Z_{jk} \right) (\theta_{in} - \theta_{out}) \quad (5.59)$$

$$\theta_{in}, \theta_{out} > 0.$$

Then the relaxed version of gQ with Poisson distribution is a lower bound of the likelihood of the planted Overlapping Block Model.

This is particularly advantageous, as maximizing a lower bound ensures that the target criterion remains above the threshold. This approach is akin to variational inference methods used for SBM estimation (Daudin, Picard, et al., 2008; P. Bickel et al., 2013).

In fact, we have that this convex relaxation can almost be rewritten as the log-likelihood of the planted model minus a positive term, mimicking the variational inference but this time for the SBM and not a fuzzy version.

Proposition 5.17. *Let $\mathbf{c}^*, \mathbf{W} \sim \mathbf{pSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \theta_{in}^*, \theta_{out}^*)$ and let $\pi_k^* = \mathbb{P}(c_1 = k)$, $1 \leq k \leq K$. Then the convex relaxation of the criterion gQ based on this model for a weighted graph $\mathbf{W}$ verifies*

$$gQ(\theta_{in}, \theta_{out}, \mathbf{c}) = VB + KL(\mathbf{c} | \boldsymbol{\pi}) \quad (5.60)$$

where

$$VB = \log(g(\mathbf{W}; \theta, \pi)) - KL(\mathbf{c} | f_{\mathbf{c}} | \mathbf{W}, \theta, \pi) \quad (5.61)$$

is the classical variational bound, $g(\mathbf{W}; \theta, \pi)$ is the true likelihood of the planted SBM, at parameters $\theta_{in}, \theta_{out}, \pi$, $f_{\mathbf{c}} | \mathbf{W}, \theta, \pi$ is the conditional distribution of the latent partition for the model given $\mathbf{W}, \theta, \boldsymbol{\pi} = \pi^{\otimes n}$, and $\mathbf{c}$ is a product distribution on the space $\{1, \dots, K\}^n$.

Thus, up to the term $KL(\mathbf{c} | \boldsymbol{\pi})$, the maximization of the lower bound goes back to the maximization of the generalized modularity with the relaxation.

Selection of the number of blocks and almost discrete optimization

The optimization framework allows the case where no assumption is made on the number of blocks, as in classical algorithms such as the Louvain one. However, to do model selection based on likelihood, it is well known that information criteria are needed to select the true model. In case where the partition matrix $\mathbf{c}$ is in $\{0, 1\}^{n \times n}$, we have that the number of clusters is

$$K = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\sum_{i=1}^n c_{ik}^2}{\sum_{i=1}^n c_{ik}} \right) \quad (5.62)$$

with the convention $\frac{\sum_{i=1}^n c_{ik}^2}{\sum_{i=1}^n c_{ik}} = 0$ when $\sum_i c_{ik} = 0$.

Thus, the classical information criteria such as BIC can be added to the criterion by replacing K by the expression above. Other formulations can be used to recover K from $\mathbf{c}$. In addition, note that in SBM literature, more adapted information criteria are often used (Daudin, Picard, et al., 2008). Here, we adopt this one for the sake of simplicity.

Except for the fuzzy clustering problem, we do not want a result where $c_{ik} \notin \{0, 1\}$. However, it may be the case with algorithms given in section 5.1.5.

Thus, we consider adding a penalty term of the form

$$\lambda \sum_{i=1}^n \|\mathbf{c}_i\|_2 \quad (5.63)$$

where $\lambda > 0$ called Barrier (see for example (Wu et al., 2019)). To see why this penalty tends to push the matrix $\mathbf{c} \in [0, 1]$ to a matrix whose elements are close to $\{0, 1\}$, we consider first adding a penalty consisting of the difference between L_1 and L_2 norms.

Let $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$. Then, clearly, we have that the L_1 minus L_2 penalty $B(\mathbf{p}) = \|\mathbf{p}\|_1 - \|\mathbf{p}\|_2$ equal zero if and only if $\mathbf{p}$ as at most 1 non-zero element.

As $B(\mathbf{p}) \geq 0$, if we want to maximize some function Q , we can penalize the problem leading to

$$Q(\mathbf{p}) - \lambda B(\mathbf{p}) \quad (5.64)$$

$\lambda > 0$. If λ is large enough, the solution of this problem will lie in $\{0, 1\}$.

Proposition 5.18. *There exists a value $\lambda_0 > 0$ such that for any $\lambda > \lambda_0$, the optimum of the penalized criterion belongs to $\{0, 1\}$.*

Now, it is easy to see that the ℓ_1 minus ℓ_2 penalty terms becomes simply ℓ_2 penalty terms.

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{p} \in \Delta^n} Q(\mathbf{p}) - \lambda \sum_{i=1}^n B(\mathbf{p}_i) &\iff \max_{\mathbf{p} \in \Delta^n} Q(\mathbf{p}) - \lambda \sum_{i=1}^n \|\mathbf{p}_i\|_1 + \lambda \sum_{i=1}^n \|\mathbf{p}_i\|_2 \\ &\iff -\lambda n + \max_{\mathbf{p} \in \Delta^n} Q(\mathbf{p}) + \lambda \sum_{i=1}^n \|\mathbf{p}_i\|_2 \\ &\iff -\lambda n - \min_{\mathbf{p} \in \Delta^n} -Q(\mathbf{p}) - \lambda \sum_{i=1}^n \|\mathbf{p}_i\|_2 \end{aligned} \quad (5.65)$$

where the barrier term simplifies because the norm L_1 disappears.

Moreover, from an optimization perspective, the L_2 norm is a convex differentiable (as $\|\mathbf{p}\|_1 = 1$), so it is simple to adapt the gradient step to take it into account.

This problem where we seek the minimum of the difference between a smooth function (not necessarily convex) and a convex function under a convex constraint has been studied by (Khamaru and Wainwright, 2018). They showed that the proximal gradient descent, with step size small enough, converges to a stationary point.

This result can be used to demonstrate that Algorithm 7 adapted to add the barrier terms converges to a local minimum.

5.1.6 Conclusion

In this paper, we started from the link demonstrated by (Newman, 2016) between the modularity and the likelihood of a particular stochastic block model having Poisson laws. This relationship introduces an automatic method for selecting the resolution parameter. We then studied this method on the one hand according to the criteria introduced by (Laarhoven and Marchiori, 2014) and on the other hand using the result of (Zhao et al., 2012) which gives conditions for the asymptotic consistency of modularity.

Faced with the limits of modularity with or without resolution parameters, we proposed and studied different alternatives. First, looking at modularity as a deviation from a null model, the configuration model, we compared the effect of different classical null models. We highlighted the fact that there exist graphs such that another choice of null model, namely the indeterminacy model (Bertrand et al., 2022) gives better results than modularity.

Still in the generalization of modularity, by resuming its link with likelihood, we proposed replacing Poisson's law with other laws such as the Gaussian or Pareto law. We then obtain new alternative criteria to modularity. In addition, the parameters of these criteria can also be chosen automatically using the link of the criteria with the likelihood. We then proposed an algorithm based on convex relaxation to optimize the developed criteria. We showed its convergence toward a global maximum and justified this choice of relaxation using its links with the variational bounds used for likelihood estimation.

Many perspectives of this work are possible from a theoretical point of view. On the one hand, for the influence of the choice of the null model, the theoretical analysis was limited to a very simple case. An extension would be to investigate the differences between the criteria in more detail. Likewise, the criteria derived from Gaussian and Pareto models have not been analyzed from a theoretical point of view. It would be interesting to see if and more probably under what constraints its criteria make it possible to consistently estimate the latent partition. On the other hand, although relaxation is related to certain models, an interesting question would be to study its properties in more detail for fuzzy-classification problems.

5.1.7 Proofs

Notations and proof of proposition 5.1

Several proofs are linked with the work of (Zhao et al., 2012). Thus, we recall some notations of the paper. Let $\mathbf{c}^*, \mathbf{x}^*, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, \text{Bernoulli}(\psi), \mathbf{P})$, where $\mathcal{X} = \{y_1, \dots, y_M\} \in \mathbb{R}^M$.

Let $\mathbf{S}$ be an array of dimension $K \times K \times M$ so that $\sum_k S_{kau} = \Pi_{au}$. We consider

$$\begin{aligned} H_{kl}(\mathbf{S}) &= \sum_{abuv} y_u y_v P_{ab} S_{kau} S_{lbv} \\ H_k(\mathbf{S}) &= \sum_l H_{kl}(\mathbf{S}) \\ h_{kl}(\mathbf{S}) &= \sum_{au} S_{kau} \quad . \end{aligned} \tag{5.66}$$

The idea behind $\mathbf{S}$ is that the coefficient S_{kau} count the mean number of nodes such that

- $c_i = k$,
- $c_i^* = a$,
- $x_i^* = y_u$.

And in particular, for $\mathbf{c} = \mathbf{c}^*$ up to a permutation of its rows, $S_{kau} = \Pi_{au}$.

We also recall their main theorem.

Theorem 5.2 (theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012)). *Consider a criterion of the form*

$$Q(\mathbf{c}) = F(\mathbf{c}^c \mathbf{W}, (n_k(\mathbf{c}))_k) \tag{5.67}$$

where $n_k(\mathbf{c}) = \sum_{i=1}^n I(c_i = k)$ and ${}^c\mathbf{W} = ({}^cW_{k,l})_{1 \leq k, l \leq K}$ with ${}^cW_{k,l} = \sum_{ij} W_{ij} I(c_i = k, c_j = l)$. Suppose that

- (*) $F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{s}))$ is uniquely maximized over $\{\mathbf{S} | \mathbf{S} \geq 0, \sum_k S_{kau} = \Pi_{au}\}$ by an array $\mathbb{D}$ such that $\mathbb{D}_{kau} = \Pi_{au} E_{ka}$ where $\mathbf{E}$ is a row permutation of the identity matrix of size K ,
- F is Lipschitz in its arguments,
- $n\rho_n \rightarrow \infty$.

Then the criterion is weakly consistent.

Proof of proposition 5.1. As we consider a planted DCSBM, with only one possible degree value equal to $1/\sqrt{2m}$, we can write, $\theta_{ij} = \frac{(\theta_{\text{in}} - \theta_{\text{out}})\delta_{c_i c_j} + \theta_{\text{out}}}{2m}$. Thus,

$$\begin{aligned}
\text{llk}(\mathbf{c}) &= \sum_{ij} \log P_{\theta_{ij}}(W_{ij}) \\
&= \sum_{ij} [W_{ij} \log(\theta_{ij}) - \theta_{ij}] \\
&= \sum_{ij} \left[W_{ij} \log((\theta_{\text{in}} - \theta_{\text{out}})\delta_{c_i c_j} + \theta_{\text{out}}) - W_{ij} \log(2m) - \frac{(\theta_{\text{in}} - \theta_{\text{out}})\delta_{c_i c_j} + \theta_{\text{out}}}{2m} \right] \\
&= \sum_{ij} \left[W_{ij} \log\left(\frac{\theta_{\text{in}}}{\theta_{\text{out}}}\right) - \frac{(\theta_{\text{in}} - \theta_{\text{out}})}{2m} \right] \delta_{c_i c_j} + 2m \log(\theta_{\text{out}}) + \theta_{\text{out}} \frac{n^2}{2m} \\
&= B \left(\frac{1}{2m} \sum_{ij} \left[W_{ij} - \frac{\gamma}{2m} \right] \delta_{c_i c_j} \right) + D
\end{aligned} \tag{5.68}$$

with D and B are independent of $\mathbf{c}$. □

Proofs of section 5.1.3

In the following, we use the notations

$$\begin{aligned}
s_1 &= s(\mathbf{W}, \mathbf{c}) \\
s_2 &= s(\overline{\mathbf{W}}, \mathbf{c}) \quad .
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Proof of proposition 5.2. The partial derivatives of the criterion are given by

$$\frac{\partial Q(\alpha, \beta, c)}{\partial \alpha} = \frac{s_1}{\alpha} - s_2, \quad \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = -\frac{s_1}{\alpha^2}, \tag{5.70}$$

$$\frac{\partial Q(\alpha, \beta, c)}{\partial \beta} = \frac{1 - s_1}{\beta} - (1 - s_2), \quad \frac{\partial^2 Q}{\partial \beta^2} = -\frac{1 - s_1}{\beta^2}, \quad \frac{\partial^2 Q}{\partial \beta \partial \alpha} = 0 \quad . \tag{5.71}$$

The Hessian is a diagonal matrix with negative coefficients, so the function is concave.

Moreover, its derivatives become zero in $\alpha = \frac{s_1}{s_2}$ et $\beta = \frac{1-s_1}{1-s_2}$, which are maximum by concavity.

Now replacing α and β by the values that maximize the criterion, it gives

$$\begin{aligned}
\tilde{Q}(c) &= \sup_{\alpha, \beta} \left[\log\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) * s_1 - (\alpha - \beta) * s_2 + \log(\beta) - \beta \right] \\
&= \log\left(\frac{s_1}{s_2} \frac{1 - s_2}{1 - s_1}\right) * s_1 - \left(\frac{s_1}{s_2} - \frac{1 - s_1}{1 - s_2}\right) * s_2 + \log\left(\frac{1 - s_1}{1 - s_2}\right) - \frac{1 - s_1}{1 - s_2} \\
&= \log\left(\frac{s_1}{s_2} \frac{1 - s_2}{1 - s_1}\right) * s_1 - \left(\frac{s_1 * (1 - s_2)}{1 - s_2} - \frac{s_2 * (1 - s_1)}{1 - s_2}\right) + \log\left(\frac{1 - s_1}{1 - s_2}\right) - \frac{1 - s_1}{1 - s_2} \\
&= \log\left(\frac{s_1}{s_2} \frac{1 - s_2}{1 - s_1}\right) * s_1 + \log\left(\frac{1 - s_1}{1 - s_2}\right) - \frac{s_1 - s_2}{1 - s_2} - \frac{1 - s_1}{1 - s_2} \\
&= \log\left(\frac{s_1}{s_2} \frac{1 - s_2}{1 - s_1}\right) * s_1 + \log\left(\frac{1 - s_1}{1 - s_2}\right) - 1 \quad .
\end{aligned}$$

□

Before continuing, we need to establish an additional proposition.

Proposition 5.19. *For the ring of cliques with K cliques and n nodes, we have for c the partition induced by the cliques,*

$$1. \quad 2m = K \left(\frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2 \right),$$

2. $s_1 = 1 - \frac{2K}{2m}$,
3. $s_2 = \frac{1}{K}$.

Moreover, on the same graph, if we consider a partition that merges cliques, so that the number of blocks $\tilde{K}$ in the new partition is equal to $\tilde{K} = K/\delta$ blocks, $\delta \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$, it gives

1. $\tilde{s}_1 = s_1 + \frac{2K}{2m} \frac{\delta-1}{\delta}$,
2. $\tilde{s}_2 = s_2 + \frac{\delta-1}{K}$.

Proof of proposition 5.19. For the graph, each clique is composed of n/K nodes. Moreover, there is no loop and each clique is linked to exactly two others, so $2m = K \left(\frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2 \right)$. For the partition induced by the cliques, we have

$$s_1 = \sum_{k=1}^K \left(\frac{\frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right)}{2m} \right) = \sum_{k=1}^K \frac{\frac{2m}{K} - 2}{2m} = 1 - \frac{2K}{2m} \quad (5.72)$$

and

$$s_2 = \sum_{k=1}^K \left(\frac{\frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2}{K \left(\frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2 \right)} \right)^2 = \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{K} \right)^2 = \frac{1}{K} \quad . \quad (5.73)$$

Now let us consider a partition with $\tilde{K} = K/\delta$ blocks,

$$\tilde{s}_1 = \sum_{k=1}^{\tilde{K}} \frac{\delta \frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2 * (\delta - 1)}{2m} = \sum_{k=1}^{\tilde{K}} \frac{\delta}{\tilde{K}} \frac{2m - \frac{2K}{\delta}}{2m} = 1 - \frac{2K}{\delta 2m} = s_1 + \frac{2K}{2m} \frac{\delta - 1}{\delta} \quad (5.74)$$

and

$$\tilde{s}_2 = \sum_{k=1}^{\tilde{K}} \left(\frac{\delta \frac{n}{K} \left(\frac{n}{K} - 1 \right) + 2 * \delta}{2m} \right)^2 = \sum_{k=1}^{\tilde{K}} \left(\frac{\delta}{\tilde{K}} \right)^2 = \frac{\delta}{K} = s_2 + \frac{\delta - 1}{K} \quad . \quad (5.75)$$

□

Proof of proposition 5.4. Using the notation of (Zhao et al., 2012), we can write the modularity as

$$\tilde{Q}(\mathbf{c}) = F_\gamma(\mathbf{c}\mathbf{W}) = \sum_k \left[\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}_{k,k}}{2m} - \gamma \left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}_k}{2m} \right)^2 \right] \quad . \quad (5.76)$$

Thus in order to prove the proposition, it is sufficient to show that the function $F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbf{S}))$, $\mathbf{S} \geq 0$, $\sum_k S_{kau} = \Pi_{au}$ is uniquely maximized in $\mathbf{S} = \mathbb{D}$.

We have that

$$\sum_k \left[\frac{H_{kk}}{\tilde{P}_0} - \gamma \left(\frac{H_k}{\tilde{P}_0} \right)^2 \right] + \sum_{k \neq l} \left[\frac{H_{kl}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{H_k H_l}{\tilde{P}_0^2} \right] = 1 - \gamma \quad , \quad (5.77)$$

Thus

$$\begin{aligned} 2F_\gamma(\mathbf{H}) &= 2 \sum_k \left[\frac{H_{kk}}{\tilde{P}_0} - \gamma \left(\frac{H_k}{\tilde{P}_0} \right)^2 \right] - (1 - \gamma) + (1 - \gamma) \\ &= \sum_k \left[\frac{H_{kk}}{\tilde{P}_0} - \gamma \left(\frac{H_k}{\tilde{P}_0} \right)^2 \right] - \sum_{k \neq l} \left[\frac{H_{kl}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{H_k H_l}{\tilde{P}_0^2} \right] \\ &= \sum_{kl} \Delta_{kl} \left[\frac{H_{kl}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{H_k H_l}{\tilde{P}_0^2} \right] \end{aligned} \quad (5.78)$$

where $\Delta_{kl} = \begin{cases} 1 & \text{if } k = l \\ 0 & \text{if } k \neq l. \end{cases}$ This implies that

$$\begin{aligned} 2F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbf{S})) &= \sum_{kl} \Delta_{kl} \left[\frac{H_{kl}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{H_k H_l}{\tilde{P}_0^2} \right] + 1 - \gamma \\ &= \sum_{kl} \sum_{ab} \Delta_{kl} S_{ka} S_{lb} \left[\frac{P_{ab}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{(\sum_s \pi_s P_{as})(\sum_t \pi_t P_{bt})}{\tilde{P}_0^2} \right] + 1 - \gamma \quad . \end{aligned} \quad (5.79)$$

Assuming that $\frac{P_{ab}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{(\sum_s \pi_s P_{as})(\sum_t \pi_t P_{bt})}{\tilde{P}_0^2} > 0$ when $a = b$ and $\frac{P_{ab}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{(\sum_s \pi_s P_{as})(\sum_t \pi_t P_{bt})}{\tilde{P}_0^2} < 0$ when $a \neq b$,

$$\begin{aligned} 2F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbf{S})) &\leq \sum_{ab} \Delta_{ab} \pi_a \pi_b S_{ka} S_{lb} \left[\frac{P_{ab}}{\tilde{P}_0} - \gamma \frac{(\sum_s \pi_s P_{as})(\sum_t \pi_t P_{bt})}{\tilde{P}_0^2} \right] + 1 - \gamma \\ &= 2F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbb{D})) \end{aligned} \quad (5.80)$$

The unicity of the optimum comes from Lemma 3.2 of (P. J. Bickel and A. Chen, 2009b). $\square$

Proof of corollary 5.5. Thus following the proof of proposition 5.3, the condition (H1g) simplifies into

$$\frac{K\theta_{in}}{\theta_{in} + (K-1)\theta_{out}} > \gamma, \quad \frac{K\theta_{out}}{\theta_{in} + (K-1)\theta_{out}} < \gamma \quad . \quad (5.81)$$

This becomes

$$(K - \gamma)\theta_{in} > \gamma(K - 1)\theta_{out}, \quad \theta_{out}(K + \gamma - \gamma K) < \gamma\theta_{in} \quad (5.82)$$

and so

$$\theta_{in} > \max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\} \theta_{out} \quad . \quad (5.83)$$

This concludes the proof of the first part.

It is easy to see that $1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} > 1$ as soon as $0 < \gamma < 1$. Also, as the function $x \mapsto \frac{x(K-1)}{K-x}$ is increasing, we have that for any $\gamma \geq 1$, $\frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma} \geq 1$. Thus, for any $\gamma > 0$,

$$\max \left\{ \frac{\gamma(K-1)}{K-\gamma}, 1 + \frac{K(1-\gamma)}{\gamma} \right\} \geq 1 \quad . \quad (5.84)$$

It is easy to see that there is equality if and only if $\gamma = 1$ which concludes the proof. $\square$

Proof of corollary 5.0.2. The modularity can be defined as $Q_\gamma(\mathbf{c}) = F_\gamma(\mathbf{c}\mathbf{W})$. As the function F_γ is lipschitz, and proposition 5.5, the theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012) implies the consistency of the Modularity. $\square$

Proof of proposition 5.5. The AutoResMod criterion can be written as

$$\tilde{F}(\mathbf{c}\mathbf{W}) = \sup_{\alpha, \beta} \tilde{F}(\mathbf{c}\mathbf{W}, \alpha, \beta) \quad , \quad (5.85)$$

where

$$\tilde{F}(\mathbf{c}\mathbf{W}, \alpha, \beta) = B(\alpha, \beta)F_\gamma(\mathbf{c}\mathbf{W}) + D(\beta) \quad , \quad (5.86)$$

with γ depending on α and β . B , D and γ are defined as in equation (5.17). Note that optimal parameters α and β exists as long as the graph is not empty.

Let $\bar{\mathbf{S}}, \bar{\alpha}, \bar{\beta} \in \operatorname{argmax}_{\mathbf{S}, \alpha, \beta} \tilde{F}(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \alpha, \beta)$. Let α^*, β^* be the maximum parameters of $\tilde{F}(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \alpha, \beta)$.

Assume that $\bar{\alpha} > \bar{\beta}$. It implies that $B(\bar{\alpha}, \bar{\beta}) > 0$. Then we have from proposition 5.4, under the condition (H1g) with $\bar{\gamma}$, we have for any array $\mathbf{S}$,

$$\begin{aligned} \tilde{F}(\mathbf{H}(\mathbf{S})) &\leq \tilde{F}(\mathbf{H}(\bar{\mathbf{S}})) \\ &= \tilde{F}(\mathbf{H}(\bar{\mathbf{S}}), \bar{\alpha}, \bar{\beta}) \\ &= B(\bar{\alpha}, \bar{\beta})F_\gamma(\mathbf{H}(\bar{\mathbf{S}})) + D(\bar{\beta}) \\ &\leq B(\bar{\alpha}, \bar{\beta})F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbb{D})) + D(\bar{\beta}) \\ &\leq B(\alpha^*, \beta^*)F_\gamma(\mathbf{H}(\mathbb{D})) + D(\beta^*) \end{aligned} \quad (5.87)$$

This means that $\tilde{F}(\mathbf{H}(\mathbf{S}))$ is uniquely maximized in $\mathbb{D}$. In addition, as $\bar{\gamma} = \gamma^*$, it is sufficient to check the condition 5.30 with γ^* .

If $\bar{\alpha} > \bar{\beta}$, it is easy to see that the result stays true if we reverse the inequalities in condition 5.30. $\square$

Proof of proposition 5.6. The condition 5.5 reduces to the condition (5.27) as we look at a planted model. In addition, as $\theta_{out} = 0$ and $\theta_{in} > 0$ this condition is verified for any value of γ and thus in particular for γ^* . $\square$

Proof of proposition 5.7. To prove this proposition, it is enough to provide a graph where the proposition is true.

Consider a graph consisting of two blocks, each containing 10 nodes, where all nodes within the same block are connected with weight 0.25, and all nodes are connected to nodes in other blocks with weight 0.75, representing a dissortive case. Let $\mathbf{c}^*$ denote the partition associated with these two blocks,



Figure 5.3 – Example of situation that highlights that the AutoResMod (and modularity) is not monotonic

Now, assume we consider a partition $\mathbf{c}$ on the graph. We denote p_1 as the number of nodes in block one of $\mathbf{c}$ that belong to block one of $\mathbf{c}^*$, and p_2 as the number of nodes in block one of $\mathbf{c}$ that belong to block two of $\mathbf{c}^*$. Looking at all the possible partitions, it gives that $\mathbf{c}^*$ is the optimal partition for $\tilde{Q}$.

We now have to verify that modularity fails on this example. Taking $\mathbf{c}$ as the block with all nodes, we find $Q_\gamma(\mathbf{c}) = 1 - \gamma$. However, $Q_\gamma(\mathbf{c}^*) = \frac{1-2\gamma}{4}$. Thus, $Q_\gamma(\mathbf{c}) < Q_\gamma(\mathbf{c}^*)$ if and only if $\gamma > 1.5$. However, this does not necessarily imply that there exists $\gamma \geq 1.5$ such that modularity can recover the partition $\mathbf{c}^*$. For instance, if $\gamma = 2$, then the best partition among those with 2 blocks is the one that mixes the two blocks with equal proportion. $\square$

Proof of proposition 5.9. Except the richness properties, the others are clear.

To prove the richness, we show that for any partition $\mathbf{c}$, then for G the associated clique graph, i.e. $W_{ij} = I(c_i = c_j)$, the AutoResMod criterion is maximal in $\mathbf{c}$. Denoting π_k the proportion of nodes in the block k of $\mathbf{c}$, we have that G is the expected graph from the model defined as $\mathbf{pSBM}(n, \pi, \text{Bernoulli}(1), \text{Bernoulli}(0))$.

We have seen in proposition 5.6 that for this kind of graphs, the consistency is ensured, i.e. applying the criterion to the expected graph allows to recover the latent partition. Thus AutoResMod applied to G recovers the partition $\mathbf{c}$ and AutoResMod is rich. $\square$

Proof of proposition 5.10. To prove that the function is not monotonic, it can be seen using the same graph proposed by (Laarhoven and Marchiori, 2014) (see Figure 5.3). The proof is similar for the one of the modularity given by (Laarhoven and Marchiori, 2014).

Moreover, the criterion is not local, as it considers links between blocks and not only those in the same block (Laarhoven and Marchiori, 2014). $\square$

Proof of proposition 5.11. With the given notations, if we can show that

$$F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) = \sum_k (H_{kk} - h_k H_k - H_k h_k + h_k^2 \tilde{\theta}_0) \quad . \quad (5.88)$$

Noticing that

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{kl} H_{kl} - \sum_{kl} h_k H_l - \sum_{kl} H_k h_l + \sum_k (h_k)^2 \tilde{\theta}_0 \\ &= \sum_k (H_{kk} - h_k H_k - H_k h_k + h_k^2 \tilde{\theta}_0) + \sum_{k \neq l} (H_{kl} - h_k H_l - H_k h_l + h_k h_l \tilde{\theta}_0), \end{aligned} \quad (5.89)$$

it gives

$$\begin{aligned} 2F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) &= \sum_{kl} \Delta_{kl} (H_{kk} - 2h_k H_k + h_k^2 \tilde{\theta}_0) \\ &= \sum_{kl} \Delta_{kl} \left(\sum_{ab} S_{ka} S_{lb} \theta_{ab} - \sum_{abv} S_{ka} S_{lb} (\pi_v \theta_{bv} + \pi_v \theta_{av}) + \sum_{ab} S_{ka} S_{lb} \tilde{\theta}_0 \right) \\ &= \sum_{kl} \sum_{ab} \Delta_{kl} S_{ka} S_{lb} \left(\theta_{ab} - \sum_v \pi_v (\theta_{bv} + \theta_{av}) + \tilde{\theta}_0 \right) \\ &\leq \sum_{kl} \sum_{ab} \Delta_{ab} S_{ka} S_{lb} \left(\theta_{ab} - \sum_v \pi_v (\theta_{bv} + \theta_{av}) + \tilde{\theta}_0 \right) \\ &= \sum_{ab} \Delta_{ab} \left(\theta_{ab} - \sum_v \pi_v (\theta_{bv} + \theta_{av}) + \tilde{\theta}_0 \right) = 2F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D})) \quad . \end{aligned} \quad (5.90)$$

The unicity is obtained by Lemma 3.2 of (P. J. Bickel and A. Chen, 2009b). $\square$

Proofs of section 5.1.4

Proof of proposition 5.12. The first part becomes

$$\begin{aligned}
\theta_{aa} &> 2\pi_a\theta_{aa} + 2(1-\pi_a)\theta_{ab} - \pi_a^2 - 2\pi_a(1-\pi_a)\theta_{ab} + (1-\pi_a)^2\theta_{bb} \iff \\
\theta_{aa}(1-2\pi_a+\pi_a^2) + (1-\pi_a)^2\theta_{bb} &> 2(1-\pi_a)\theta_{ab} - 2\pi_a(1-\pi_a)\theta_{ab} \iff \\
\theta_{aa}(1-\pi_a)^2 + (1-\pi_a)^2\theta_{bb} &> 2(1-\pi_a)(1-\pi_a)\theta_{ab} \iff \\
\theta_{aa} + \theta_{bb} &> 2\theta_{ab} \quad .
\end{aligned} \tag{5.91}$$

The second part gives

$$\begin{aligned}
\theta_{ab} &< \pi_a(\theta_{aa} + \theta_{ab}) + (1-\pi_a)(\theta_{ab}\theta_{bb}) - \tilde{\theta}_0 \iff \\
\tilde{\theta}_0 &< \pi_a\theta_{aa} + (1-\pi_a)\theta_{bb} \iff \\
\pi_a^2\theta_{aa} + 2\pi_a(1-\pi_a)\theta_{ab} + (1-\pi_a)^2\theta_{aa} &< \pi_a\theta_{aa} + (1-\pi_a)\theta_{bb} \iff \\
2\pi_a(1-\pi_a)\theta_{ab} &< \pi_a(1-\pi_a)\theta_{aa} + (1-\pi_a)\pi_a\theta_{bb} \iff \\
\theta_{ab} &< \frac{\theta_{aa} + \theta_{bb}}{2} \quad .
\end{aligned} \tag{5.92}$$

□

Proof of proposition 5.13. To compare this condition to the one obtained for the modularity with $\gamma = 1$,

$$\begin{aligned}
\theta_{ab}^2 &< \theta_{aa}\theta_{bb} \iff \\
4\theta_{ab}^2 &< 4\theta_{aa}\theta_{bb} \iff \\
4\theta_{ab}^2 &< 2\theta_{aa}\theta_{bb} + 2\theta_{aa}\theta_{bb} \iff \\
4\theta_{ab}^2 &< 2\theta_{aa}\theta_{bb} + \theta_{aa}^2 + \theta_{bb}^2 \quad (\text{using } (x-y)^2 \geq 0) \iff \\
4\theta_{ab}^2 &< (\theta_{aa} + \theta_{bb})^2 \iff \\
2\theta_{ab} &< \theta_{aa} + \theta_{bb} \quad (\theta_{ab} \geq 0) \quad .
\end{aligned} \tag{5.93}$$

Thus, if the modularity is consistent, then the deviation to the indetermination is also consistent.

To compare with the deviation to uniformity,

$$\begin{aligned}
2\theta_{ab} &< \theta_{aa} + \theta_{bb} \iff \\
2(\pi_a - \pi_a^2)\theta_{ab} &< (\pi_a - \pi_a^2)\theta_{aa} + (\pi_a - \pi_a^2)\theta_{bb} \iff \\
\tilde{\theta}_0 &< \pi_a\theta_{aa} + (1-\pi_a)\theta_{bb} \quad .
\end{aligned} \tag{5.94}$$

As $\tilde{\theta}_0 < \theta_{aa}$ for all a , implies $\tilde{\theta}_0 < \pi_a \min_k \theta_{kk} + (1-\pi_a) \min_k \theta_{kk} \leq \pi_a \theta_{aa} + (1-\pi_a) \theta_{bb}$. Thus, the consistency condition of the deviation to uniformity implies the condition of the deviations to the indetermination. □

Proof of proposition 5.14. We have

$$\begin{aligned}
\text{llk}(\mathbf{c}, \mu_{in}, \mu_{out}) &= - \sum_{ij} \log(\sigma\sqrt{2\pi}) - \frac{1}{2\sigma} \sum_{ij} (W_{ij} - m_{ij}\mu_{ij})^2 \\
&= - \sum_{ij} \left(\log(\sigma\sqrt{2\pi}) + \frac{W_{ij}^2}{2\sigma} \right) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{ij} (2W_{ij}m_{ij}\mu_{ij} - m_{ij}^2\mu_{ij}^2) \\
&= - \sum_{ij} \left(\log(\sigma\sqrt{2\pi}) + \frac{W_{ij}^2}{2\sigma} \right) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{ij} (2W_{ij}m_{ij}(\mu_{in} - \mu_{out}) - m_{ij}^2(\mu_{in}^2 - \mu_{out}^2)) \delta_{c_i c_j} + \\
&\quad \frac{1}{2\sigma} \sum_{ij} (2W_{ij}m_{ij}\mu_{out} - m_{ij}^2\mu_{out}^2) \\
&= \frac{\mu_{in} - \mu_{out}}{\sigma} \sum_{ij} \left(m_{ij}W_{ij} - \frac{\mu_{in} + \mu_{out}}{2} m_{ij}^2 \right) \delta_{c_i c_j} + \frac{1}{2\sigma} \sum_{ij} (2W_{ij}m_{ij}\mu_{out} - m_{ij}^2\mu_{out}^2) - \\
&\quad \sum_{ij} \left(\log(\sigma\sqrt{2\pi}) + \frac{W_{ij}^2}{2\sigma} \right) \quad .
\end{aligned} \tag{5.95}$$

The optimal parameters are given by

$$\hat{\mu}_{in} = \frac{\sum_{ij} m_{ij} W_{ij} \delta_{c_i c_j}}{\sum_{ij} m_{ij}^2 \delta_{c_i c_j}}, \quad \hat{\mu}_{out} = \frac{\sum_{ij} m_{ij} W_{ij} (1 - \delta_{c_i c_j})}{\sum_{ij} m_{ij}^2 (1 - \delta_{c_i c_j})}. \quad (5.96)$$

Replacing then in the equation of the likelihood gives the desired result. $\square$

Proof of proposition 5.15. First, we derive the equation of the log likelihood. Then we compute the optimal parameters and deduce the equation of the criterion.

$$\begin{aligned} \text{llk}(\mathbf{c}, \alpha_{in}, \alpha_{out}) &= \sum_{ij} \log(\alpha_{ij}) + \alpha_{ij} m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + \log\left(\frac{m_{ij}}{W_{ij}}\right) \\ &= \sum_{ij} \left[\log\left(\frac{\alpha_{in}}{\alpha_{out}}\right) \delta_{c_i c_j} + \log(\alpha_{out}) + (\alpha_{in} - \alpha_{out}) m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) \delta_{c_i c_j} + \alpha_{out} m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + \log\left(\frac{m_{ij}}{W_{ij}}\right) \right] \\ &= (\alpha_{in} - \alpha_{out}) \sum_{ij} \left[m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + \frac{\log(\alpha_{in}/\alpha_{out})}{\alpha_{in} - \alpha_{out}} \right] \delta_{c_i c_j} + \\ &\quad \alpha_{out} \sum_{ij} m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + n^2 \log(\alpha_{out}) + \sum_{ij} \log\left(\frac{m_{ij}}{W_{ij}}\right) \\ &= (\alpha_{out} - \alpha_{in}) \sum_{ij} \left[m_{ij} \log\left(\frac{W_{ij}}{\beta}\right) - \frac{\log(\alpha_{out}/\alpha_{in})}{\alpha_{out} - \alpha_{in}} \right] \delta_{c_i c_j} + \\ &\quad \alpha_{out} \sum_{ij} m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + n^2 \log(\alpha_{out}) + \sum_{ij} \log\left(\frac{m_{ij}}{W_{ij}}\right) \\ &= B \sum_{ij} \left[m_{ij} \log\left(\frac{W_{ij}}{\beta}\right) - \gamma \frac{2m}{n^2} \right] \delta_{c_i c_j} + D \quad . \end{aligned} \quad (5.97)$$

where $B = (\alpha_{out} - \alpha_{in})$, $\gamma = \frac{\log(\alpha_{out}/\alpha_{in})}{\alpha_{out} - \alpha_{in}} \frac{n^2}{2m} \geq 0$ and $D = \alpha_{out} \sum_{ij} m_{ij} \log\left(\frac{\beta}{W_{ij}}\right) + n^2 \log(\alpha_{out}) + \sum_{ij} \log\left(\frac{m_{ij}}{W_{ij}}\right)$.

In the assortive case (in the sense of the proposition), $\alpha_{out} > \alpha_{in}$ thus $B > 0$.

From the third equation, we have

$$\text{llk}(\mathbf{c}, \alpha_{in}, \alpha_{out}) = (\alpha_{in} - \alpha_{out}) * s_1 + n_{in}^2 \log(\alpha_{in}/\alpha_{out}) + \alpha_{out} s_3 + n^2 \log(\alpha_{out}) + s_4 \quad . \quad (5.98)$$

The derivatives are

$$\frac{\partial \text{llk}(\mathbf{c}, \alpha_{in}, \alpha_{out})}{\partial \alpha_{in}} = s_1 + \frac{n_{in}^2}{\alpha_{in}}, \quad (5.99)$$

$$\frac{\partial \text{llk}(\mathbf{c}, \alpha_{in}, \alpha_{out})}{\partial \alpha_{out}} = -s_1 + s_3 + \frac{n^2 - n_{in}^2}{\alpha_{out}}, \quad (5.100)$$

thus $\hat{\alpha}_{in} = \frac{n_{in}^2}{-s_1}$ and $\hat{\alpha}_{out} = \frac{n^2 - n_{in}^2}{s_1 - s_3}$, and it is easy to verify that are global maxima. Replacing them in the equation of the likelihood gives the result. $\square$

Proofs of section 5.1.5

Proof of theorem 5.1. To prove the result, we decomposed the function $-gQ$ as sum of convex functions and then applied adapted results of convex analysis.

Denote $J(\alpha, \beta, \mathbf{c}) = -gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c}; (P_\psi))$. If α and β are fixed, then we denote it simply $J(\mathbf{c})$. Let $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$ be two partitions and $\mathbf{x}$ be a vector. We define the matrix $\mathbf{C}^{(i)}$ such that for all j ,

$$C_j^{(i)}(\mathbf{a}, \mathbf{x}, \mathbf{b}) = \begin{cases} \mathbf{a}_j. & \text{if } j < i \\ \mathbf{x} & \text{if } j = i \\ \mathbf{b}_j. & \text{if } j > i \end{cases} \quad . \quad (5.101)$$

Then we have that for any matrix $\mathbf{c}^*, \alpha^*, \beta^*$,

$$\begin{aligned} J(\alpha, \beta, \mathbf{c}) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*) &= J(\alpha, \beta, \mathbf{c}) - J(\alpha, \beta, \mathbf{c}^*) + J(\alpha, \beta, \mathbf{c}^*) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*) \\ &= \left(\sum_{i=1}^n J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)) - J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}^*)) \right) \\ &\quad + J(\alpha, \beta, \mathbf{c}^*) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*) \quad . \end{aligned} \quad (5.102)$$

It is clear that $\alpha, \beta \mapsto gQ(\alpha, \beta, \mathbf{C}; (P_\psi))$ is concave as soon as $\theta \mapsto \log(\mathbb{P}(W_{ij} | m_{ij}\theta))$ is concave $\forall i, j$ as sum of concave functions. Thus, the right-hand term in equation (5.102) is a difference between a convex function evaluated in two points.

Moreover, if we differentiate gQ with respect to c_{ik} , it gives

$$\frac{\partial gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c})}{\partial c_{ik}} = \frac{2}{2m} \sum_{j=1}^n [\log(\mathbb{P}(W_{ij} | m_{ij}\alpha)) - \log(\mathbb{P}(W_{ij} | m_{ij}\beta))] c_{jk} \quad (5.103)$$

and it leads to

$$\frac{\partial^2 gQ(\alpha, \beta, \mathbf{c})}{\partial c_{ik} \partial c_{jk}} = \frac{2}{2m} [\log(\mathbb{P}(W_{ij} | m_{ij}\alpha)) - \log(\mathbb{P}(W_{ij} | m_{ij}\beta))] \delta(k, k') \quad . \quad (5.104)$$

In particular, if $\log(\mathbb{P}(A_{ii} | m_{ii}\alpha)) - \log(\mathbb{P}(A_{ii} | m_{ii}\beta)) \leq 0$ for all nodes i , the function $c_i \mapsto gQ(\alpha, \beta, (c_1, \dots, c_i, \dots, c_n))$ is concave. Thus, the function $\mathbf{x} \mapsto J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{c}^*))$ is convex. So, the equation (5.102) is a sum of difference between convex functions evaluated at different points. In fact, we have the stronger results that $\mathbf{x} \mapsto J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{c}^*))$ is quadratic in $\mathbf{x}$, i.e.

$$J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{y}, \mathbf{c}^*)) = J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{c}^*)) + \langle \nabla_i J(\alpha, \beta, \mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{c}^*)), \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle + \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 \quad . \quad (5.105)$$

To lighten the notation, we use $+$ instead of $t+1$, e.g. $\mathbf{c}^+ = \mathbf{c}^{t+1}$ and omit the t subscript.

First let $i \in \{1, \dots, n\}$, we apply the same analysis as in (Bubeck, 2015) for projected gradient descent. This leads to

$$\begin{aligned} J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i^+, \mathbf{c}^*)) - J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}^*)) &= J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i^+, \mathbf{c}^*)) - J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)) + \\ &\quad J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)) - J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}^*)) \\ &= \langle \nabla_i J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)), \mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i \rangle + \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 + \\ &\quad J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)) - J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}^+, \mathbf{c}_i^*, \mathbf{c}^*)) \\ &\leq \langle \nabla_i J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)), \mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i \rangle + \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 + \\ &\quad \langle \nabla_i J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)), \mathbf{c}_i - \mathbf{c}_i^* \rangle \\ &= \langle \nabla_i J(\mathbf{C}^{(i)}(\mathbf{c}, \mathbf{c}_i, \mathbf{c}^*)), \mathbf{c}_i^+ - \mathbf{y}_i \rangle + \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 \\ &\leq \langle h_{ii}(\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_i^*), \mathbf{c}_i^+ - \mathbf{y}_i \rangle + \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 \\ &= h_{ii} \langle \mathbf{c}_i - \mathbf{c}_i^+, \mathbf{c}_i - \mathbf{y}_i \rangle - \frac{h_{ii}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 \\ &\leq h_{max} \langle \mathbf{c}_i - \mathbf{c}_i^+, \mathbf{c}_i - \mathbf{y}_i \rangle - \frac{h_{max}}{2} \|\mathbf{c}_i^+ - \mathbf{c}_i\|_2^2 \quad , \end{aligned} \quad (5.106)$$

where the equality in line 3 comes from the quadratic property of J (c.f. Equation (5.105)), the inequality in line 5 of the convexity, the line 6 of equation 3.7 of (Bubeck, 2015) and where $h_{max} = \max\{\max_i h_{ii}, L\}$.

Note that the quadratic properties can be replaced by a smoothness inequality see e.g. lemma 3.4 of (Bubeck, 2015), for such inequality.

Also, we have that the function gQ after step a) is larger than after step b). Thus, we consider the case of step b, which can be done as in equations (5.106).

Now, we see a matrix $\mathbf{y}$ as the vector $(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n)$. Denoting by $\mathbf{p} = \mathbf{p}(\mathbf{c}, \alpha, \beta)$ the vector $(\mathbf{c}, \alpha, \beta)$ and summing the inequalities yield to

$$J(\alpha, \beta, \mathbf{c}) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*) \leq h_{max} \langle \mathbf{p} - \mathbf{p}^+, \mathbf{p} - \mathbf{p}^* \rangle - \frac{h_{max}}{2} \|\mathbf{p} - \mathbf{p}^+\|_2^2 \quad . \quad (5.107)$$

Then, using the theorem 3.7 of (Bubeck, 2015) implies

$$J(\alpha^t, \beta^t, \mathbf{c}^t) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*) \leq \frac{3h_{\max} \|p(\mathbf{c}^0, \alpha^1, \beta^1)\|_2^2 + J(\alpha^1, \beta^1, \mathbf{c}^1) - J(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*)}{t} . \quad (5.108)$$

So there exists a constant τ dependent on the model parameters such that

$$gQ(\alpha^I, \beta^I, \mathbf{c}^I; (P_\psi)) \geq gQ(\alpha^*, \beta^*, \mathbf{c}^*; (P_\psi)) - \frac{\tau}{I} . \quad (5.109)$$

□

Proof of proposition 5.16. The profile likelihood of the Overlapping Model is the product of terms

$$W_{ij} \log \left(\theta_{out} + (\theta_{in} - \theta_{out}) \sum_k Z_{ik} Z_{jk} \right) \quad (5.110)$$

while the convex relaxation involves terms in

$$W_{ij} \left(\log(\theta_{out}) + (\log(\theta_{in}) - \log(\theta_{out})) \sum_k Z_{ik} Z_{jk} \right) . \quad (5.111)$$

As the W_{ij} are positive, it is sufficient to compare the remaining terms.

Assuming that $s_{ij} = \sum_k Z_{ik} Z_{jk} \in [0, 1]$, we can invoke Jensen's inequality to demonstrate this:

$$\begin{aligned} \log(\theta_{out} + (\theta_{in} - \theta_{out})s_{ij}) &= \log((1 - s_{ij})\theta_{out} + \theta_{in}s_{ij}) \\ &\geq s_{ij}\log(\theta_{in}) + (1 - s_{ij})\log(\theta_{out}) \\ &= \log(\theta_{out}) + (\log(\theta_{in}) - \log(\theta_{out}))s_{ij} . \end{aligned} \quad (5.112)$$

This concludes the proof. □

Proof of proposition 5.17. It is easy to see that the log-likelihood of the model is given by

$$\log \left(\sum_{\mathbf{c}} \prod_{i=1}^n \pi_{c_i} \prod_{i,j} \mathbb{P}_{\theta_{in}}(W_{ij})^{\delta_{c_i, c_j}} \mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij})^{1 - \delta_{c_i, c_j}} \right) . \quad (5.113)$$

Let q be a distribution on the set of the partition of n elements in K classes. Using the notations

$$g(\mathbf{W}; \theta, \pi) = \sum_{\mathbf{c}} \prod_{i=1}^n \pi_{c_i} \prod_{i,j} \mathbb{P}_{\theta_{in}}(W_{ij})^{\delta_{c_i, c_j}} \mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij})^{1 - \delta_{c_i, c_j}} = \sum_{\mathbf{c}} f(\mathbf{c}, \mathbf{W}; \theta, \pi) , \quad (5.114)$$

we have

$$\begin{aligned} \log(g(\mathbf{W}; \theta, \pi)) &\geq \log(g(\mathbf{W}; \theta, \pi)) - KL(\mathbf{q} \parallel f_{\mathbf{c}|\mathbf{W}; \theta, \pi}) \\ &= \log(g(\mathbf{W}; \theta, \pi)) - \sum_{\mathbf{c}} q(\mathbf{c}) \log(q(\mathbf{c})) + \sum_{\mathbf{c}} q(\mathbf{c}) \log \left(\frac{f(\mathbf{c}, \mathbf{W}; \theta)}{g(\mathbf{W}; \theta)} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{c}} \log(f(\mathbf{c}, \mathbf{W}, \theta)) - \sum_{\mathbf{c}} q(\mathbf{c}) \log(q(\mathbf{c})) \\ &= \sum_{ik} q_{ik} \log \left(\frac{\pi_k}{q_{ik}} \right) + \\ &\quad \sum_{ij} \sum_k q_{ik} q_{jk} (\log(\mathbb{P}_{\theta_{in}}(W_{ij})) - \log(\mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij}))) + \\ &\quad \sum_{ij} \log(\mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij})) \\ &= -KL(\mathbf{q} \parallel \pi) + \sum_{ij} \sum_k q_{ik} q_{jk} (\log(\mathbb{P}_{\theta_{in}}(W_{ij})) - \log(\mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij}))) + \\ &\quad \sum_{ij} \log(\mathbb{P}_{\theta_{out}}(W_{ij})) . \end{aligned} \quad (5.115)$$

□

Proof of proposition 5.18. Assume that Q^* is realized at some point $\mathbf{p}^*$. If $\mathbf{p}^* \in \{0, 1\}$, then taking $\lambda \geq 0$ it will not change the solution as $Q(\mathbf{p}^*) = Q(\mathbf{p}^*) - \lambda B(\mathbf{p}^*) \geq Q(\mathbf{p}) - \lambda B(\mathbf{p}^*) \geq Q(\mathbf{p}) - \lambda B(\mathbf{p})$. No we proceed by contradiction. Let $\mathbf{c}^*$ be the maximum of Q on $\{\mathbf{c} \in \{0, 1\}^{n \times K} \mid \sum_{k=1}^K c_{ik} = 1, \forall 1 \leq i \leq n\}$. Taking $\lambda > \frac{Q(\mathbf{p}^*) - Q(\mathbf{c}^*)}{B(\mathbf{p}^*)}$ implies that

$$Q(\mathbf{p}^*) - \lambda B(\mathbf{p}^*) < Q(\mathbf{c}^*) = Q(\mathbf{c}^*) - \lambda B(\mathbf{c}^*) \quad (5.116)$$

which leads to a contradiction. Thus, for λ large enough, the coefficients of the solution take values in $\{0, 1\}$.

In addition, if $\mathbf{p} \in \Delta$, then $\|\mathbf{p}\|_1 = 1$ so $B(\mathbf{p}) = 1 - \|\mathbf{p}\|_2$. And $B(\mathbf{p}) = 0$ is equivalent to $\mathbf{p}$ has exactly one non-zero element, and it is equal to 1. $\square$

5.2 Profile Likelihood on Dependent Graphs

5.2.1 Introduction

The task of large graph classification has gained significant importance recently, particularly in domains such as biology and social networks (Lin et al., 2016; Rastelli et al., 2016). In this context, it is common to model graphs using block models like Stochastic Block Model (SBM) or its variant with degree corrections (DCSBM).

One widely used method to partition random graphs is maximizing modularity, especially for huge graphs with millions of nodes. However, modularity has limitations (Fortunato and Barthélemy, 2007), possibly because it's linked to the likelihood of a specific Poisson DCSBM (Newman, 2016).

Likelihood-based methods, such as profile likelihood (Choi et al., 2012; Zhao et al., 2012), have also received attention due to their consistency results. However, optimizing these criteria in practice can be challenging (Amini et al., 2013), leading to alternative proposals (Amini et al., 2013; Lei and Rinaldo, 2015; Y. Chen et al., 2018).

Another approach is the use of K-means (Hartigan and M. A. Wong, 1979), which is related to the likelihood of homogeneous Gaussian mixtures. While K-means is commonly used in various data settings, there are only few consistency results for K-means on SBM. Recently, a relaxed version showed asymptotic exact recovery (Giraud and Verzelen, 2019). Their algorithm has complexity in $O(n^7)$ which makes it impossible to use on large graphs. Therefore, to optimize the K-means criterion, which is a NP-hard problem (Kovalyov and Pesch, 2010), heuristics are typically employed, making consistency analysis challenging.

From a theoretical perspective, a limitation of the DCSBM is that it assumes edge weights to be conditionally independent given the block structure, which may not always hold true. For instance, studies on networks like the Amazon product recommendation network suggest that models allowing for dependencies within blocks, known as local dependency graphs, provide better fits (Babkin et al., 2020; Schweinberger and Handcock, 2015). Real random graphs can also exhibit dependencies between blocks, as seen in correlation matrices. For instance, in finance, particular block models have been applied to correlation matrices of daily closing values of stocks in the NASDAQ100 index (Perreault et al., 2019). However, estimating such models can be challenging. To address this, researchers have proposed various estimation methods. (Schweinberger, 2020) uses approximate Bayesian methods to estimate the partition and parameters of local dependency graphs, while (Babkin et al., 2020) utilize likelihood-based methods tailored for classical SBMs.

Based on the limitations of block models, such as potential misspecifications in edge distributions or dependencies between them, this present section aims to explore the properties of classical profile likelihood methods (assuming Poisson or Gaussian edge distributions) and the K-means algorithm in the context of random graphs with a block structure. Despite these limitations, these methods offer efficient algorithms, even if approximate, capable of handling high-dimensional data (Daudin, Picard, et al., 2008). Additionally, in subsection 5.2.2 we propose simple generalizations of the likelihood for Gaussian SBMs and K-means, which enable asymptotic consistency of the estimated partition under a DCSBM.

First we look at the asymptotic properties of those criteria under a block model, with potentially different distribution in blocks, but with same means, under some regular assumptions, the asymptotic consistency is preserved. Then we provide some evidence, why estimation methods for SBM should behave quite the same under some local dependency graphs and illustrate it with simulations. Finally, we consider the case of correlation matrices. After justifying how block structure can naturally arrive based on possible latent variables of the models, we demonstrate that methods such as K-means and the profile likelihood of a Gaussian SBM can asymptotically recover the true block structure of the correlation matrix.

5.2.2 Notations, Definitions, and Criteria

First, we start by giving some definitions.

Block Models

Among the vast literature of block random graph models, the model called **Degree Corrected Stochastic Block Model (DCSBM)** is particularly used. This model proposed by (Karrer and Newman, 2011) allows both to have a structure of blocks defined through a so-called latent partition but also allows heterogeneity within these blocks thanks to coefficients called degree correction factors. More formally, a random graph, which we identify with its (potentially weighted) adjacency matrix $\mathbf{W}$, with n nodes comes from a DCSBM if the distribution of the graph is the same as the process following

Definition 5.9. • Let $P_\psi, \psi \in \Psi$ be a parametric family of distributions on $\mathbb{R}$, from which the weights of the graph edges will be drawn.

- Let $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}$ be a finite subset of cardinal M and Π a probability on $\{1, \dots, K\} \times \mathcal{X}$. There is a **latent partition** $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$ and a vector $\mathbf{x} \in \mathcal{X}^n$ generated as

$$(c_i, x_i) \stackrel{i.i.d}{\sim} \Pi \quad (5.117)$$

This is interpreted as : $c_i = k$ means that node i belongs to the class k and x_i is the **degree correction** of node i .

- Let $\Theta \subseteq \mathbb{R}$ such that $\forall \theta \in \Theta, \forall x, x' \in \mathcal{X}, xx'\theta \in \Psi$ and let $\boldsymbol{\theta} = (\theta_{k,l})$ be a $K \times K$ matrix of parameters, $\theta_{k,l} \in \Theta$.
- Conditionally on $\mathbf{c}$ and $\mathbf{x}$, the **(weighted) adjacency matrix** of the graph is drawn from

$$W_{ij} \mid c_i, c_j, x_i, x_j \stackrel{\text{d}}{\sim} P_{x_i x_j \theta_{c_i, c_j}}, \text{ for } i \geq j; \quad (5.118)$$

$$W_{ij} = W_{ji}. \quad (5.119)$$

We then denote

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}).$$

We also denote $\pi_k = \Pi(\{k\} \times \mathcal{X})$ the probability, for each node, to be in class k .

Note that for the identifiability of the model, an assumption on the distribution of $\mathbf{x}$ is needed. For example, (Karrer and Newman, 2011) propose to use $\sum_i I(c_i = k)x_i = 1$. Here under such models, similarly to (Zhao et al., 2012), we assume that $E[x_i] = 1$.

As real graphs are often sparse, it is often convenient to assume that a proportion $(1 - \rho)$ of the edges is set to 0, $\rho \in (0, 1]$. We then said the model to have a ρ sparsity pattern. This leads to consider that the weighted matrix of the graph $\mathbf{W}$ is generated as

$$W_{ij} \mid c_i, c_j, x_i, x_j \stackrel{\text{d}}{\sim} \rho P_{x_i x_j \theta_{c_i, c_j}} + (1 - \rho)\delta_{\{0\}}, \text{ for } i \geq j. \quad (5.120)$$

In such a case, we write

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{sDCSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}, \rho). \quad (5.121)$$

The classical setting corresponds to $\rho = 1$.

A particularity of the DCSBM with Bernoulli distribution is that the mixture induced by the sparsity belongs to the Bernoulli model, which leads to

$$\text{sDCSBM}(n, \Pi, (Bernoulli(\psi)), \boldsymbol{\theta}, \rho) \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (Bernoulli(\psi)), \rho\boldsymbol{\theta}). \quad (5.122)$$

The DCSBM encompasses one of the most famous block models, called **Stochastic Block Model (SBM)**. This model introduced by (Holland et al., 1983) corresponds to the case where there is no degree correction, i.e. $M = 1$ or $\mathbf{x}$ is a constant vector. In such case, we simply denote

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{sSBM}(n, \pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}, \rho). \quad (5.123)$$

and we consider π to be a probability on $\{1, \dots, K\}$.

A particularity of the SBM compared to the DCSBM is that there is no need to consider a parametric model as in each block, the distributions are the same for all nodes. In those situations, we replace the notation $\text{sSBM}(n, \Pi, (P_\psi), \boldsymbol{\theta}, \rho)$, by

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{sSBM}(n, \pi, (P_{k,l})_{1 \leq k, l \leq K}, \rho), \quad (5.124)$$

where the $P_{k,l} = P_{\theta_{k,l}}$ are a set of K^2 distributions, and if there is no particular sparsity pattern, we denote simply

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{SBM}(n, \pi, (P_{k,l})) \quad (5.125)$$

In fact, this definition does not depend on a particular parametric model. And thus, we sometimes use it without requiring a parametric model.

We also introduce a new version, which generalizes the DCSBM, where the degree correction factors have influence at least on the mean of the distributions. This new class of models clearly includes nonparametric SBM.

Definition 5.10. If

- $\mathcal{X}$, Π , $\mathbf{c}$, $\mathbf{x}$ and $\boldsymbol{\theta}$ are the same as in Definition 5.9 ;
- conditionally on $\mathbf{c}$ and $\mathbf{x}$, the weights W_{ij} are drawn independently and verify

$$E[W_{ij} | c_i, c_j, x_i, x_j] = x_i x_j \theta_{c_i, c_j}; W_{ij} = W_{ji}; \quad (5.126)$$

then we write

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \mathbf{gBM}(n, \Pi, \boldsymbol{\theta}).$$

Remark 5.12. In particular, if a proportion $1 - \rho$ of the edges weights are set to 0, it corresponds simply to a model $\mathbf{gBM}(n, \Pi, \rho\boldsymbol{\theta})$.

Given the observation of a graph $\mathbf{W}$, where $\mathbf{c}^*, \mathbf{W}$ is drawn from a random graph model, there are two main problems: firstly estimating the latent partition and secondly estimating the model parameters (P. Bickel et al., 2013). In this work we focus on the first task. That is, we aim at estimating the latent partition $\mathbf{c}^*$, by maximizing in $\mathbf{c}$ some criterion $Q(\mathbf{c}, \mathbf{W})$.

When estimating the latent partition of a graph with a block structure, several metrics can be considered. One of the most classic is simply the number of classification errors defined for two partitions $\mathbf{e}, \mathbf{c}$ of V a set with n nodes, i.e.

$$\|\mathbf{e} - \mathbf{c}\|_{P_n} = \min_{\sigma \in \Sigma_K} \sum_{i=1}^n I(e_i \neq \sigma(c_i)) \quad (5.127)$$

where Σ_K is the set of permutations of $\{1, \dots, K\}$.

We also consider the following notations.

We define the matrix norms $\|\mathbf{W}\|_{\max} = \max_{ij} |W_{ij}|$ and $\|\mathbf{W}\|_{\ell_1} = \sum_{ij} |W_{ij}|$.

Definition 5.11 (weak consistency). Let K_n be a sequence of strictly positive integers, $Q_n : \{1, \dots, K_n\}^n \times \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ a sequence of functions (criteria) and $\mathbf{BM}_n$ a sequence of random graph models, i.e. of distributions on $\{1, \dots, K_n\}^n \times \mathbb{R}^{n \times n}$.

We say that (Q_n) is weakly consistent (for $(\mathbf{BM}_n)$) if $\forall \epsilon > 0$,

$$\forall n, \mathbf{c}_n^*, \mathbf{W}_n \sim \mathbf{BM}_n, \forall \hat{\mathbf{c}}_n \in \operatorname{argmax} Q_n(\cdot, \mathbf{W}_n) \implies \mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}}_n - \mathbf{c}_n^*\|_{P_n} > \epsilon \right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

The above definition will be made clear in the following section, dealing with explicit criteria.

Profile Likelihood Criteria

For the estimation of the partition under the hypothesis of an SBM or a DCSBM and their variants, a criterion which has been used many times is the profile likelihood. This differs from the model likelihood in two ways. On the one hand, the latent partition is treated as a parameter, that is to say, we look at the (log-)likelihood of the graph weights, also called partial (log-)likelihood:

$$\operatorname{llk}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{W}, (P_\psi)) = \sum_{ij} \log P_{x_i x_j \theta_{c_i, c_j}}(W_{ij}) = \sum_{kl} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) \log P_{x_i x_j \theta_{k, l}}(W_{ij}) \quad (5.128)$$

On the other hand, the objective of the **profile likelihood** being to find the latent partition, the maximum is taken on the other parameters. That is to say that the profile (log-)likelihood of the partition $\mathbf{c}$ is written as

$$\operatorname{pllk}(\mathbf{c}; \mathbf{W}, (P_\psi)) = \sup_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}} \operatorname{llk}(\mathbf{c}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}; \mathbf{W}, (P_\psi)) \quad (5.129)$$

In the case of binary randomness, (Zhao et al., 2012) gives a general theorem (c.f. Theorem 4.1 of their paper) for the convergence of the latent partition estimator. We recall this theorem in the following section 5.3.

We will use the following

Definition 5.12. Given an adjacency matrix $\mathbf{W}$ of size $n \times n$ and a partition $\mathbf{c} \in \{1, \dots, K\}^n$, the graph induced by $\mathbf{c}$ on $\mathbf{W}$ is the graph of K nodes (each representing a class), the adjacent matrix of which is ${}^c\mathbf{W}$

defined by:

$${}^cW_{k,l} = \sum_{i,j} I(c_i = k, c_j = l) W_{i,j} . \quad (5.130)$$

We also define

$${}^cW_k = \sum_{l=1}^K {}^cW_{k,l} , \quad (5.131)$$

which is the total weight of edges outside of the class k , and

$$n_k(\mathbf{c}) = \sum_{i=1}^n I(c_i = k) , \quad (5.132)$$

which is the number of nodes in the class k . Lastly, we denote by d_i the **empirical degree** of node i

$$d_i = \sum_j W_{ij} . \quad (5.133)$$

(Zhao et al., 2012) show that the profile likelihood of a Poisson SBM model is asymptotically consistent under an SBM and likewise for the DCSBM case, both with Bernoulli distributed weights.

While the choice of the Poisson model for binary weights may look surprising, (Zhao et al., 2012) justify it by the fact that asymptotically, for parsimonious models, Poisson's law and Bernoulli's law are close. In addition, the profile likelihood of Poisson models is easier to handle than the one of Bernoulli.

These two criteria can be written (up to constant terms) as

- Poisson SBM :

$$\text{pllk}(\mathbf{c}; \mathbf{W}, \text{Poisson}) = \sum_{kl} {}^cW_{k,l} \log \frac{{}^cW_{k,l}}{n_k(\mathbf{c})n_l(\mathbf{c})} , \quad (5.134)$$

- Poisson DCSBM :

$$\text{pllk}(\mathbf{c}; \mathbf{W}, \text{Poisson}) = \sum_{kl} {}^cW_{k,l} \log \frac{{}^cW_{k,l}}{{}^cW_k {}^cW_l} , \quad (5.135)$$

Equation (5.135) is derived under the hypothesis that $\sum_i I(c_i = k)x_i = 1$, for all blocks k (c.f. (Karrer and Newman, 2011)). Such constraints are needed to ensure identifiability of the model. The equation (5.135) remains the same for any constraints of the form

$$\sum_i I(c_i = k)x_i = r_k, \quad k \in \{1, \dots, K\}$$

where $r_k > 0$ (c.f. Proposition 5.20 below).

Proposition 5.20. *Let $\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{DCSBM}(n, \Pi, (\text{Poisson}(\psi)))$. Consider the constraints*

$$\sum_i I(c_i = k)x_i = r_k, \quad k \in \{1, \dots, K\} \quad (5.136)$$

where $r_k > 0$. The maximization under constraints of the profile likelihood of the model is equivalent to maximizing under constraints

$$\mathbf{c} \mapsto \sum_{kl} {}^cW_{k,l} \log \frac{{}^cW_{k,l}}{{}^cW_k {}^cW_l} .$$

Remark 5.13. *The difference between the profile likelihoods of Poisson SBM and DCSBM given in (5.134) and (5.135) is that terms n_k are replaced by cW_k . Under an SBM, $E[d_i | c] = E[d_j | c]$, if $c_i = c_j$. Thus, using ${}^cW_k = \sum_{i:c_i=k} d_i$, it leads to $E[{}^cW_k | c] = n_k E[d_i | c]$. This implies that, up to a constant term, the likelihood of the DCSBM is almost identical to the one of the SBM if there is no degree correction.*

Considered as a function of $\mathbf{c}$ and $\mathbf{W}$, a particularity of these two criteria is that they depend uniquely on averages of the weights $\mathbf{W}$ in the blocks and potentially on the size of the latter. It is therefore natural to ask whether applying these criteria to non-binary block random graph models would also allow an asymptotic estimation of the latent partition.

Moreover, recently, (Giraud and Verzelen, 2019) showed that the K -means method also allows finding the latent partition of a binary SBM model. As the K -means criterion can be used in practice with any real data, we expect their results to remain true in more general cases. With our notations, the usual **K -means criterion**,

see e.g. Equation 1 of (Giraud and Verzelen, 2019), applied to the rows of $\mathbf{W}$ can be written as

$$K\text{-means}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = \sum_k \sum_j \left[\sum_i I(c_i = k) W_{ij}^2 - \frac{1}{n_k(\mathbf{c})} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right]. \quad (5.137)$$

The details of the computations to rewrite the K -means criterion as (5.137) are given in equation (5.179) of the Appendix.

Remark 5.14. *Unlike the pll criteria, which are maximized, the K -means criterion is built for being minimized.*

The profile likelihood in the case of a Poisson model (c.f. Equations (5.134) or (5.135)) may not be defined if the weights are negative. Thus, we can also look at the (log-)likelihood of a Gaussian SBM model. We then obtain

$$\text{pll}(\mathbf{c}; \mathbf{W}; \text{Gaussian}) = \sum_{kl} \left[\frac{{}^c W_{k,l}^2}{n_k(\mathbf{c}) n_l(\mathbf{c})} - {}^c W_{k,l}^{(2)} \right] \quad (5.138)$$

where ${}^c W_{k,l}^{(2)} = \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l) W_{ij}^2$.

Remark that $\sum_{kl} {}^c W_{k,l}^{(2)}$ does not depend on $\mathbf{c}$. Thus maximizing the pll criterion is equivalent to maximizing the reduced pll criterion given by

$$\text{reduced-gaussian-pll}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = \sum_{kl} \frac{{}^c W_{k,l}^2}{n_k(\mathbf{c}) n_l(\mathbf{c})}, \quad (5.139)$$

because the terms $\sum_{kl} {}^c W_{k,l}^{(2)}$ do not depend on $\mathbf{c}$.

As noted by (Karrer and Newman, 2011), the DCSBM model may however be more adapted to real graphs. Furthermore, the profile likelihood of a Gaussian DCSBM is difficult to write, just like the K -means method. To propose criteria for this type of model, we simply propose replacing the block sizes $(n_k(\mathbf{c}))_k$ by $({}^c W_k)_k$ in the criteria (5.137) and (5.139), similar to what happens for the profile likelihood of the Poisson distribution. We then obtain the two new criteria

$$mK\text{-means}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = \sum_k \sum_j \left[\sum_i I(c_i = k) W_{ij}^2 - \frac{1}{{}^c W_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right] \quad (5.140)$$

and

$$m\text{pll}(\mathbf{c}; \mathbf{W}; \text{Gaussian}(\psi)) = \sum_{kl} \left[\frac{{}^c W_{k,l}^2}{{}^c W_k {}^c W_l} \right]. \quad (5.141)$$

We refer to them in the remainder as K -means criterion modified for DCSBM and the Gaussian profile likelihood modified for DCSBM.

Remark 5.15. *Assuming $n_k \leq {}^c W_k$, Equation (5.140) can be rewritten in an analogous formulation to the usual K -means formulation. Indeed, simple computations lead to*

$$mK\text{-means}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = \sum_k \sum_j I(c_j = k) \left\| \mathbf{W}_{\cdot j} - \frac{1 + \sqrt{1 - n_k / {}^c W_k}}{n_k} \sum_{j'} I(c_{j'} = k) \mathbf{W}_{\cdot j'} \right\|_2^2.$$

Our modification thus simply modifies the K -means criterion to consider a deviation to the SBM using the term $\sqrt{1 - n_k / {}^c W_k}$.

5.2.3 Conditions for the Consistency of the Criteria

Except for the K -means and modified K -means criteria, all the criteria presented in this section can be written in the general form

$$Q(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = F({}^c \mathbf{W}, (n_k(\mathbf{c}))) \quad (5.142)$$

where $F = F_K$ is a function whose arguments size depends on K , while the function $Q = Q_n$ has arguments whose size depends on n .

Other criteria, such as the modularity (Newman and Girvan, 2004), can also be written under the form (5.142).

In their paper, (Zhao et al., 2012) provided a result for such generic criteria (Theorem 4.1), which is recalled here in Theorem 5.3. One of the conditions of this theorem is that the expected criterion (in a literal sense) is

maximal at the latent partition $\mathbf{c}^*$. While verifying this condition seems complex, (Zhao et al., 2012) demonstrate that a sufficient condition for a criterion F to verify this condition is that for any array $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{K \times K \times M}$ such that $S_{kau} \geq 0$ and $\sum_k S_{kau} = \Pi_{au}$,

$$F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) \leq F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D})) \quad , \quad (*)$$

with equality holding if and only if $\mathbf{S} = \mathbb{D}$. We have used the following notations,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{S})_{kl} &= \sum_{abuv} S_{kau} S_{lbv} y_u y_v \theta_{ab} \\ \mathbf{h}(\mathbf{S})_k &= \sum_{au} S_{kau} \end{aligned} \quad (5.143)$$

and $\mathbb{D}_{kau} = \delta_{ka} \Pi_{au}$.

Remark 5.16. In case $\mathbf{S} = \mathbb{D}$, we have

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbb{D})_{kl} &= \sum_{uv} y_u y_v \theta_{kl} \Pi_{ku} \Pi_{lv} \\ \mathbf{h}(\mathbb{D})_k &= \sum_u \Pi_{ku} \quad . \end{aligned} \quad (5.144)$$

The function $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ can be related to ${}^c\mathbf{W}$ and (n_k) in the sense that if $\mathbf{W}, \mathbf{x}, \mathbf{c}^* \sim \mathbf{gBM}(n, \Pi, \theta)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{R}(\mathbf{c}))_{kl} &= E[{}^c W_{k,l} \mid \mathbf{c}^*] \\ \mathbf{h}(\mathbf{R}(\mathbf{c}))_k &= n_k(\mathbf{c}) \end{aligned} \quad (5.145)$$

where

$$\mathbf{R}_{kau}(\mathbf{c}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(c_i = k, c_i^* = a, x_i = y_u) \quad .$$

The idea behind this equation is that as $\mathbf{R}_{kau}(\mathbf{c}^*) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \Pi_{au} \delta_{ka} = \mathbb{D}_{kau}$, the condition (*) means that if the function $\mathbf{S} \mapsto F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S}))$ is maximal in $\mathbb{D}$, in some sense, this is equivalent to saying that the expected version of the criterion considered is maximized in $\mathbf{c}^*$.

In the case of an SBM, there is no degree correction, i.e. $M = 1$. Without loss of generality, we can assume that $\mathcal{X} = \{1\}$. Thus, denoting $S_{ka} = S_{ka1}$, $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ simplify into

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{S})_{kl} &= \sum_{ab} S_{ka} S_{lb} \theta_{ab} \\ \mathbf{h}(\mathbf{S})_k &= \sum_a S_{ka} \quad . \end{aligned} \quad (5.146)$$

Condition (*) becomes

$$F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) \leq F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D})) \quad (**)$$

where $\mathbb{D}_{ka1} = \mathbb{D}_{ka} = \delta_{ka} \pi_a$.

Remark 5.17. In case $\mathbf{S} = \mathbb{D}$, we have

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbb{D})_{kl} &= \theta_{kl} \pi_k \pi_l \\ \mathbf{h}(\mathbb{D})_k &= \pi_k \quad . \end{aligned} \quad (5.147)$$

Remark 5.18. The equations (5.144) and (5.147) have in some sense the same form. Indeed, (Zhao et al., 2012) have noticed that denoting $\tilde{\pi}_k = \sum_u y_u \Pi_{ku}$, we have that (5.144) writes as

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbb{D})_{kl} &= \tilde{\pi}_k \tilde{\pi}_l \theta_{kl} \\ \mathbf{h}(\mathbb{D})_k &= \tilde{\pi}_k \quad , \end{aligned} \quad (5.148)$$

thus being the same equations as in (5.147) with $\tilde{\pi}$ instead of π .

Remark 5.19. Even though conditions (*) and (**) do not require any assumption on the graph generating process, assumptions on the model such as gBM are required to interpret these two conditions in terms of maximality in $\mathbf{c}^*$.

(Zhao et al., 2012) studies those condition for different criteria. In particular, they show the following proposition. Note that (*) implies (**).

Proposition 5.21 (Theorems 3.3 and 3.4 of Zhao et al., 2012). *The profile likelihood of a Poisson DCSBM given in Equation (5.135) is of the form (5.142) for some F which satisfies (*).*

*The profile likelihood of a Poisson SBM given in Equation (5.134) is of the form (5.142) for some F which satisfies (**).*

It is easy to generalize this result to a $\mathbf{gBM}(n, \Pi, \theta)$ with $\theta_{k,l} \in \Theta = \mathbb{R}_*^+$. Now we give the corresponding results for the criteria that we have introduced. Remember that the condition (*) can be replaced by (**) when $|\mathcal{X}| = 1$.

Proposition 5.22. *The reduced Gaussian SBM profile likelihood given in Equation (5.139) is of the form (5.142) for some F which satisfies (**).*

Proposition 5.23. *The Gaussian profile likelihood modified for DCSBM given in Equation (5.141) is of the form (5.142) for some F which satisfies (*).*

Proposition 5.24. *Let $\mathbf{c}^*, \mathbf{W} \sim \mathbf{gBM}(n, \Pi, \theta)$.*

1. *If $\mathcal{X} = 1$, the K -means criterion given in Equation (5.137) satisfies*

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} K\text{-means}(\mathbf{c}, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) = \{\mathbf{c} | \exists \sigma \in \Sigma_K, \forall i, \sigma(c_i) = c_i^*\} \quad .$$

2. *The criterion K -means is related to the profile likelihood of a Gaussian SBM (c.f. Equation (5.139)) in the sense that*

$$\frac{1}{n^2} K\text{-means}(\mathbf{c}^*, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) \xrightarrow{a.s.} F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D}))$$

where F is based on the profile likelihood of Gaussian SBM.

3. *The modified K -means criterion defined in Equation (5.140) satisfies*

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} mK\text{-means}(\mathbf{c}, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) = \{\mathbf{c} | \exists \sigma \in \Sigma_K, \forall i, \sigma(c_i) = c_i^*\} \quad .$$

Remark 5.20. *Point 2 of the proposition 5.24 suggests that, asymptotically, minimizing the K -means criterion is equivalent to maximizing the profile log-likelihood of a Gaussian SBM.*

So, for now, those criteria look interesting at least theoretically as they can asymptotically distinguish any partition from the true latent one.

5.2.4 Theoretical Properties of the Criteria under Block Models

Before looking at the influence of some misspecifications in the graph model, we first recall Theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012).

Theorem 5.3 (Zhao et al., 2012). *Consider a sequence*

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \mathbf{DCSBM}(n, \Pi, (\text{Bernoulli}(\psi)), \rho_n \theta) \quad (5.149)$$

Let $0 < \rho_n \leq 1$ be a decreasing sequence such that $n\rho_n \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$, and let Q_n be a sequence of criteria satisfying (5.142) for some function F which is Lipschitz¹ and verifies ().*

Then Q_n is asymptotically weakly consistent.

Remark 5.21. *Here, Π and θ do not depend on n ; in particular, the number K of classes and M of correction factors do not depend on n .*

With the properties 5.21 to 5.24 in the previous section, we clearly have that all the criteria presented satisfy the hypothesis of this theorem and so are asymptotically consistent under sparse Bernoulli DCSBM with a fixed number of blocks.

Nevertheless, this theorem has two main limitations. First, the number of blocks K in the model does not depend on the number of nodes n . However, according to (Rohe, Qin, et al., 2014), in real graphs it may be more suited to allow K to grow as the number of nodes increases. So, we seek to authorize that K increases with n . Furthermore, the hypothesis that the edge weights are drawn according to Bernoulli's law is very restrictive. Indeed, many graphs have finite, or even continuous, support weights (Airoldi et al., 2008). This is therefore the second point that we seek to generalize. Other limitations of the model can be pointed out. We could also cite as a possible improvement the fact of authorizing the corrective factors of the degrees to take an infinite number of values, as in (Gulikers et al., 2018). However, this differs greatly from the model considered and is left as a future work.

In our generalization, we consider the following model that we call $\Gamma\mathbf{gBM}$.

1. F is Lipschitz in the sense that $|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_1 \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\max} + L_2 \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_2$.

Definition 5.13. We say that a $\mathbf{gBM}(n, \Pi, \rho\theta)$ is a $\Gamma\mathbf{gBM}(n, \Pi, \rho\theta)$, if for any

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \mathbf{gBM}(n, \Pi, \rho\theta) \quad , \quad (5.150)$$

we have that

- the weights $(W)_{i,j}$ are sub-Gamma² with variance factor $\rho_n v^2$, $v \neq 0$;
- the sequence $\left(\max_{y, y' \in \mathcal{X}, 1 \leq k, l \leq K} |yy' \theta_{k,l}| \right)_{n \in \mathbb{N}}$ is bounded.

By adapting the concentration inequalities in the proof of Theorem 5.3, we derive the following result.

Theorem 5.4. Let $(\rho_n)_n \in (0, 1]$. Consider a sequence

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \Gamma\mathbf{gBM}(n, \Pi_n, \rho_n \theta_n) \quad . \quad (5.151)$$

Let Q_n be a sequence of criteria such that

$$Q_n(\mathbf{c}_n, \mathbf{W}_n) = F_{K_n} \left(\frac{\mathbf{c}_n \mathbf{W}_n}{n^2 \rho_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c}_n)}{n} \right) \right) . \quad (5.152)$$

Suppose that

- (i) the functions F_K are L_K -Lipschitz³ and satisfy (*) ;
- (ii) $\frac{n^2 \rho_n}{\max(n \log(n), K_n^2) L_K^2} \rightarrow \infty$ and $\frac{n}{K_n M_n L_K^2} \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$.

Then Q_n is asymptotically weakly consistent.

Remark 5.22. Contrary to Theorem 5.3, Π_n , θ_n , K_n and M_n can depend on n .

Remark 5.23. Clearly, if the data come from an $\Gamma\mathbf{gBM}$ with no degree correction, condition (**) is sufficient for the theorem to be valid.

Corollary 5.4.1. Let $(\rho_n)_n \in (0, 1]$. Consider a sequence

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \Gamma\mathbf{gBM}(n, \Pi_n, \rho_n \theta_n) \quad (5.153)$$

with the same model as in Theorem 5.4.

Assume that

$$\frac{n^2 \rho_n}{\max(n \log(n), K_n^2)} \rightarrow \infty \text{ and } \frac{n}{K_n M_n} \rightarrow \infty \text{ as } n \rightarrow \infty.$$

Then we have that the following criteria are weakly consistent under the associated model

- the Poisson profile likelihood given in Equation (5.134) under the $\Gamma\mathbf{gBM}$ with no degree correction,
- the Poisson profile likelihood given in Equation (5.135) under the $\Gamma\mathbf{gBM}$.

Remark 5.24. An interesting thing about that result is that it implies that the profile likelihood for a Poisson DCSCBM can be used under any DSCBM where the true distributions are positive, have the same mean in each block and relatively light tails. This is very helpful in practice, since it does not require particular knowledge on the data outside the presence of a block structure.

Remark 5.25. Compared to the work of (Zhao et al., 2012), our approach of the proof allows K growing with n . Comparing to the classical result of (Choi et al., 2012) under Bernoulli distributions for the weights, which imposes that $\frac{n \rho_n}{\log(n)^3} \rightarrow \infty$ with $K = O(n^{1/2})$ for the consistency of the classification, our result implies that there is consistency when $\frac{n \rho_n}{\log(n)} \rightarrow \infty$ when using the Poisson profile likelihood. So, our result recovers the same rates as those results and, in addition, is true for arbitrary distributions.

The corollary 5.4.1 on Poisson profile likelihood requires that the mean of the distribution in each block is positive. This may be restricted in some cases. So, to overcome this, we show that using the profile likelihood in the Gaussian case (or a criterion close to the same idea) can solve this.

2. A short remainder on concentration inequalities is given in appendix 5.2.7, where proposition 5.29 provides a simple condition for the weights of a sparse graph to be sub-Gamma.

3. F_K is Lipschitz in the sens that $|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_K (\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\ell_1} + \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_1)$.

Corollary 5.4.2. *Let $(\rho_n)_n \in (0, 1]$. Consider a sequence*

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \Gamma \mathbf{gBM}(n, \Pi_n, \rho_n \boldsymbol{\theta}_n) \quad (5.154)$$

with the same model as in Theorem 5.4.

Assume that

$$\frac{n^2 \rho_n}{\max(n \log(n), K_n^2)} \rightarrow \infty \text{ and } \frac{n}{K_n M_n} \rightarrow \infty \text{ as } n \rightarrow \infty.$$

Then we have that the following criteria are weakly consistent under the associated model

- *the Gaussian profile likelihood given in Equation (5.139) under the $\Gamma \mathbf{gBM}$ with no degree correction,*
- *the Gaussian profile likelihood modified for DCSBM given in Equation (5.141) under the $\Gamma \mathbf{gBM}$.*

(Giraud and Verzelen, 2019) show that for the SBM with Bernoulli distributions, K-means criterion is consistent for estimating the classes, they show that a convex relaxation that can be minimized in polynomial time can recover the labels of the groups. Here, we prove that the K-means criterion can recover the labels for our variant gBM.

Theorem 5.5 (K-means criterion). *Let $(\rho_n)_n \in (0, 1]$. Consider a sequence*

$$\mathbf{c}_n, \mathbf{x}_n, \mathbf{W}_n \sim \Gamma \mathbf{gBM}(n, \Pi_n, \rho_n \boldsymbol{\theta}_n) \quad (5.155)$$

be the same model as in Theorem 5.4. Assume in addition that there is no degree correction and that the edges weights W_{ij} are bounded⁴.

Assume that

$$\frac{n^2 \rho_n}{\max(n \log(n), K_n^2)} \rightarrow \infty \text{ and } \frac{n}{K_n} \rightarrow \infty \text{ as } n \rightarrow \infty.$$

Then, the K-means criterion is asymptotically weakly consistent.

5.2.5 Block Models, Block Dependency and Covariance Matrices

In general, block methods like SBM are attractive because in many domains we find random graphs with a block structure. This is for example the case of correlation or covariance, where in certain cases, they admit a block structure, see for example (Laloux et al., 1999) in finance or (Fan et al., 2023) in biology. But also for the graph of product recommendation from the Amazon Company (Babkin et al., 2020).

However, the assumption of conditional independence of SBM models may not be verified on these graphs. Furthermore, even if certain algorithms, which relax this assumption of independence, have been developed, they are generally slower compared to SBM inference methods.

Thus, in this section, we will look on the one hand at a generalization of the SBM model called local dependent graph (Schweinberger and Handcock, 2015), and on the other hand at the correlation matrices, and we will give arguments justifying the use of SBM methods for these models.

Local Dependency Graphs

Among random graph models, the particularity of the SBM is that the distribution p of its edges conditionally on the latent partition can be written as a product of distributions $(p_{k,l})$ that depend uniquely on the blocks, i.e.

$$p(\mathbf{W}) \propto \prod_{k=1}^K \prod_{l=1}^{k-1} \prod_{i:c_i=k, j:c_j=l} p_{k,l}(W_{ij}) \quad .$$

A direct generalization of SBM has been proposed by (Schweinberger and Handcock, 2015) and is called graph with local dependence.

Definition 5.14. A random graph is said to be with **local dependence** if there exists a distribution π on $\{1, \dots, K\}$ and probability distributions $(p_{k,l})_{1 \leq k, l \leq K}$, $(p_k)_{1 \leq k \leq K}$ such that

- a latent partition $\mathbf{c}$ is drawn as

$$\mathbf{c}_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} \pi \quad ,$$

- conditionally to $\mathbf{c}$, the density of the graph weights $\mathbf{W}$ is proportional to

$$\prod_{k=1}^K \prod_{l=1}^{k-1} \prod_{i:c_i=k, j:c_j=l} p_{k,l}(W_{ij}) \prod_{k=1}^K p_k(\mathbf{W}_{(k,k)}) \quad . \quad (5.156)$$

4. There is a compact set in which the supports of the W_n distributions are included

where $\mathbf{W}_{(k,l)} = (W_{i,j})_{i:c_i=k, c_j=l}$ is the sub-matrix of the weights between the block k and l .

The term $p_k(\mathbf{W}_{(k,k)})$ represents the potential dependence between the weights of the edges in the block k .

We then denote

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{LBM}(n, \pi, (p_{k,l}), (p_k))$$

Remark 5.26. In the case where the term $\prod_{k=1}^K p_k(\mathbf{W}_{(k,k)})$ is constant, there is no additional dependence and the SBM model with local dependence corresponds simply to an SBM.

In the case where the graph has binary weights, we can also give some more explicit families (Schweinberger, 2020) such as the canonical exponential family with local dependence. This family, which generalizes SBM with Bernoulli distribution, is defined below.

Definition 5.15. A binary random graph is said to be drawn from the **canonical exponential family with local dependence** if

- π and $\mathbf{c}$ are the same as in Definition 5.14.
- conditionally on $\mathbf{c}$, the weights W_{ij} are drawn such that their probability distribution p is given by

$$p(\mathbf{W}) \propto \exp \left(\sum_{1 \leq k \leq l \leq K} \eta_{k,l} \sum_{i:c_i=k, j:c_j=l} W_{ij} + \sum_{k=1}^K \eta_k s_k(\mathbf{W}) \right) \quad (5.157)$$

where the $(\eta_{k,l})_{k,l}$ and the $(\eta_k)_k$ are some parameters,

$$s_k(\mathbf{W}) = \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W})$$

and

$$\mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W}) = I \left(\sum_{h:c_h=k, h \neq i, j} W_{h,i} W_{h,j} > 0 \right) .$$

The terms s_k count the number of triads in the block k .

We denote such graphs by

$$\mathbf{c}, \mathbf{W} \sim \text{CLBM}(n, \pi, (\eta_{k,l}); (\eta_k)) .$$

Another one is the **curved exponential family with local dependence** (Schweinberger, 2020), which is defined by

$$p(\mathbf{W}) \propto \exp \left(\sum_{1 \leq k \leq l \leq K} \eta_{k,l} \sum_{i:c_i=k, j:c_j=l} W_{ij} + \sum_{k=1}^K \sum_{t=1}^{n_k-2} \gamma_{k,t} s_{k,t}(\mathbf{W}) \right) \quad (5.158)$$

where

$$s_{k,t}(\mathbf{W}) = \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} \mathbb{1}_{ijk,t}(\mathbf{W}) = \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} I \left(\sum_{h:c_h=k, h \neq i, j} W_{h,i} W_{h,j} = t \right) , \quad (5.159)$$

with for some parameters $\theta_{1,k,l}$, $\theta_{2,k}$ and $\theta_{3,k} > \frac{1}{2}$,

$$\begin{aligned} \eta_{k,l}(\boldsymbol{\theta}) &= \theta_{1,k,l} \\ \gamma_{k,t}(\boldsymbol{\theta}) &= \theta_{2,k} \left\{ \theta_{3,k} \left[1 - \left(1 - \frac{1}{\theta_{3,k}} \right)^t \right] \right\} , \end{aligned} \quad (5.160)$$

(Schweinberger, 2020) notices that if $\theta_{3,k} = 1$, for all k , then this model goes back to the canonical exponential family. And taking $\theta_{2,k} = 0$ reduces to the classical SBM.

In the following, we consider only parameterization that increases the numbers of triads within blocks. In the case of LBM, this corresponds to models with $\eta_k \geq 0$.

Maximizing equations such as (5.157) or more generally (5.156) with respect to $\mathbf{c}$ is complicated. However, as the block structure is close to the one of an SBM, it may be interesting to look at the properties of the profile likelihood of an SBM applied to graph models with local dependence. To this end, we consider Lemma 21 of (Makarychev et al., 2016). This lemma is recalled in proposition 5.25.

Proposition 5.25 (Makarychev et al., 2016). *Let two distributions P and Q on an identical sample space Ω . For any event $E \subset \Omega$, we have*

$$Q(E) \leq \max \left\{ \frac{2KL(Q, P)}{1 - \log(P(E))}, e\sqrt{2P(E)} \right\} \quad (5.161)$$

with $KL(Q, P)$, the Kullback-Leibler divergence between the distributions Q and P and $e = \exp(1)$.

Remark 5.27. *In general, this means that, for a distribution sequence (P_n) and a sequence (Q_n) both on the same sets of probabilities Ω_n and a sequence of events (E_n) such that $P_n(E_n) \rightarrow 0$, if $KL(Q_n, P_n) = \omega(-\log(P_n(E_n)))$, then $Q_n(E_n) \rightarrow 0$. And so this allows us to consider some misspecifications of the model.*

Going back to our case of interest, this inequality implies that if Q corresponds to an LBM distribution, from which the graph is drawn, studying properties of a distribution P can provide insight on the behavior of Q as long as it is not too far in the sense of the Kullback-Leibler divergence from P . In particular, our Theorem 5.4, which gives rates for the probability of missclassification using likelihood-based method under gBM can be used. Indeed, denoting P the gBM distribution and $E = \{\|\tilde{\mathbf{c}} - \mathbf{c}\|_{P_n}\}$, we may have $P(E) = \exp(-\frac{n\rho_n}{\log(n)})$ (depending on the considered criterion we may have $\log(n)^\beta$, for some $\beta > 1$). Thus, with Proposition 5.25, we have to select a particular gBM or simply an SBM distribution for P and to compute its Kullback-Leibler divergence with Q . Therefore, as soon as, the Kullback-Leibler divergence is smaller than $\frac{\log(n)}{n\rho_n}$, the equation (5.161) rewrites as

$$Q(E) \leq \max \left\{ \frac{2KL(Q, P)}{1 + \frac{n\rho_n}{\log(n)}}, o(1) \right\} = o(1) \quad . \quad (5.162)$$

And it is sufficient to ensure that $Q(E)$ goes to zero under a LBM.

Considering that Q corresponds to an $\mathbf{LBM}(n, \pi, (p_{k,l}), (p_k))$, (Babkin et al., 2020) studied the Kullback-Leibler divergence when choosing P as $\mathbf{SBM}(n, \pi, (p_{k,l}))$. They derive a bound for $KL(Q, P)$ in $O(\log(n) \sum_k n_k^2)$. While it is smaller than n^2 , which makes it, in general, small to other quantities of interest in the graph domain, it is not small enough to be used with Proposition 5.25.

In fact, choosing such a model for P of the form $\prod_{k=1}^K \prod_{l=1}^{k-1} \prod_{i:c_i=k, j:c_j=l} p_{k,l}(W_{ij})$, does not consider the additional number of edges induced by the terms $p_k(\mathbf{W}_{(kk)})$ of the LBM definition (c.f. Equation (5.157)). In particular, those terms should influence the expected number of nodes in diagonal blocks.

To illustrate this idea, one now restricts to the CLBM case instead of the LBM case, even if our idea is more general. In those models, which correspond to generalizations of Bernoulli SBM, a key point is the expected number of nodes in each block. Compared to the associated SBM (in the sense of (Babkin et al., 2020)), the CLBM will have more edges on diagonal blocks due to the terms $s_k(\mathbf{W}_{(kk)})$. Thus, we propose to use as distribution P an SBM which has the same mean in each block as the CLBM defined in Equation (5.158).

Taking such an impact into account leads us to the following proposition.

Proposition 5.26. *Let $\mathbf{c}_1, \mathbf{W}_1 \sim \mathbf{CLBM}(n, \pi, (\eta_{k,l}); (\eta_k))$. There exists a model $\mathbf{c}_2, \mathbf{W}_2 \sim \mathbf{SBM}(n, \pi, \text{Bernoulli}, \boldsymbol{\theta})$, such that the distributions*

- Q the conditional distribution of $\mathbf{W}_1 | \mathbf{c}_1$,
- P the conditional distribution of $\mathbf{W}_2 | \mathbf{c}_2 = \mathbf{c}_1$,

satisfy

$$KL(Q, P) \leq 2n \max_k \eta_k \quad . \quad (5.163)$$

Remark 5.28. (Babkin et al., 2020) in proof of proposition 2 in the appendix of their paper demonstrate that $KL(Q, P) = O(\log(n) \sum_k n_k^2)$. Our proposition 5.26 improves it when $\eta_k = O(\log(n))$, since

$$n \max_k \eta_k = n \log(n) \leq \log(n) \sum_k n_k^2 \quad . \quad (5.164)$$

However, to demonstrate that maximizing the profile likelihood of an SBM allows consistent estimation under canonical exponential family with local dependence, this is not sufficient. Indeed, combining the inequality (5.163) with equation (5.162), gives

$$Q(E) \leq O\left(\frac{\log(n)^2}{\rho_n}\right) \rightarrow +\infty \quad . \quad (5.165)$$

Remark 5.29. *We only give an upper bound, and it is very likely that it is not optimal, especially on sparse graphs. This will be illustrated by the following simulations.*

To illustrate Proposition 5.26, we proceed by simulation. Indeed, computing the Kullback-Leibler divergence between P and Q , is difficult and admits no simple closed form. We consider the three following processes

1. $\eta_{kl} = -0.882\log(n)$, $k \neq l$, $\eta_{kk} = -434\log(n_k)$, $\eta_k = 0.217\log(n_k)$,
2. $\eta_{kl} = -0.882\log(n)$, $k \neq l$, $\eta_{kk} = -434\log(n_k)$, $\eta_k = 0.217$,
3. $\eta_{kl} = 0.5 - \log(n)$, $k \neq l$, $\eta_{kk} = -1.5$, $\eta_k = 0.5$.

Scenarios 1 and 3 are the same as in (Babkin et al., 2020).

We consider different numbers of nodes between 30 and 1530, with either $\pi = (\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})^T$, or equal probability for each blocks with $K \approx n^{0.3}$. In the scenario 1, we obtain the figure 5.4. We can observe on the figure that for a scenario with $\eta_k \propto \log(n_k) \propto \log(n)$, while we expect the ratio between the KL divergence in our upper bound and the probability of missclassification to be of order $\frac{\log(n)^2}{\rho_n} \rightarrow \infty$, the ratio goes to 0. Thus, on one hand, our bound is not tight and on the other hand, we may expect to recover the blocks by using a method initially designed for SBM.

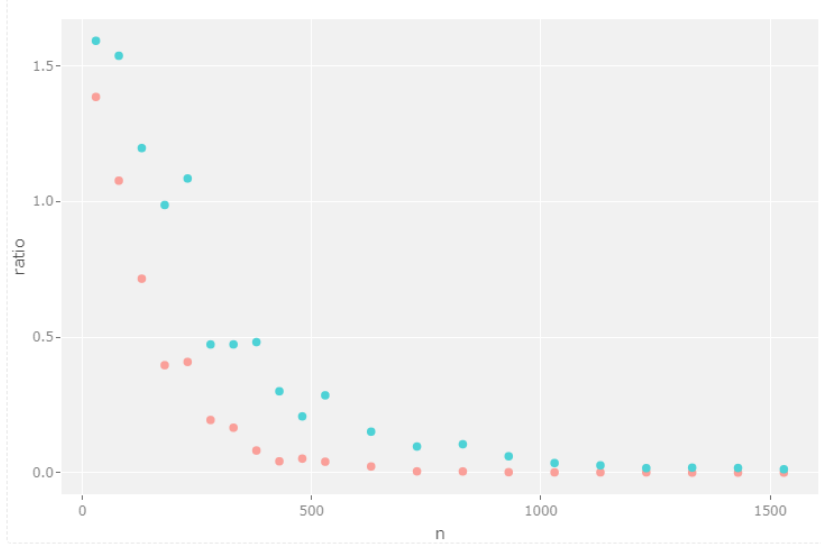


Figure 5.4 – Evolution of the estimate of the quantity $KL(Q, P) \frac{\log(n)}{\rho_n n}$, which corresponds to an upper bound of the probability of weak recovery in equation (5.163), with in red $\pi = (\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ and in blue $\pi_k = 1/K$, with $K \approx n^{0.3}$.

Moreover, in the simulation, it appears that for some generation processes, the probability of having a triad between nodes i and j in block k is almost equal to 1 so that $s_k \approx \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} = \mathbf{c}W_{k,k}$, which implies $\sum_{kl} \mathbf{c}W_{k,l}\eta_{kl} + \sum_k s_k(\mathbf{W})\eta_k \approx \sum_{kl} \mathbf{c}W_{k,l}(\eta_{kl} + \delta_{kl}\eta_k)$. In such cases, the canonical exponential family density is thus almost equivalent to the one from the SBM with within block parameters $\eta_{k,k} + \eta_k$. This may explain why such an approach works well in practice

The same conclusion does not apply to the two other scenarios. For them, the ratios converge to a constant different from 0.

Covariance and SBM

DCSBM represents specific models of random graphs that are particularly appealing for object classification tasks with graph structures. This is especially relevant when considering empirical correlation matrices, which inherently exhibit a random graph structure. In this section, we present models that help elucidate the motivation behind using such methods on covariance or correlation matrices. Specifically, we provide examples of covariance matrices in which a block structure is expected.

To model real-world data, it is often reasonable to assume that their distributions can be expressed as:

$$X_i = \sum_{l=1}^L \alpha_{il} L_l + \epsilon_i \quad . \quad (5.166)$$

Here, L_l represents latent variables, α_{il} are coefficients (which are also random) denoting the importance of the latent variables, and ϵ_i represents noise. We assume that ϵ_i is independent of α_{il} , L_l , and ϵ_l for $l \neq i$.

From a practical standpoint, it is well-recognized that data may depend on numerous factors. However, these factors may be difficult to measure or may not be readily available, so they are treated as latent variables.

The idea of applying clustering methods based on correlation matrices to models with latent variables is not novel. Several authors, including (Vigneau and Qannari, 2003), have proposed methods based on principal

component analysis (PCA). However, our approach takes a different perspective by linking covariance matrices to (DC)SBM.

We analyze the covariance matrix of the model defined in equation (5.166) under various assumptions regarding α_{il} and L_l .

Under this model, it is straightforward to express the empirical or true covariance between two such distributions as:

$$\begin{aligned} \text{cov}(X_i, X_j) &= \sum_{l=1}^L \sum_{l'=1}^L \text{cov}(\alpha_{il} L_l, \alpha_{jl'} L_{l'}) + \\ &\quad \sum_{l=1}^L \text{cov}(\alpha_{il} L_l, \epsilon_j) + \sum_{l'=1}^L \text{cov}(\epsilon_i, \alpha_{jl'} L_{l'}) + \text{cov}(\epsilon_i, \epsilon_j) \quad . \end{aligned} \quad (5.167)$$

And by independence of the ϵ_i , it leads to

$$\text{cov}(X_i, X_j) = \sum_{l=1}^L \sum_{l'=1}^L \text{cov}(\alpha_{il} L_l, \alpha_{jl'} L_{l'}) \quad . \quad (5.168)$$

To draw parallels between SBM (and similarly for DC SBM) and covariance matrices, we can leverage the understanding that generating an SBM can be viewed as a two-step procedure:

1. $c_i \sim \{1, \dots, L\}$
2. $W_{ij} \sim \mathbb{P}(\cdot | P_{c_i c_j})$, where $E_{\mathbb{P}(\cdot | P_{c_i c_j})}[X] = P_{c_i c_j}$.

where first the labels are drawn, and then the weights are drawn conditionally on the labels. Since here the information of the labels is in some sense contained by the α_{il} , it makes sense to look at the covariance (here considered as weights) conditionally on the α_{il} .

First, assume the α_{il} are independent identically distributed so that for any i , the α_{il} are 0 except one which is equal to 1. Clearly, it can be rewritten as $c_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} \pi$ on $\{1, \dots, L\}$ and $\alpha_{il} = \delta_{c_i, l}$. Then conditionally on the α_{ij} , the covariance can be written as

$$\begin{aligned} \text{cov}(X_i, X_j | \alpha) &= \sum_{l=1}^L \sum_{l'=1}^L \alpha_{il} \alpha_{jl'} \text{cov}(L_l, L_{l'}) \\ &= \sum_{l=1}^L \sum_{l'=1}^L \delta_{c_i, l} \delta_{c_j, l'} \text{cov}(L_l, L_{l'}) \\ &= \text{cov}(L_{c_i}, L_{c_j}) \quad . \end{aligned} \quad (5.169)$$

So up to a permutation, the true covariance matrix of $\mathbf{X} | \alpha$ has a block diagonal structure.

So the true covariance matrix can be seen as the expectation of some realization of an SBM with L classes.

In plenty of situations, it may be reasonable to assume that the latent variables are independent. For the rest of this section, we make this assumption.

We now look at a more general case, where $\alpha_{il} \in \{0, 1\}^L$. In that case,

$$\text{cov}(X_i, X_j | \alpha) = \sum_{l=1}^L \alpha_{il} \alpha_{jl} \text{var}(L_l) \quad . \quad (5.170)$$

Therefore, it is clear that the true covariance matrix is a block matrix with $O(2^{2L})$ blocks.

This assumption implies that there are many blocks, which may not be realistic or lead to impossible estimation. So we can assume an intermediate model where the α_{il} can take K values in $\mathbb{R}^L$. Note that this generalizes the two above assumptions.

Then, the covariance matrix verifies $\text{cov}(X_i, X_j | \alpha) = \alpha_i^T \text{cov}(L) \alpha_j$. In addition, since the α_{il} can take K values, the covariance can take $K(K+1)/2$ values. Again, this corresponds to the expectation of an SBM realization with K classes and block distributions with expectations that match the possible covariance coefficients.

Remark 5.30. *If we let the α_{il} take values in $\mathbb{R}$ (or even just in $[0, 1]$) without any other restrictions, this can lead to models that are not identifiable.*

Moreover, since we have assumed that the latent variables are independent, the covariance represents the amount of variance shared by two variables, which can be the same for different vectors α_{il} . Considering the correlation instead can solve this problem, since it will weight the variance shared by the two variables by their own standard deviation.

Then, when considering the correlation, it can be considered a DCSBM where the degree of a node is one over the standard deviations of the variables (since there are K possible values for α_i , there are only K possible values for the variances).

Remark 5.31. In addition, again in the case where the coefficients α_i belong to $\mathbb{R}$, the modeling of the covariance as a random graph shares many similarities with mixed membership and overlapping stochastic block models (Airoldi et al., 2008; P. Latouche et al., 2011).

In practice, it can be difficult to know which latent variables and which combinations of these variables are influencing the data. Thus, we can be interested, at least initially, only in the block structure of the data. So, a question is: When can we assume that a covariance matrix admits a block structure? The obvious, if counter-intuitive, answer is all the time. Indeed, the covariance matrix can be considered the product between correlation and standard deviation, i.e.

$$\text{cov}(X_i, X_j) = \text{cor}(X_i, X_j) \text{std}(X_i) \text{std}(X_j) \quad . \quad (5.171)$$

Therefore, if we consider the standard deviations $\text{std}(X_i)$ as degree correction factors and the correlations $\text{cor}(X_i, X_j)$ as block parameters, we can rewrite the covariance matrix as the expectation (conditionally to the degree sequence) of a particular DCSBM with $K = d$. Nevertheless, interesting situations are those where $K \ll d$.

From a theoretical perspective, a way to think at block models is to assume only that some particularity of the graph distribution depends mainly on the blocks assigned to the nodes and not the node itself, for example having the same means in each block. This can be considered a generalization of gBM without the independence condition on the weights conditionally to the partition. We call it dependent BM.

Definition 5.16. If

- i. $\mathcal{X}, \Pi, \mathbf{c}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}$ are the same as in Definition 5.9,
- ii. conditionally to $\mathbf{c}, \mathbf{x}$,

$$E[W_{ij} \mid c_i, c_j, x_i, x_j] = x_i x_j \theta_{c_i, c_j} \quad . \quad (5.172)$$

Then we write

$$\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \text{dBM}(n, \Pi, \boldsymbol{\theta}) \quad . \quad (5.173)$$

Remark 5.32. The only difference with gBM is that here, the weights W_{ij} are not supposed to be independent.

The figure 5.5, presents a hierarchy between the different block models considered in this work.

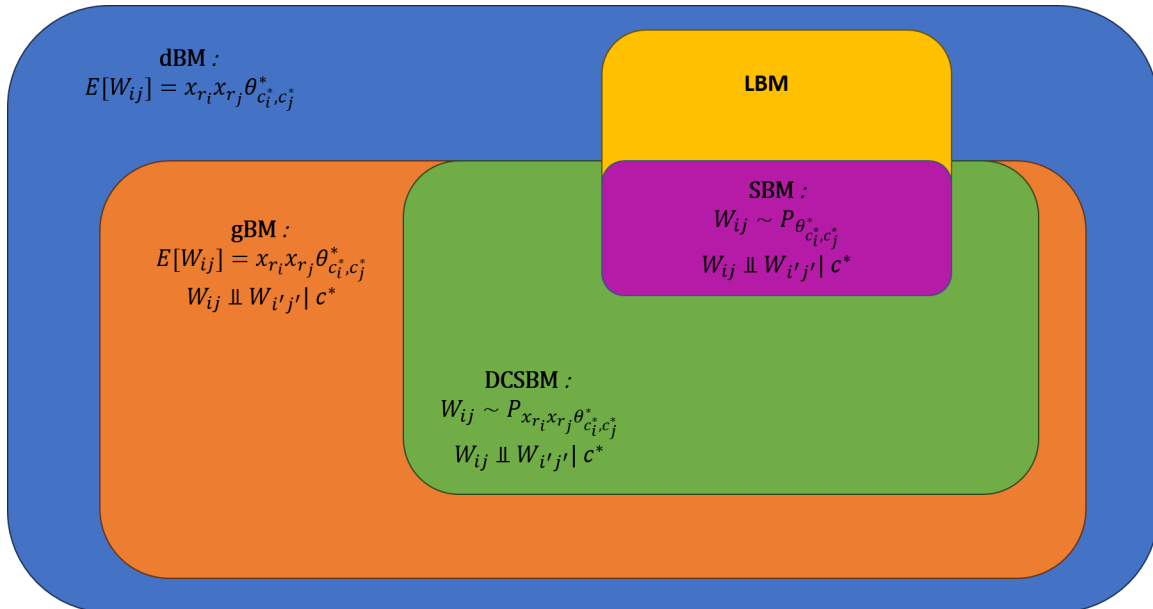


Figure 5.5 – Illustration of the links between the different block models considered in this work.

Based on this definition, we have the following natural proposition, which links empirical covariance (and correlation) matrices to the dBM.

Proposition 5.27. Let $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(n)}$ be n i.i.d. observations of a d -dimensional distribution with covariance matrix Σ .

There exist $K \in \{1, \dots, d\}$, $\mathbf{c}^* \in \{1, \dots, K\}^d$, $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}_+$, $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}^d$ and a symmetric matrix $\boldsymbol{\theta} \in [-1, 1]^{d \times d}$ such that

$$\Sigma_{ij} = x_i^* x_j^* \theta_{c_i^*, c_j^*} \quad . \quad (5.174)$$

Moreover, there exist Π and $\mathbf{c}, \mathbf{x}, \mathbf{W} \sim \mathbf{dBM}(d, \Pi, \boldsymbol{\theta})$ such that

$$\hat{\Sigma} \sim \mathbf{W} \mid \mathbf{c} = \mathbf{c}^*, \mathbf{x} = \mathbf{x}^* \quad (5.175)$$

where $\hat{\Sigma}$ is the empirical covariance of the sample $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(d)}$.

Remark 5.33. The decomposition in Equation (5.174) can be considered to be the decomposition correlation/standard-deviation of the covariance matrix. Thus, in particular, the same result holds for correlation matrices by taking $x_i^* = 1$ for all i .

Now that we have explained why it is reasonable to see empirical covariance matrices and so empirical correlation matrices as random graphs with a block structure, we give some theoretical properties of the profile likelihood and K -means criterion applied to them.

Theorem 5.6. Let $\mathbf{X} = (\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(n)})$ be an i.i.d. sample of size n of d_n -dimensional random variables with correlation matrix Σ , Q_n a sequence of criteria and F_{K_n} functions such that

$$Q_n(\mathbf{c}; \hat{\Sigma}) = F_{K_n} \left(\frac{\mathbf{c} \hat{\Sigma}}{d^2}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{d} \right)_k \right)$$

where $\hat{\Sigma}$ is an unbiased estimator of Σ so that there exists $\ell > 0$, such that for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} > \epsilon \right) \leq d_n^2 e^{-\ell n \epsilon^2} \quad . \quad (5.176)$$

Assume that

- there exist $\boldsymbol{\theta}^* \in \mathbb{R}^{K_n \times K_n}$, $\mathbf{c}^* \in \{1, \dots, K_n\}^{d_n}$ such that $\Sigma_{ij} = \theta_{c_i^*, c_j^*}^*$, for $1 \leq i, j \leq d_n$,
- the functions F_{K_n} are L_{K_n} -Lipschitz⁵ and satisfy (**),
- d_n is increasing with n such that $\frac{d_n}{K_n} \rightarrow \infty$ and $\log(d_n) = o(n)$.

Then, for any $\epsilon > 0$, and any $\hat{\mathbf{c}} \in \arg\max_{\mathbf{c}} Q_n(\mathbf{c}; \hat{\Sigma})$,

$$\mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \epsilon \right) \rightarrow 0 \quad .$$

Remark 5.34. In the literature of learning covariance and correlation matrix, it is classic to have that $\log(d) = o(n)$ (see for example (Rothman et al., 2009)).

Remark 5.35. If we consider $\hat{\Sigma}$ to be estimated based on empirical Kendall τ , the condition in equation (5.176) is satisfied (c.f. (Han and H. Liu, 2014)).

Remark 5.36. We expect that the hypothesis d_n increasing and $\frac{d_n}{K} \rightarrow \infty$ are not required, however it will require a different proof which is left as further work.

Corollary 5.6.1. Assuming that

- there exist $\boldsymbol{\theta}^* \in \mathbb{R}^{K \times K}$, $\mathbf{c}^* \in \{1, \dots, K\}^{d_n}$ such that $\Sigma_{ij} = \theta_{c_i^*, c_j^*}^*$, for $1 \leq i, j \leq d_n$,
- there exists an unbiased estimator of $\hat{\Sigma}$, such that for some $\ell > 0$, for every $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} > \epsilon \right) \leq d_n^2 e^{-\ell n \epsilon^2} \quad , \quad (5.177)$$

- d_n is increasing with n such that $\frac{d_n}{K} \rightarrow \infty$ and $\log(d_n) = o(n)$,

Then for a criterion Q being one of

- the Gaussian SBM profile likelihood,
- the Poisson DCSBM (applied to the absolute value of the correlation)

satisfies for any $\epsilon > 0$, and any $\hat{\mathbf{c}} \in \arg\max_{\mathbf{c}} Q_n(\mathbf{c}; \hat{\Sigma})$,

$$\mathbb{P} \left(\frac{1}{n} \|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \epsilon \right) \rightarrow 0 \quad .$$

5. F is Lipschitz in the sens that $|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_{K_n} (\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\ell_1} + \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_1)$.

Remark 5.37. *We expect that this result is also true for the K-means criterion, however the proof would be a bit different and is left as a future work.*

5.2.6 Conclusion

In this article, we explore the robustness to misspecifications of estimation methods such as the profile likelihood of a Gaussian SBM, the K-means method and the profile likelihood of a Poisson DCSBM. Since it is difficult to know the law of the data in block models and it is unlikely that all edges have the same law, it is unreasonable to believe that there is a model perfectly adapted to the data. Thus, we studied the robustness properties of these criteria to bad specifications of the edge laws as long as they have the same theoretical mean. These results make it possible to choose a criterion according to the support of the weights of the edges without worrying about the real law of the data, which greatly simplifies the practical analysis of the data. Furthermore, our demonstration notably extends the consistency results of (Choi et al., 2012) and (Zhao et al., 2012) to arbitrary laws.

We also look at the behavior of this type of criteria under deviations from the edge dependency structure. First, we study both theoretically and empirically the Bernoulli SBM model with local dependence (Schweinberger and Handcock, 2015). Under this model, we explain why in certain cases, despite the presence of dependence inside the blocks, this model is sufficiently close to an SBM model and therefore that the classical estimator remains asymptotically consistent. Secondly, we justify why it may be logical to expect that some covariance and correlation matrices have a block structure. We prove that for such matrices, under reasonable assumptions, the block structure can be recovered using the same technics as for DCSBM.

This work leaves two large sections of the literature on block models without analysis. The first corresponds to model selection methods. In fact, these methods are often based on modifications of the BIC criteria (Biernacki et al., 2000; Yan, 2016) even though other exists (Pircalabelu and Claeskens, 2016). However, with our analysis, the variables are no longer necessarily independent conditional on the partition and therefore the approximations are no longer valid. Thus, new approximations must be developed, or it is necessary to demonstrate that the selection criteria of classic models are also adapted to these poor specifications.

The same can be said for variational approaches used for SBM. Indeed, these methods have been studied theoretically under models, see e.g. (Latouche et al., 2012) or (P. Bickel et al., 2013). But in the context of misspecifications more complex computations are necessary. One avenue for this could be the work of (Chérif-Abdellatif and Alquier, 2018).

5.2.7 Appendix

Before going into the proofs, we provide some notations, which are almost the same as those of (Zhao et al., 2012).

We use the term $2m$ to denote the sum of weights in the graph and μ_n for the expected number of edges in the graph where each weight has probability $1 - \rho$ to be 0, i.e.

$$2m = \sum_{ij} W_{ij} \quad \mu_n = n^2 \rho \quad .$$

We also denote for any partition $\mathbf{c}$ and $\mathbf{c}^*, \mathbf{x}^*, \mathbf{W} \sim \mathbf{gBM}(n, \Pi, \rho\theta)$,

$$\begin{aligned} \hat{T}_{kl}(\mathbf{c}) &= \frac{1}{\mu_n} E[\mathbf{c} W_{k,l} | \mathbf{c}^*, \mathbf{x}^*] \\ T_{kl}(\mathbf{c}) &= \sum_{abuv} y_u y_v \theta_{ab} V_{kau}(\mathbf{c}) \Pi_{au} V_{lbv}(\mathbf{c}) \Pi_{bv} \text{ , where} \\ V_{kau}(\mathbf{c}) &= \frac{\sum_{i=1}^n I(c_i = k, c_i^* = a, x_i^* = y_u)}{\sum_{i=1}^n I(c_i^* = a, x_i^* = y_u)} \\ \hat{\Pi}_{au} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(c_i^* = a, x_i^* = y_u) \\ n_k^0(\mathbf{c}) &= n \sum_{au} V_{kau}(\mathbf{c}) \Pi_{au} \quad . \end{aligned} \tag{5.178}$$

The first is simply a notation for the conditional mean. The second one is a kind of expectation of $\hat{T}_{kl}$, because

$$\hat{T}_{kl} = \sum_{abuv} y_u y_v \theta_{ab} V_{kau} \hat{\Pi}_{au} V_{lbv} \hat{\Pi}_{bv} \quad .$$

The third one measures the relative error of classification, the last ones represent the probability of being in class k .

Remark 5.38. The notation $n_k^0(\mathbf{c})$ comes from the fact that

$$n_k(\mathbf{c}) = n \sum_{au} V_{kau} \hat{\Pi}_{au} \quad .$$

Alternative formulation of K -means criterion

In this section, we provide the details of the formulation (5.137) of the K -means criterion.

$$\begin{aligned} K\text{-means}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) &= \sum_k \sum_i I(c_i = k) \left\| \mathbf{W}_{i\cdot} - \frac{1}{n_k} \sum_{i'} I(c_{i'} = k) \mathbf{W}_{i'\cdot} \right\|_2^2 \\ &= \sum_k \sum_i I(c_i = k) \sum_j \left[W_{ij}^2 - 2 \frac{W_{ij}}{n_k} \sum_{i'} I(c_{i'} = k) W_{i'j} + \left(\frac{1}{n_k} \sum_{i'} I(c_{i'} = k) W_{i'j} \right)^2 \right] \\ &= \sum_k \sum_i I(c_i = k) \sum_j W_{ij}^2 - \\ &\quad 2 \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right) \left(\sum_{i'} I(c_{i'} = k) W_{i'j} \right) + \\ &\quad \sum_k \sum_j \left(\sum_i I(c_i = k) \right) \left(\frac{1}{n_k} \sum_{i'} I(c_{i'} = k) W_{i'j} \right)^2 \\ &= \sum_k \sum_i I(c_i = k) \sum_j W_{ij}^2 - \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_{i'} I(c_{i'} = k) W_{i'j} \right)^2 \quad . \end{aligned} \tag{5.179}$$

On Concentration Inequalities

We start by recalling some definitions and properties of random variable concentration (this section is based on (H. Zhang and S. X. Chen, 2021)). We also provide some new concentration results.

Let X be a random variable.

- X is said to be sub-Gaussian with proxy-variance $\sigma^2 > 0$, denoted $X \sim \text{subG}(\sigma^2)$, if

$$E[e^{s(X-E[X])}] \leq e^{\frac{\sigma^2 s^2}{2}}, \quad \forall s \in \mathbb{R} \quad . \tag{5.180}$$

- X is said to be sub-exponential with parameter $\lambda > 0$, denoted $X \sim \text{subE}(\lambda)$, if

$$E[e^{s(X-E[X])}] \leq e^{\frac{s^2 \lambda^2}{2}}, \quad \forall |s| < \lambda^{-1} \quad . \tag{5.181}$$

- X is said to be sub-Gamma with variance factor $v > 0$ and scale parameter $c > 0$ denoted $X \sim \text{sub}\Gamma(v, c)$ if

$$\log(E[e^{s(X-E[X])}]) \leq \frac{s^2 v}{2(1-c|s|)}, \quad \forall 0 < |s| < |c|^{-1} \quad . \tag{5.182}$$

Theorem 5.7 (Bernstein's inequality). *Let $X_1, \dots, X_n$ be n centered independent random variables such that $X_i \sim \text{sub}\Gamma(v_i^2, \kappa_i)$. We have for any $\epsilon > 0$,*

$$\mathbb{P} \left(\left| \sum_{i=1}^n X_i \right| > \epsilon \right) \leq 2 \exp \left(- \frac{\epsilon^2}{2 \sum_{i=1}^n v_i^2 + 2\kappa\epsilon} \right) \quad ,$$

where $\kappa = \max_i \kappa_i$.

This inequality allows us to prove the following result.

Lemma 5.7.1. *Let $(W_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ be n^2 independent random variables such that $W_{ij} \sim \text{sub}\Gamma(v^2 \rho, \kappa)$, $\rho \in (0, 1]$. Let $\mu_n = n^2 \rho$.*

i. For any partition $\mathbf{c}$ of $\{1, \dots, n\}$ in K classes, we have for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}\mathbf{W}]}{\mu_n} \right\|_{\ell_1} > \epsilon \right) \leq 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{32(v^2 + \kappa\epsilon/4)} \right) + 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{2(v^2 + \kappa\epsilon)} \right) \quad .$$

ii. We have for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} \left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}\mathbf{W}]}{\mu_n} \right\|_{\ell_1} > \epsilon \right) \leq K^n 2^{K^2+1} \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{32(v^2 + \kappa\epsilon/4)} \right) + 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{2(v^2 + \kappa\epsilon)} \right) \quad .$$

As real graphs are often sparse, the distribution of W_{ij} conditionally on the latent partition can be assumed of the form $(1 - \rho)\delta_0 + \rho P_{ij}$, where P_{ij} is some distribution. A natural question is whether the concentration properties of the P_{ij} distribution are preserved for the mixture.

To study this, we consider the Bernstein's moment condition.

Definition 5.17. We say that a centered random variable X satisfies the Bernstein's moment condition, noted $BMC(\sigma, \kappa)$, if there exist $\kappa > 0$ and $\sigma > 0$ such that for any $p \geq 2$,

$$E[|X|^p] \leq \frac{1}{2} p! \sigma^2 \kappa^{p-2} \quad . \quad (5.183)$$

Proposition 5.28 (Corollary 5.2 of (H. Zhang and S. X. Chen, 2021)). *If X verifies the Bernstein's moment condition, then $X \sim \text{sub}\Gamma(\sigma^2, \kappa)$.*

Thus, the Bernstein's moment condition can be an easy way to demonstrate the $\text{sub}\Gamma$ tails of random variables and so that Bernstein's inequality can be applied.

Going back to the case of our mixture distribution, we have the following result.

Proposition 5.29. *Let X be a distribution with mean μ such that $(X - \mu)$ satisfies $BMC(\sigma, \kappa)$. Let $\rho \in (0, 1]$. Then,*

(i)

$$(1 - \rho)\delta_0 + \rho X \sim BMC(\rho(2\sigma^2 + 4\mu^2), 2\max\{\kappa, |\mu|\}) \quad .$$

(ii)

$$(1 - \rho)\delta_0 + \rho X \sim \text{sub}\Gamma(\rho(2\sigma^2 + 4\mu^2), 2\max\{\kappa, |\mu|\}) \quad .$$

Proofs of Section 5.2.2

Proof of Proposition 5.20. The partial likelihood of the model is given by

$$\sum_{ij} \log \left(e^{-\theta_{c_i c_j} x_i x_j} \frac{(\theta_{c_i c_j} x_i x_j)^{W_{ij}}}{W_{ij}!} \right) \quad . \quad (5.184)$$

Thus, we have

$$\sum_{ij} \log \left(e^{-\theta_{c_i c_j} x_i x_j} \frac{(\theta_{c_i c_j} x_i x_j)^{W_{ij}}}{W_{ij}!} \right) = - \sum_{ij} \theta_{c_i c_j} x_i x_j + \sum_{ij} W_{ij} \log(\theta_{c_i c_j} x_i x_j) - \sum_{ij} \log(W_{ij}!) \quad .$$

As $\sum_{ij} \log(W_{ij})$ is a constant it can be removed from the optimization problem. In addition, we have

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \theta_{c_i c_j} x_i x_j &= \sum_{ij} \theta_{c_i c_j} x_i x_j \sum_{kl} I(c_i = k) I(c_j = l) \\ &= \sum_{kl} \sum_{ij} I(c_i = k) I(c_j = l) \theta_{kl} x_i x_j \\ &= \sum_{kl} \theta_{kl} \left(\sum_i I(c_i = k) x_i \right) \left(\sum_j I(c_j = l) x_j \right) \\ &= \sum_{kl} \theta_{kl} r_k r_l \quad . \end{aligned}$$

where the last equality comes from the constraints (5.136). Also, we have

$$\begin{aligned}
\sum_{ij} W_{ij} \log(\theta_{c_i c_j} x_i x_j) &= \sum_{ij} W_{ij} (\log(\theta_{c_i c_j}) + \log(x_i) + \log(x_j)) \\
&= \sum_{kl} \log(\theta_{kl}) \sum_{ij} I(c_i = k) I(c_j = l) W_{ij} + 2 \sum_{ij} W_{ij} \log(x_i) \\
&= \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log(\theta_{kl}) + 2 \sum_i \left(\sum_j W_{ij} \right) \log(x_i) \\
&= \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log(\theta_{kl}) + 2 \sum_i d_i \log(x_i) \quad .
\end{aligned}$$

Thus maximizing the partial likelihood (5.184) is equivalent to maximize

$$2 \sum_i d_i \log(x_i) + \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log(\theta_{kl}) - \sum_{kl} \theta_{kl} r_k r_l \quad . \quad (5.185)$$

Maximizing this equation in $\mathbf{x}$ and $\boldsymbol{\theta}$ leads to

$$\begin{aligned}
\hat{x}_i &= \frac{d_i}{{}^c W_k} r_k, \quad \text{when } c_i = k, \\
\hat{\theta}_{kl} &= \frac{{}^c W_{k,l}}{r_k r_l} \quad .
\end{aligned} \quad (5.186)$$

Using estimated values in equation (5.185), leads to

$$\begin{aligned}
&2 \sum_i d_i \log(x_i) + \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log(\theta_{kl}) - \sum_{kl} \theta_{kl} r_k r_l \\
&= 2 \sum_k \sum_i I(c_i = k) d_i \log\left(\frac{d_i}{{}^c W_k} r_k\right) + \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log\left(\frac{{}^c W_{k,l}}{r_k r_l}\right) - \sum_{kl} {}^c W_{k,l}
\end{aligned} \quad (5.187)$$

Moreover, we have

$$\begin{aligned}
\sum_k \sum_i I(c_i = k) d_i \log\left(\frac{d_i}{{}^c W_k} r_k\right) &= \sum_k \sum_i I(c_i = k) d_i \log(d_i) + \sum_k \sum_i I(c_i = k) d_i \log\left(\frac{r_k}{{}^c W_k}\right) \\
&= \sum_i d_i \log(d_i) + \sum_k \sum_i I(c_i = k) d_i \log\left(\frac{r_k}{{}^c W_k}\right) \quad .
\end{aligned}$$

As $\sum_i d_i \log(d_i)$ and $\sum_{kl} {}^c W_{k,l}$ are constant independent of $\mathbf{c}$, the equation (5.187) can be rewritten as

$$2 \sum_k \sum_{i:c_i=k} d_i \log\left(\frac{r_k}{{}^c W_k}\right) + \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log\left(\frac{{}^c W_{k,l}}{r_k r_l}\right) + \text{cst} \quad ,$$

where cst is a constant term, which depends on $\mathbf{W}$ but not on $\mathbf{c}$. Then, the target form can be easily obtained using

$$2 \sum_k \sum_{i:c_i=k} d_i \log\left(\frac{r_k}{{}^c W_k}\right) = \sum_{kl} {}^c W_{k,l} \log\left(\frac{r_k r_l}{{}^c W_k {}^c W_l}\right) \quad .$$

□

The remaining proofs in this section require a corollary of the Cauchy Schwartz inequality.

Lemma 5.7.2 (Sedrakyan's inequality). *Let $(u_i)_{1 \leq i \leq n} \in \mathbb{R}^n$ and $(v_i)_{1 \leq i \leq n} \in \mathbb{R}^n$ such that $v_i > 0, \forall i$. Then*

$$\frac{(\sum_{i=1}^n u_i)^2}{\sum_{i=1}^n v_i} \leq \sum_{i=1}^n \frac{u_i^2}{v_i} \quad . \quad (5.188)$$

With this result, we can now prove the different results.

Proof of proposition 5.22. Clearly, we have that

$$\sum_{kl} \frac{{}^c W_{k,l}^2}{n_k({}^c) n_l({}^c)} = F({}^c \mathbf{W}, (n_k)_k)$$

with $F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \sum_{kl} \frac{A_{kl}^2}{b_k b_l}$. Thus, in order to prove the proposition, it remains to show that $\mathbf{S} \mapsto F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S}))$ is optimal in $\mathbb{D}$.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{H}(\mathbf{S}), \mathbf{h}(\mathbf{S})) &= \sum_{kl} \frac{H_{kl}(\mathbf{S})^2}{h_k(\mathbf{S}) h_l(\mathbf{S})} \\ &= \sum_{kl} \frac{(\sum_{ab} \theta_{ab} S_{ka} S_{lb})^2}{\sum_{ab} S_{ka} S_{lb}} \\ &\leq \sum_{kl} \sum_{ab} \theta_{ab}^2 S_{ka} S_{lb} \\ &= \sum_{ab} \theta_{ab}^2 \pi_a \pi_b = F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D})) \end{aligned} \tag{5.189}$$

where the inequality comes from the Sedrakyas' inequality (5.188). $\square$

Proof of proposition 5.23. It is easy to see that the F function associated to this criterion is given by

$$F(\mathbf{A}) = \sum_{kl} \frac{A_{kl}^2}{(\sum_{l'} A_{kl'}) (\sum_{k'} A_{k'l})}.$$

To demonstrate the optimality in $\mathbb{D}$, use the same trick as in (Zhao et al., 2012). So here we denote $\tilde{S}_{ka} = \sum_u y_u S_{kau}$ and $\tilde{\pi}_a = \sum_k \tilde{S}_{ka}$. Then $H_{kl} = \sum_{ab} \theta_{ab} \tilde{S}_{ka} \tilde{S}_{lb}$ and $H_k = \sum_{as} \theta_{as} \tilde{S}_{ka} \tilde{\pi}_s$. So

$$\begin{aligned} F(\mathbf{H}(\mathbf{S})) &= \sum_{kl} \frac{H_{kl}^2}{H_k H_l} \\ &= \sum_{kl} \frac{(\sum_{ab} \theta_{ab} \tilde{S}_{ka} \tilde{S}_{lb})^2}{(\sum_{as} \theta_{as} \tilde{S}_{ka} \tilde{\pi}_s) (\sum_{bt} \theta_{bt} \tilde{S}_{lb} \tilde{\pi}_t)} \\ &= \sum_{kl} \frac{(\sum_{ab} \theta_{ab} \tilde{S}_{ka} \tilde{S}_{lb})^2}{\sum_{ab} \tilde{S}_{ka} \tilde{S}_{lb} (\sum_s \theta_{as} \tilde{\pi}_s) (\sum_t \theta_{bt} \tilde{\pi}_t)} \\ &\leq \sum_{kl} \sum_{ab} \tilde{S}_{ka} \tilde{S}_{lb} \frac{\theta_{ab}^2}{(\sum_s \theta_{as} \tilde{\pi}_s) (\sum_t \theta_{bt} \tilde{\pi}_t)} \\ &= \sum_{ab} \tilde{\pi}_a \tilde{\pi}_b \frac{\theta_{ab}^2}{(\sum_s \theta_{as} \tilde{\pi}_s) (\sum_t \theta_{bt} \tilde{\pi}_t)} = F(\mathbf{H}(\mathbb{D})) \end{aligned} \tag{5.190}$$

where the inequality comes from the Sedrakyas' inequality (5.188). $\square$

Proof of proposition 5.24. To prove this proposition, we use the fact that the equation of the K -means criterion for graphs given in Equation (5.137) satisfies

$$\begin{aligned} \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} K\text{-means}(\mathbf{c}; \mathbf{W}) &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} \left\{ \sum_{ij} \sum_k I(c_i = k) W_{ij}^2 - \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} \left\{ \sum_{ij} W_{ij}^2 - \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{c}} \left\{ - \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right\} \\ &= \operatorname{argmax}_{\mathbf{c}} \left\{ \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \tag{5.191}$$

To demonstrate the first point of the proposition, it is thus sufficient to study the last term of equation (5.191). We denote it Q , i.e.

$$Q(\mathbf{c}; \mathbf{W}) = \left\{ \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \right\}.$$

Taken at $E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]$, this criterion verifies

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{c}, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) &= \sum_{kj} \frac{1}{h_k} \left(\sum_i I(c_i = k) E[W_{ij} | \mathbf{c}^*] \right)^2 \\ &= \sum_{klb} \sum_j \frac{I(c_j = l, c_j^* = b)}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) E[W_{ij} | \mathbf{c}^*] \right)^2 \\ &= \sum_{klb} \sum_j \frac{I(c_j = l, c_j^* = b)}{n_k} \left(\sum_a \sum_i I(c_i = k, c_i^* = a) E[W_{ij} | \mathbf{c}^*] \right)^2 \\ &= \sum_{klb} \sum_j \frac{I(c_j = l, c_j^* = b)}{n_k} \left(\sum_a \sum_i I(c_i = k, c_i^* = a) \theta_{ab} \right)^2 \\ &= \sum_{klb} \sum_j \frac{I(c_j = l, c_j^* = b)}{\sum_a \sum_i I(c_i = k, c_i^* = a)} \left(\sum_a \sum_i I(c_i = k, c_i^* = a) \theta_{ab} \right)^2 \\ &= \sum_{klb} \sum_j \frac{I(c_j = l, c_j^* = b)}{\sum_a n R_{ka}} \left(\sum_a n R_{ka} \theta_{ab} \right)^2 \\ &\leq \sum_{klb} \sum_j I(c_j = l, c_j^* = b) \sum_a R_{ka} \theta_{ab}^2 \\ &= \sum_{klb} n R_{lb} \sum_a n R_{ka} \theta_{ab}^2 \\ &= \sum_{ab} n_a^* n_b^* \theta_{ab}^2 = Q(\mathbf{c}^*, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) \quad , \end{aligned} \tag{5.192}$$

where the inequality comes from the Sedrakyas' inequality (5.188).

This demonstrates that the function $\mathbf{c} \mapsto Q(\mathbf{c}; E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*])$ is maximized by $\mathbf{c}^*$ (up to a permutation) and so the K -means criterion applied to $E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]$ is minimized by $\mathbf{c}^*$.

For the second point, using Strong Law of Large Number, denoting $\mathbb{N}_k^* = n_k(\mathbf{c}^*)$, we have that $\frac{n_k^*}{n} \rightarrow \pi_k$, a.s. (random variables $\frac{n_k^*}{n} \in [0, 1]$). Thus, it is easy to see that

$$\frac{1}{n^2} Q(\mathbf{c}^*, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*]) = \sum_{ab} \frac{n_a^*}{n} \frac{n_b^*}{n} \theta_{ab}^2 \xrightarrow{a.s.} \sum_{ab} \pi_a \pi_b \theta_{ab}^2.$$

This last term is equal to $F(\mathbf{H}(\mathbb{D}), \mathbf{h}(\mathbb{D}))$, where F is the function associated to the profile likelihood of a model $\mathbf{SBM}(n, \pi, (\text{Gaussian}(\psi)), \boldsymbol{\theta})$ (c.f. last equality of Equations (5.189)). This concludes the proof of the second point.

The last point can be proved in the same way as the first one. □

Proof of the Theorem 5.4

This proof follows the same principle as the proof of the theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012).

Proof of theorem 5.4. To simplify the notations, we omit the dependency in n and in K . For example, instead of $\mathbf{W}_n$, we use $\mathbf{W}$ and of F_K we use F . From the sub-Gamma assumption, there exist constants $v, \kappa > 0$ such that $W_{ij} \sim \text{sub}\Gamma(\rho v^2, \kappa)$.

Using the Lipschitz property of F and that it satisfies (*), (Zhao et al., 2012) demonstrate in the step 2 of the proof of their theorem 4.1 that if there exists a sequence $\epsilon_n \rightarrow 0$, such that

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} \left| F \left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n} \right) \right) - F \left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n} \right) \right) \right| < \epsilon_n \right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1 \quad , \tag{5.193}$$

then there exists a sequence $\delta_n \rightarrow 0$ such that

$$\mathbb{P}\left(\frac{1}{n}\|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \delta_n\right) \rightarrow 0 \quad ,$$

where $\hat{\mathbf{c}} = \operatorname{argmax}_{\mathbf{c}} Q(\mathbf{c}; \mathbf{W})$, where $\mathbf{W}$ is the adjacency matrix of a weighted graph with latent partition $\mathbf{c}^*$.

Thus, if Equation (5.193) is verified by some criterion, then this criterion is weakly consistent.

So, to prove the theorem, we have to demonstrate (5.193).

Using the Lipschitz-properties of F , it gives

$$\begin{aligned} \left| F\left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right| &\leq \left| F\left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right| \\ &\quad + \left| F\left(\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right| \\ &\leq L \left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} + L \left\| \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) - \mathbf{T}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} \\ &\quad + L \left\| \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right) - \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right) \right\|_1 \\ &= A(\mathbf{c}) + B(\mathbf{c}) + C(\mathbf{c}) \quad . \end{aligned} \quad (5.194)$$

Therefore,

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{c}} \left| F\left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right| &\leq \max_{\mathbf{c}} (A(\mathbf{c}) + B(\mathbf{c}) + C(\mathbf{c})) \\ &\leq \max_{\mathbf{c}} A(\mathbf{c}) + \max_{\mathbf{c}} (B(\mathbf{c}) + C(\mathbf{c})) \quad . \end{aligned} \quad (5.195)$$

Let $\epsilon > 0$.

Using Lemma 5.7.1 on page 160, for the term A, we have

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\max_{\mathbf{c}} A(\mathbf{c}) > \epsilon) &= \mathbb{P}\left(L \max_{\mathbf{c}} \left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} > \epsilon\right) \\ &\leq K^n 2^{K^2+1} \exp\left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{32L^2(v^2 + \kappa\epsilon/(4L))}\right) + 2 \exp\left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{2L^2(v^2 + \kappa\epsilon/L)}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\epsilon^2 n^2 \log(n)}{32L^2(v^2 + \kappa\epsilon/(4L))} + (K^2 + 1)\log(2) + n\log(K)\right) + 2 \exp\left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{2L^2(v^2 + \kappa\epsilon/L)}\right) \quad . \end{aligned}$$

Therefore, assuming that $\frac{n\log(n)}{L^2 \max(n\log(n), K^2)} \rightarrow \infty$, we have that

$$-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{32L^2(v^2 + \kappa\epsilon/(4L))} + (K^2 + 1)\log(2) + n\log(K) \sim -\frac{\epsilon^2 \mu_n}{32L^2(v^2 + \kappa\epsilon/(4L))} \rightarrow -\infty \quad ,$$

and

$$\mathbb{P}(\max_{\mathbf{c}} A(\mathbf{c}) > \epsilon) \rightarrow 0 \quad .$$

Now we take a look at the two other terms B and C .

Since $\sum_k V_{kau}(\mathbf{c}) = 1$ for any a, u ,

$$\begin{aligned}
\frac{B(\mathbf{c})}{L} &= \left\| \hat{T}(\mathbf{c}) - T(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} \\
&= \sum_{kl} \left| \hat{T}_{kl}(\mathbf{c}) - T_{kl}(\mathbf{c}) \right| \\
&\leq \sum_{kl} \sum_{abuv} |y_u y_v \theta_{ab}| V_{kau}(\mathbf{c}) V_{lbv}(\mathbf{c}) \left| \hat{\Pi}_{au} \hat{\Pi}_{bv} - \Pi_{au} \Pi_{bv} \right| \\
&= \sum_{abuv} |y_u y_v \theta_{ab}| \left(\sum_k V_{kau}(\mathbf{c}) \right) \left(\sum_l V_{lbv}(\mathbf{c}) \right) \left| \hat{\Pi}_{au} \hat{\Pi}_{bv} - \Pi_{au} \Pi_{bv} \right| \\
&= \sum_{abuv} |y_u y_v \theta_{ab}| \left| \hat{\Pi}_{au} \hat{\Pi}_{bv} - \Pi_{au} \Pi_{bv} \right| \\
&\leq \tilde{L} \sum_{abuv} \left| \hat{\Pi}_{au} \hat{\Pi}_{bv} - \Pi_{au} \Pi_{bv} \right| \\
&\leq \tilde{L} \sum_{abuv} \left(\Pi_{bv} \left| \hat{\Pi}_{au} - \Pi_{au} \right| + \hat{\Pi}_{au} \left| \hat{\Pi}_{bv} - \Pi_{bv} \right| \right) \\
&= 2\tilde{L} \|\hat{\Pi} - \Pi\|_{\ell_1}
\end{aligned} \tag{5.196}$$

where $\tilde{L} = \max_{abuv} |y_u y_v P_{ab}| < \infty$. Moreover

$$\begin{aligned}
\frac{C(\mathbf{c})}{L} &= \left\| \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n} \right) - \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n} \right) \right\|_1 \\
&= \sum_k |n_k(\mathbf{c}) - n_k^0(\mathbf{c})| \\
&= \sum_k \left| \sum_{au} V_{kau} \hat{\Pi}_{au} - \Pi_{au} \right| \leq \sum_k \sum_{au} V_{kau} \left| \hat{\Pi}_{au} - \Pi_{au} \right| \\
&= \sum_{au} \left| \hat{\Pi}_{au} - \Pi_{au} \right| \\
&= \|\hat{\Pi} - \Pi\|_{\ell_1} .
\end{aligned} \tag{5.197}$$

Thus $\max_{\mathbf{c}} B(\mathbf{c}) \leq 2L\tilde{L}\|\hat{\Pi} - \Pi\|_{\ell_1}$ and $\max_{\mathbf{c}} C(\mathbf{c}) \leq L\|\hat{\Pi} - \Pi\|_{\ell_1}$. By the theorem 2.1 of (Weissman et al., 2003),

$$\mathbb{P}(\max_{\mathbf{c}} (B(\mathbf{c}) + C(\mathbf{c})) > \epsilon) = \mathbb{P}\left(L(2\tilde{L} + 1)\|\hat{\Pi} - \Pi\|_{\ell_1} > \epsilon\right) \leq 2^{KM} e^{-n \frac{\epsilon^2}{2L^2(2\tilde{L}+1)^2}} . \tag{5.198}$$

By hypothesis $\frac{n}{KML^2} \rightarrow \infty$, so we have

$$2^{KM} e^{-n \frac{\epsilon^2}{2L^2(2\tilde{L}+1)^2}} = \exp\left(-\frac{n}{L^2} \left(\frac{\epsilon^2}{(2\tilde{L}+1)^2} - \frac{L^2 KM}{n} \log(2) \right)\right)$$

and

$$\mathbb{P}(\max_{\mathbf{c}} (B(\mathbf{c}) + C(\mathbf{c})) > \epsilon) \rightarrow 0 .$$

Therefore, for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}\left(\max_{\mathbf{c}} \left| F\left(\frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right| > \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 ,$$

i.e. condition given in Equation (5.193) is satisfied which implies from step 2 of the proof of the theorem 4.1 in (Zhao et al., 2012) that the criterion is weakly consistent. $\square$

Remaining Proofs of section 5.2.4

This sections contains the proofs of Corollaries 5.4.1 and 5.4.2 as well as the proof of Theorem 5.5.

To demonstrate the corollary, it is sufficient to demonstrate that the two criteria are L_K Lipschitz. Indeed, the assumption (*) is satisfied from Proposition 5.21. However, global Lipschitz condition can be too restrictive.

Therefore, we demonstrate that the Lipschitz property in theorem 5.4 can be weaken. Then we demonstrate the corollaries.

Lemma 5.7.3. *Let the compact I be defined as*

$$I = I(\mathcal{X}, K, \boldsymbol{\theta}) = [2 \min_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'(\theta_n)_{k,l}, 2 \max_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'(\theta_n)_{k,l}]^{K_n \times K_n} \times (0, 1]^{K_n}.$$

The theorem 5.4 is still valid if we replace the F_K -Lipschitz condition (i) by

$$\text{the functions } F_{K_n} \text{ are } L_{K_n} - \text{Lipschitz on } I.$$

Proof. As in the proof of the theorem 5.4, we omit the dependency in n , such that K_n becomes K .

We have demonstrate in the proof of Theorem 5.4 on page 164, that when F_K is L_K -Lipschitz, $\mathbb{P}(\frac{1}{n}\|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \delta_n) \rightarrow 0$ for some sequence $\delta_n \rightarrow 0$.

But in facts, the Lipschitz condition is used in equation (5.194), and involves the points

$$\left(\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right), \quad \left(\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right), \quad \left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right), \quad \left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right).$$

From definition, $\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}$ and $\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}$ belongs to $(0, 1]$; $\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c})$ and $\mathbf{T}(\mathbf{c})$ belongs to I .

In addition from the Bernstein Inequality,

$$\mathbb{P}\left(\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \notin I\right) \rightarrow 0.$$

Thus denoting $E_n = \{\frac{1}{n}\|\hat{\mathbf{c}} - \mathbf{c}^*\|_{P_n} > \delta_n\}$, we have

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(E_n) &= \mathbb{P}(E_n \mid \frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \notin I) \mathbb{P}(\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \notin I) + \mathbb{P}(E_n \mid \frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \in I) \mathbb{P}(\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \in I) \\ &\leq \mathbb{P}(\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \notin I) + \mathbb{P}(E_n \mid \frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \in I). \end{aligned}$$

When $\frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \in I$, F_K is Lipschitz and thus $\mathbb{P}(E_n \mid \frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} \in I) \rightarrow 0$ and $\mathbb{P}(E_n) \rightarrow 0$. This concludes the proof. $\square$

Now we can demonstrate the two corollaries.

Proof of corollary 5.4.1. We present the case with no degree correction, i.e

$$F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \sum_{kl} A_{kl} \log\left(\frac{A_{kl}}{b_k b_l}\right).$$

The general case can be done similarly. Thanks to lemma 5.7.3, it is sufficient to show that the Lipschitz condition is true with probability going to 1 and that the condition (**) is true, the consistency being then a direct application of Theorem 5.4.

Recall that F is said to be Lipschitz if

$$|F(\mathbf{A}, \mathbf{b}) - F(\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})| \leq L_K (\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_{\ell_1} + \|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|_1).$$

As the functions $x \log(x)$ is C^1 on $[2 \min_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'\theta_{k,l}, 2 \max_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'\theta_{k,l}]$, $F(\cdot, b)$ is Lipschitz.

We have that for any $a, b \geq 1$,

$$\left| \frac{{}^c W_{k,l}}{n^2 \rho_n} \log(an_l) - \frac{{}^c W_{k,l}}{n^2 \rho_n} \log(bn_l) \right| = \left| \frac{{}^c W_{k,l}}{n^2 \rho_n} \right| \left| \log\left(\frac{a}{b}\right) \right| \leq \left| \frac{{}^c W_{k,l}}{n^2 \rho_n} \right| |a - b|$$

as the log function is 1 Lipschitz on $[1, +\infty)$.

As $\mathbb{P}(|\frac{{}^c W_{k,l}}{n^2 \rho_n}| \in [2 \min_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'\theta_{k,l}, 2 \max_{y, y' \in \mathcal{X}} yy'\theta_{k,l}]) \rightarrow 1$.

In addition, as $\max_{y, y' \in \mathcal{X}} |yy'\theta_{k,l}|$ is bounded independently of n and K by hypothesis, F_K is L_K -Lipschitz with

$L_K = O(1)$.

The hypothesis (**) is satisfied from proposition 5.21.

This concludes the proof. $\square$

Proof of corollary 5.4.2. Since proposition 5.22 (respectively 5.23) demonstrate condition $(**)$ (respectively $(*)$), it is sufficient to show that the Lipschitz condition is satisfied. The proof is the same as in the proof of corollary 5.4.1 on page 167. $\square$

Proof of Theorem 5.5. The proof is slightly different from the previous case. In the sense that we must redefine the expected criteria and show that they have good concentration properties. As the W_{ij} are bounded, there exists $L > 0$ such that $W_{ij} \in [-L, L]$. In addition, there exist $v, \kappa > 0$ such that $W_{ij} \sim \text{sub}\Gamma(\rho v^2, \kappa)$.

On $[-L, L]$, $x \mapsto x^2$ is $2L$ Lipschitz. So, let Q be

$$Q(\mathbf{c}; \mathbf{W}, (n_k)_k) = \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 \quad (5.199)$$

Recall that maximizing Q is equivalent to minimizing the K -means criterion (c.f. proof of proposition 5.24). It gives

$$\begin{aligned} |Q(\mathbf{c}; \mathbf{W}, (n_k)_k) - Q(\mathbf{c}; \tilde{\mathbf{W}}, (n_k)_k)| &= \left| \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 - \left(\sum_i I(c_i = k) \tilde{W}_{ij} \right)^2 \right| \\ &\leq \sum_k \sum_j \frac{1}{n_k} \left| \left(\sum_i I(c_i = k) W_{ij} \right)^2 - \left(\sum_i I(c_i = k) \tilde{W}_{ij} \right)^2 \right| \\ &\leq 2L \sum_k \sum_j \left| \sum_i I(c_i = k) W_{ij} - \sum_i I(c_i = k) \tilde{W}_{ij} \right| \\ &\leq 2L \sum_k \sum_j \sum_i I(c_i = k) |W_{ij} - \tilde{W}_{ij}| \\ &= 2L \|\mathbf{W} - \tilde{\mathbf{W}}\|_{\ell_1} . \end{aligned} \quad (5.200)$$

Using the lemma 5.7.1 gives

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} \left| \frac{1}{\mu_n} Q(\mathbf{c}, \mathbf{W}, (n_k)_k) - \frac{1}{\mu_n} Q(\mathbf{c}, E[\mathbf{W} | \mathbf{c}^*], (n_k)_k) \right| > \epsilon \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left(2L \max_{\mathbf{c}} \left\| \frac{\mathbf{W}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}} \right\|_{\ell_1} > \epsilon \right) \\ &\leq K^n 2^{K^2+1} \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{128 L^2 (v^2 + \kappa \epsilon / (8L))} \right) + 2 \exp \left(-\frac{\epsilon^2 \mu_n}{8 L^2 (v^2 + \kappa \epsilon / (2L))} \right) . \end{aligned}$$

As $\frac{\mu_n}{n \log(n)} \rightarrow \infty$ by hypothesis, the above probability goes to 0 as $n \rightarrow \infty$.

In addition, again from the Lipschitz property of Q ,

$$\|Q(\mathbf{c}; \hat{\mathbf{T}}, (n_k)_k) - Q(\mathbf{c}; \mathbf{T}, (n_k)_k)\| \leq 2L \|\hat{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\|_{\ell_1} .$$

And from the proof of theorem 5.4, we have for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}(L \|\hat{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\|_{\ell_1} > \epsilon) \leq 2^{KM} e^{-n \frac{\epsilon^2}{L^2}} .$$

Thus as long as $\frac{n}{KM} \rightarrow \infty$, we have that

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} \left| Q \left(\mathbf{c}; \frac{\mathbf{W}}{\mu_n}, (n_k)_k \right) - Q(\mathbf{c}; \mathbf{T}, (n_k)_k) \right| > \epsilon \right) \rightarrow 0 .$$

The same reasoning (c.f. proof of theorem 5.4) can be used to prove that

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} \left| Q \left(\mathbf{c}; \frac{\mathbf{W}}{\mu_n}, (n_k)_k \right) - Q(\mathbf{c}; \mathbf{T}, (n_k^0)_k) \right| > \epsilon \right) \rightarrow 0 .$$

Then, applying Step 2 of the proof 5.2.7 and proposition 5.24 concludes the proof. $\square$

Proofs of section 5.2.5

Proof of Proposition 5.26. Let $\mathbf{W} \in \{0, 1\}^{n \times n}$. From the definitions of Q (conditional distribution of a canonical exponential function) and P (conditional distribution of an SBM), there exist positive values c_q and c_p such that the density dQ of Q has the form

$$dQ(\mathbf{W}) = \frac{1}{c_q} \exp \left(\sum_{1 \leq k \leq l \leq K} \eta_{k,l} {}^c W_{k,l} + \sum_{k=1}^K \eta_k s_k(\mathbf{W}) \right)$$

while the density dP of P can be written as

$$dP(\mathbf{W}) = \frac{1}{c_p} \exp \left(\sum_{1 \leq k \leq l \leq K} \theta_{k,l} {}^c W_{k,l} W_{ij} \right) .$$

To prove the theorem, we have to find a matrix of parameters $\boldsymbol{\theta}$ such that $KL(Q, P) \leq n \max_k \eta_k$.

Let α_{kl} be some real numbers, and choose for parameter θ_{kl} , $\theta_{kl} = \eta_{kl} + \alpha_k \delta_{kl}$.

Thus, the problem reduces to finding suitable parameters α_k .

Computing the Kullback-Leibler divergence between Q and P gives,

$$\begin{aligned} KL(Q, P) &= \sum_{\mathbf{W}} dQ(\mathbf{W}) \log \left(\frac{dQ(\mathbf{W})}{dP(\mathbf{W})} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{W}} \frac{q(\mathbf{W})}{c_q} \log \left(\frac{q(\mathbf{W})}{c_q} \frac{c_p}{p(\mathbf{W})} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{W}} \frac{q(\mathbf{W})}{q} \log \left(\frac{q(\mathbf{W})}{p(\mathbf{W})} \right) + \sum_{\mathbf{W}} \frac{q(\mathbf{W})}{c_q} \log \left(\frac{c_p}{c_q} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{W}} \frac{q(\mathbf{W})}{c_q} \left[\sum_k s_k(\mathbf{W}) \eta_k - \alpha_k {}^c W_{k,k} \right] + \log \left(\frac{c_p}{c_q} \right) . \end{aligned} \quad (5.201)$$

Now, setting

$$\alpha_k = \eta_k \frac{\sum_{\mathbf{W}} q(\mathbf{W}) s_k(\mathbf{W})}{\sum_{\mathbf{W}} q(\mathbf{W}) {}^c W_{k,k}} \quad (5.202)$$

implies the left term of Kullback-Leibler divergence is 0 and the Kullback-Leibler divergence simplifies into

$$\begin{aligned} KL(Q, P) &= \log \left(\frac{c_p}{c_q} \right) \\ &= \log \left(\frac{\sum_{\mathbf{W}} \exp(\sum_{kl} {}^c W_{k,l} \eta_{kl} + \sum_k \alpha_k {}^c W_{k,k})}{\sum_{\mathbf{W}} \exp(\sum_{kl} {}^c W_{k,l} \eta_{kl} + \sum_k \eta_k s_k(\mathbf{W}))} \right) \\ &= \log \left(\frac{\sum_{\mathbf{W}} \exp(\sum_{kl} {}^c W_{k,l} \eta_{kl} + \sum_k \eta_k s_k(\mathbf{W}) + \sum_k (\alpha_k {}^c W_{k,k} - \eta_k s_k(\mathbf{W})))}{\sum_{\mathbf{W}} \exp(\sum_{kl} {}^c W_{k,l} \eta_{kl} + \sum_k \eta_k s_k(\mathbf{W}))} \right) \\ &= \log \left(E_Q \left[\exp \left(\sum_k (\alpha_k {}^c W_{k,k} - \eta_k s_k(\mathbf{W})) \right) \right] \right) . \end{aligned} \quad (5.203)$$

This equation is difficult to evaluate, and we simply provide a general upper bound.

As $\eta_k \geq 0$ and $s_k(\mathbf{W}) = \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W}) \leq \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij}(\mathbf{W}) = {}^c W_{k,k}$, it implies that $0 \leq \alpha_k \leq \eta_k$. This leads to

$$\alpha_k {}^c W_{k,k} - \eta_k s_k \leq \eta_k ({}^c W_{k,k} - s_k(\mathbf{W})) = \eta_k \sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} (1 - \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W})) . \quad (5.204)$$

So now it remains to look at the maximal value of

$$\sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij} (1 - \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W})) . \quad (5.205)$$

In order that a term in the sum of Equation (5.205) is equal to 1, it requires $\mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W}) = 0$, i.e.

$$\sum_{h \notin \{i,j\}, c_h=k} W_{ih}W_{jh} = 0 \quad .$$

Let $\widetilde{\mathbf{W}} \in \{0,1\}^{n_k \times n_k}$ be the matrix $\mathbf{W}_{(k,k)}$ such that diagonal elements are set to 0. Then $\langle \widetilde{\mathbf{W}}_i, \widetilde{\mathbf{W}}_j \rangle = \sum_{h \notin \{i,j\}} W_{ih}W_{jh}$. Therefore, $\mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W}) = 0$ is equivalent to $\widetilde{\mathbf{W}}_i$ orthogonal to $\widetilde{\mathbf{W}}_j$. And there are at most n_k orthogonal vectors in space of dimension n_k . So

$$\sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} (1 - \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W})) \leq 2n_k \quad (5.206)$$

and as $W_{ij} \in \{0,1\}$,

$$\sum_{i:c_i=k, j:c_j=k} W_{ij}(1 - \mathbb{1}_{ijk}(\mathbf{W})) \leq 2n_k \quad . \quad (5.207)$$

Using this and $\alpha_k^c W_{k,k} - \eta_k s_k(\mathbf{W}) \leq \eta_k n_k$, we have that

$$\sum_k (\alpha_k^c W_{k,k} - \eta_k s_k(\mathbf{W})) \leq \sum_k \eta_k 2n_k \leq 2 \max_k \eta_k \sum_k n_k = 2n \max_k \eta_k \quad .$$

And finally

$$KL(Q, P) = \log \left(E_Q \left[\exp \left(\sum_k (\alpha_k^c W_{k,k} - \eta_k s_k(\mathbf{W})) \right) \right] \right) \leq 2n \max_k \eta_k \quad . \quad (5.208)$$

This concludes the proof. $\square$

Proof of proposition 5.27. The proposition requires that it exists some value $K \in \{1, \dots, d\}$ such that the "block" structure is verified. Thus, demonstrating the proposition for $K = d$ is enough.

As Σ is a covariance matrix, there exists a vector $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}_+^d$ and a symmetric matrix $\boldsymbol{\theta} \in [-1, 1]^{d \times d}$ such that

$$\Sigma_{ij} = x_i^* x_j^* \theta_{ij},$$

x_i^* simply being the standard deviation of $X_i^{(1)}$ and θ_{ij} the correlation between $X_i^{(1)}$ and $X_j^{(1)}$. Denote $\mathbf{c}^* = \{1, 2, \dots, d\}$ and let Π be the Dirac probability distribution on $\{\mathbf{c}^*\} \times \{\mathbf{x}^*\}$.

From the definition of the unbiased empirical covariance, there exist distributions (F_{ij}) such that $\frac{\hat{\Sigma}_{ij}}{x_i^* x_j^*} \sim F_{ij}$, and $E[F_{ij}] = \theta_{ij} = \theta_{c_i^*, c_j^*}$.

Then considering the following generation process for

- $\mathbf{c}, \mathbf{x} \sim \Pi$,
- $\frac{W_{ij}}{x_i x_j} | \mathbf{x} \sim F_{ij}$, for any $1 \leq i, j \leq d$.

Then from definition of F_{ij} , $E[W_{ij} | \mathbf{c}, \mathbf{x}] = x_i x_j \theta_{c_i c_j}$. Thus this defines a dBM($d, \Pi, \boldsymbol{\theta}$).

Thus for $K = d$, this demonstrates the proof. $\square$

Proof of theorem 5.6. The steps of this proof are the same as the one of theorem 5.4. However, it differs from it only in the analysis of the concentration properties of $^c \mathbf{W}$. Indeed, for the estimator correlation matrix, the coefficients are, in general, not independent. So we cannot use the Bernstein inequality directly on $^c W_{k,l}$ as in the previous proof.

We simplify the notation by removing any dependency in n, d and K in the notations. Also notice that unlike previously, here the sparsity parameter $\rho_n = 1$, i.e. there is no particular sparsity assumption. In the proof we consider the same notation as in (5.178), with $\mathbf{c}^*$ in the role of the latent partition and $\boldsymbol{\theta}^*$ for the matrix of parameters (we consider no degree correction). This interpretation is motivated by the proposition 5.27, which draw parallels between a correlation matrix with block structure and dBM. Thus, in particular, from the definition, we have $\hat{T}_{kl}(\mathbf{c}) = \frac{^c \hat{\Sigma}_{k,l}}{\mu_n}$, with $\mu_n = d^2$.

Let $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{c}) \in \{0,1\}^{d \times K}$ such that $M_{ik} = I(c_i = k)$, we have $^c \hat{\Sigma}_{k,l} = (\mathbf{M}(\mathbf{c})^T \hat{\Sigma} \mathbf{M}(\mathbf{c}))_{kl}$. As in Equation (5.194) on page 165, using the fact that F is L -Lipschitz, and that $\hat{\mathbf{T}} = \frac{E[^c \hat{\Sigma}_{k,l}]}{d^2}$, it leads to

$$\begin{aligned} \left| F \left(\frac{^c \hat{\Sigma}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n} \right) \right) - F \left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n} \right) \right) \right| &\leq L \left\| \frac{^c \hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} \\ &+ L \left\| \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) - \mathbf{T}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} + L \left\| \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n} \right) - \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n} \right) \right\|_1 \quad . \end{aligned}$$

From the Equation (5.198) on page 166, the two left terms of the right hand side of the above equations converge in probability to 0. Thus if we can show that $\left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1}$ goes to 0 in probability, we have that $\left| F\left(\frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n}, \left(\frac{n_k(\mathbf{c})}{n}\right)\right) - F\left(\mathbf{T}(\mathbf{c}), \left(\frac{n_k^0(\mathbf{c})}{n}\right)\right) \right|$ also converges to 0 in probability and the results follows by applying the step two of the proof of Theorem 4.1 of (Zhao et al., 2012) as in the proof of theorem 5.2.7.

$$\begin{aligned}
L \left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} &= \left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{d^2} - \frac{\mathbf{c}\Sigma}{d^2} \right\|_{\ell_1} \\
&\leq \frac{L}{d^2} \|\mathbf{c}\hat{\Sigma} - \mathbf{c}\Sigma(\Sigma)\|_{\ell_1} \\
&= \frac{L}{d^2} \|\mathbf{M}(\mathbf{c})^T (\hat{\Sigma} - \Sigma) \mathbf{M}(\mathbf{c})\|_{\ell_1} \\
&= \frac{L}{d^2} \sum_{kl} \left| \left(\mathbf{M}(\mathbf{c})^T (\hat{\Sigma} - \Sigma) \mathbf{M}(\mathbf{c}) \right)_{kl} \right| \\
&= \frac{L}{d^2} \sum_{kl} \left| \sum_{ij} M(\mathbf{c})_{ik} (\hat{\Sigma} - \Sigma)_{ij} M(\mathbf{c})_{jl} \right| \\
&\leq \frac{L}{d^2} \sum_{kl} \sum_{ij} M(\mathbf{c})_{ik} |\hat{\Sigma} - \Sigma|_{ij} M(\mathbf{c})_{jl} \\
&= \frac{L}{d^2} \sum_{ij} |\hat{\Sigma} - \Sigma|_{ij} \\
&= \frac{L}{d^2} \|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\ell_1} \\
&\leq L \|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} .
\end{aligned} \tag{5.209}$$

Thus

$$\max_{\mathbf{c}} L \left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} \leq L \|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} \tag{5.210}$$

and from hypothesis (5.176), for any $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\max_{\mathbf{c}} L \left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} > \epsilon \right) \leq \mathbb{P} \left(L \|\hat{\Sigma} - \Sigma\|_{\max} > \epsilon \right) \leq d^2 e^{-\frac{\epsilon n \epsilon^2}{L^2}} . \tag{5.211}$$

As $d = o(\log(n))$, $d^2 e^{-\frac{\epsilon n \epsilon^2}{L^2}} \rightarrow 0$ and

$$\mathbb{P}(L \left\| \frac{\mathbf{c}\hat{\Sigma}}{\mu_n} - \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{c}) \right\|_{\ell_1} > \epsilon) \rightarrow 0 ,$$

which concludes the proof. $\square$

Proof of corollary 5.6.1. To show this proposition, it suffices to show that the sequence of functions F_{K_n} are Lipschitz and satisfies (**).

Those two properties have already being proved in corollary 5.4.2 for the Gaussian SBM profile likelihood.

If the correlation matrix Σ have all its entries positive, the Poisson DCSBM profile likelihood also satisfies those properties (c.f. corollary 5.4.1).

If not, we still have that F satisfies **, thus we have to show that

$$\frac{\Sigma}{d^2}, \left(\frac{n_k}{n}\right) \mapsto F\left(\frac{|\Sigma|}{d^2}, \left(\frac{n_k}{n}\right)\right) \tag{5.212}$$

is Lipschitz.

As F is Lipschitz (c.f. 5.4.1),

$$|F(|\mathbf{A}|, \mathbf{a}) - F(|\mathbf{B}|, \mathbf{b})| \leq L \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{\ell_1} + L \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_1 .$$

To show that the function defined in Equation (5.212) is Lipschitz, it is thus sufficient to show that there exists

$L_1 > 0$ such that

$$\| |\mathbf{A}| - |\mathbf{B}| \|_{\ell_1} \leq \| \mathbf{A} - \mathbf{B} \|_{\ell_1} \quad .$$

From the reverse triangular inequality, we have that

$$||x| - |y|| \leq |x - y|$$

for any $x, y \in \mathbb{R}$. Thus $\| |\mathbf{A}| - |\mathbf{B}| \|_{\ell_1} \leq \| \mathbf{A} - \mathbf{B} \|_{\ell_1}$ and the function in (5.212) is Lipschitz. Then, using the theorem 5.6 concludes the proof. $\square$

Proofs of Concentration Properties

Proof of Lemma 5.7.1. We begin by point i.

The idea of the proof is to provide an adapted decomposition of $\left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}\mathbf{W}]}{\mu_n} \right\|_{\ell_1}$, so that we can apply the Bernstein inequality to each terms of the decomposition.

From its definition, we have

$$\left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}\mathbf{W}]}{\mu_n} \right\|_{\ell_1} = \sum_{k,l} \left| \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \quad . \quad (5.213)$$

Denoting $T = \sum_{k,l} E[\mathbf{c}W_{k,l}]$, recalling that $2m = \sum_{k,l} \mathbf{c}W_{k,l}$, and letting $A = \{(k,l) | \mathbf{c}W_{k,l} > E[\mathbf{c}W_{k,l}]\}$ (notice that this set depends on $\mathbf{c}$), we can write

$$\begin{aligned} \sum_{k,l} \left| \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right| &= \sum_{(k,l) \in A^c} \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} - \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} + \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \\ &= \sum_{(k,l) \in A^c} \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} - \sum_{(k,l) \in A^c} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} + \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \sum_{(k,l) \in A^c} \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \\ &= \left(T/\mu_n - \sum_{(k,l) \in A} \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right) - \left(2m/\mu_n - \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} \right) + \\ &\quad \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \sum_{(k,l) \in A^c} \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \\ &= \frac{T - 2m}{\mu_n} + 2 \sum_{(k,l) \in A} \left(\frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right) \\ &\leq \frac{|T - 2m|}{\mu_n} + 2 \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \quad . \end{aligned} \quad (5.214)$$

Thus, we can write that

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(\left\| \frac{\mathbf{c}\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}\mathbf{W}]}{\mu_n} \right\|_{\ell_1} > \epsilon \right) &\leq \mathbb{P} \left(\frac{|T - 2m|}{\mu_n} + 2 \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right| > \epsilon \right) \\ &\leq \mathbb{P} \left(\frac{|T - 2m|}{\mu_n} > \frac{\epsilon}{2} \right) + \mathbb{P} \left(2 \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{\mathbf{c}W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[\mathbf{c}W_{k,l}]}{\mu_n} \right| > \frac{\epsilon}{2} \right) \quad . \end{aligned} \quad (5.215)$$

For the left term, since the variables W_{ij} are independent and sub-Gamma, i.e. $\text{sub}\Gamma(\rho_n v^2, \kappa)$, we can apply the Bernstein inequality, which gives for any $\epsilon > 0$

$$\mathbb{P} \left(\frac{|T - 2m|}{\mu_n} > \epsilon \right) \leq 2 \exp \left(- \frac{\epsilon \mu_n^2}{2 \left(\kappa \mu_n \epsilon + \sum_{i,j} v^2 \rho \right)} \right) = 2 \exp \left(- \frac{\mu_n \epsilon^2}{2(v^2 + \kappa \epsilon)} \right) \quad . \quad (5.216)$$

For the remaining term, we have to go a little further in the analysis. Using the indicator function, we can

write

$$\sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c\mathbf{W}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c\mathbf{W}]}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_n} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l, (k, l) \in A) (W_{ij} - E[W_{ij}]) \quad . \quad (5.217)$$

Thus, we can again use Bernstein Inequality to study the concentration properties of this term. This gives

$$\mathbb{P} \left(2 \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| > \frac{\epsilon}{2} \right) \leq 2 \exp \left(- \frac{\epsilon^2 \mu_n}{32(v^2 + \kappa \epsilon / 4)} \right) \quad . \quad (5.218)$$

For the point ii, we want to study the maximum on the partitions $\mathbf{c}$.

From the equation (5.214), we have that

$$\max_{\mathbf{c}} \sum_{k,l} \left| \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \leq \frac{|T - 2m|}{\mu_n} + 2 \max_{\mathbf{c}} \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \quad .$$

As for point i, we can study the concentration by studying the concentration properties of the two terms on the right-hand side of the equation.

As the first terms does not depend on $\mathbf{c}$, this leads to the same concentration inequality as above. However, the second one as a complex dependency in $\mathbf{c}$ as the set A depends on $\mathbf{c}$. Without further assumption, we can write

$$\max_{\mathbf{c}} \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \leq \max_{\mathbf{c}} \max_A \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| \quad (5.219)$$

where A is now any set of tuples $(k, l) \in \{1, \dots, K\}$. Combining equations (5.217) and (5.219),

$$\begin{aligned} & \mathbb{P} \left(2 \max_{\mathbf{c}} \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| > \frac{\epsilon}{2} \right) \\ & \leq \mathbb{P} \left(2 \max_{\mathbf{c}} \max_A \left| \sum_{(k,l) \in A} \frac{{}^c W_{k,l}}{\mu_n} - \frac{E[{}^c W_{k,l}]}{\mu_n} \right| > \frac{\epsilon}{2} \right) \\ & \leq \sum_{\mathbf{c}} \sum_A \mathbb{P} \left(2 \left| \frac{1}{\mu_n} \sum_{ij} I(c_i = k, c_j = l, (k, l) \in A) (W_{ij} - E[W_{ij}]) \right| > \frac{\epsilon}{2} \right) \\ & \leq K^n 2^{K^2} 2 \exp \left(- \frac{\epsilon^2 \mu_n}{32(v^2 + \kappa \epsilon / 4)} \right) \end{aligned} \quad (5.220)$$

where the last inequality comes from a union bound, where there are 2^{K^2} possible values for the set A and K^n values for the partition $\mathbf{c}$.

This concludes the proof. $\square$

Proof of Proposition 5.29. To prove the proposition, we start by rewriting the mixture distribution.

Let $B \sim \text{Bernoulli}(\rho)$ independent of X . We have that

$$(1 - \rho)\delta_0 + \rho X \sim BX \quad .$$

Thus, the study of the concentration of the mixture distribution can be replaced by the study of the one of the product BX .

In addition, from the independence of B and X , we have $E[BX] = E[B]E[X] = \rho\mu$.

Now, we will study $E[|BX - E[BX]|^p]$, for any $p \geq 2$. To do so, we will use that $|a + b|^p \leq 2^{p-1}(|a|^p + |b|^p)$.

$$\begin{aligned}
E[|BX - \rho\mu|^p] &= E[|B(X - \mu) + (B - \rho)\mu|^p] \\
&\leq 2^{p-1} (E[|B(X - \mu)|^p] + E[|(B - \rho)\mu|^p]) \\
&= 2^{p-1} (E[|B|^p]E[|X - \mu|^p] + |\mu|^p E[|B - \rho|^p]) \\
&= 2^{p-1} (\rho E[|X - \mu|^p] + |\mu|^p (\rho(1 - \rho)^p + (1 - \rho)\rho^p)) \\
&\leq 2^{p-1} \left(\rho \frac{\sigma^2}{2} \kappa^{p-2} p! + |\mu|^p (\rho(1 - \rho)^p + (1 - \rho)\rho^p) \right) \\
&= \frac{2\rho\sigma^2}{2} p! (2\kappa)^{p-2} + \frac{1}{2} (2|\mu|)^p \rho(1 - \rho)^p + \frac{1}{2} (2|\mu|)^p (1 - \rho)\rho^p \\
&= \frac{\rho}{2} (2\sigma^2 (2\kappa)^{p-2} p! + (2|\mu|(1 - \rho))^p + (2|\mu|)^p \rho^{p-1} (1 - \rho)) \\
&= \frac{\rho}{2} p! \left(2\sigma^2 (2\kappa)^{p-2} + \frac{1}{p!} (2|\mu|(1 - \rho))^p + \frac{1}{p!} (2|\mu|)^p \rho^{p-1} (1 - \rho) \right) \\
&\leq \frac{\rho}{2} p! \left(2\sigma^2 (2\kappa)^{p-2} + \frac{1}{p!} (2|\mu|)^p + \frac{1}{p!} (2|\mu|)^p \right) \\
&\leq \frac{\rho}{2} p! \left(2\sigma^2 (2\kappa)^{p-2} + \frac{1}{2} (2|\mu|)^p + \frac{1}{2} (2|\mu|)^p \right) \\
&= \frac{\rho}{2} p! (2\sigma^2 (2\kappa)^{p-2} + (2|\mu|)^{p-2} (2|\mu|)^2)
\end{aligned}$$

Now denote $\tilde{\kappa} = \max\{\kappa, |\mu|\}$. We have

$$\begin{aligned}
E[|BX - \rho\mu|^p] &\leq \frac{\rho}{2} p! (2\sigma^2 (2\tilde{\kappa})^{p-2} + (2\tilde{\kappa})^{p-2} (2|\mu|)^2) \\
&= \frac{\rho}{2} p! (2\tilde{\kappa})^{p-2} (2\sigma^2 + 4\mu^2) \quad .
\end{aligned}$$

This means that

$$(XB - E[XB]) \sim BMC(2\sigma^2 + 4\mu^2, 2\max\{\kappa, |\mu|\}) \quad ,$$

and thus the mixture distribution satisfies the Bernstein's moment condition. From proposition 5.28, the distribution is sub-Gamma with the same parameters as for the Bernstein's moment condition. $\square$

Non-Conformity Rate of Several Characteristics

6.1 Non Conformity Rate and Copulas

6.1.1 Introduction

Process Capability Indices (PCIs) have many applications in the industry (A. K. Chakraborty and M. Chatterjee, 2021). For example, they can be used as a goal of performance, a criterion for prioritization, or to compare productions (Daniels et al., 2004).

Univariate PCIs (uPCIs) are often considered, as they are usually easy to compute and interpret. However, it is, in general, not sufficient as there are many cases (A. K. Chakraborty and M. Chatterjee, 2021) where the conformity of the final product is defined through joint conformity to several specifications. This is notably the case in aircraft engine manufacturing, where parts may have several hundred specifications to be verified. Because the different specifications frequently have some dependency between them, the use of uPCIs may not be enough to analyze industrial processes properly (ISO, 2013). Indeed, this is equivalent in some sense to assume that the specifications are independent. This may considerably underestimate the values of the multivariate PCIs (mPCIs).

Therefore, many authors have looked for mPCIs. It provides vast literature on mPCIs (see for example (A. K. Chakraborty and M. Chatterjee, 2021)). However, as in the univariate case, most of the methods rely on the Gaussian distribution assumption of the data. This assumption is not always true (Croquelois et al., 2022) because of modern Geometric Dimensioning & Tolerancing (GD&T) methods. However, those PCIs have the advantage that they are often easy to compute. In contrast, this is not the case with general methods without distributional assumptions, which often leads to poor estimates. Therefore, the general problem of producing mPCI requires two-steps. First, choosing a meaningful criterion for the industry; second, selecting an estimator with good statistical properties. Indeed, the norm (ISO, 2013) on mPCIs reviews different indices without explaining how to select a mPCI nor giving a generic estimation method for non-Gaussian distributions. Furthermore, compared to other industries such as automobiles or semiconductors, aeronautical production has the particularity of producing certain parts in very small series. This is the case, for example, for intermediate casing where only around ten parts are produced each week, while several hundred characteristics are measured on each part. This high dimensional setting is the reason the usual statistical methods, which often require a significant amount of data, cannot be applied to all the aeronautical production.

Our contribution to this problem is to consider a mPCI based on the probability of conforming parts with a method of estimation based on Vine Copulas (Bedford and Cooke, 2002). Vine Copulas are general statistical models that can be used to produce precise estimation of the dependency structure even in high dimensions. It makes them particularly useful to estimate mPCIs. The use of Vine Copulas generalizes Gaussian distribution cases and it is often a good approximation for a general distribution (Stöber et al., 2013) while leading to more precise estimation than nonparametric estimation. The default of this approach is that it can be heavy to compute. For this reason, one proposes an upper bound on the non-conformity rate, which is much faster to compute, and which leads to a lower bound on our mPCI. In addition to these theoretical arguments, one illustrates the adaptability of our method on simulated data that represents particularities of aircraft production, and one then applies it to the Fan blades manufacturing data to compare the production between two factories.

The remainder of this paper is structured as follows. Section 2 gives examples of specifications in tolerancing that highlight why mPCIs are needed and why the Gaussian assumption is not realistic. Section 3 presents a state of the art of mPCIs. Section 4 describes the proposed method, motivating our choice of mPCI, the use of Vine Copulas, and explaining our lower bound. Finally, to illustrate the performance of the method, case studies are proposed in section 5.

6.1.2 GD&T Related Problems

Non Normality in the Data

Today, most functional requirements are expressed in terms of geometric specifications (Croquelois et al., 2022). For example, looking at Figure 6.1, the hole position is linked to the hole center along the axis. Denoting X and Y those positions, they are, in general, distributed as two independent Gaussian distributions with mean 0 and variance σ^2 . The position R of the hole, being defined as $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$, R follows a Rayleigh distribution with parameter σ^2 , which differs from a Gaussian distribution. Other examples of such situations are described by (Lépine and Tahan, 2016).

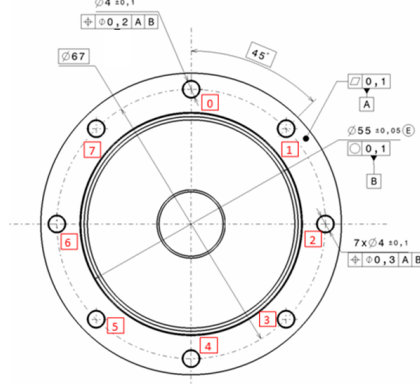


Figure 6.1 – Example of a geometrical specification

Repeated Measurements

When studying the circular parts, such as compressor disks or intermediate casings, it is common for several specifications to be the same. To illustrate this situation, one looks at the simplified example in figure 6.1, where the diameters of the holes 0 to 7 have the same specifications. Thus, their conformity is ensured if

$$LSL \leq D_i \leq USL, \quad \forall i \in \{0, \dots, 7\}.$$

To analyze the conformity regarding those specifications, it is sufficient to look at the maximum $\text{Max} = \max_{0 \leq i \leq 7} D_i$ and minimum values $\text{Min} = \min_{0 \leq i \leq 7} D_i$ of the eight diameters, i.e.,

$$LSL \leq \text{Min} \quad \text{and} \quad \text{Max} \leq USL \quad . \quad (6.1)$$

In addition, even if the diameters follow a Gaussian distribution (often highly correlated), both Max and Min values are then non-Gaussian distributed. In fact, even the dependency structure between those two differ from the dependency structure of the Gaussian distribution.

Material Condition

The maximum material condition (MMC) (ISO, 2021b; Diplaris and Sfantsikopoulos, 2006; Tahan and Cauvier, 2012) is another application where conformity requires analysis of the conformity of two dependent characteristics. It is used in various industries, including aeronautic. Here, one considers a simplified example of a part with diameter and position. Without the MMC, the value W of the diameter is conforming if $LSL^W \leq W \leq USL^W$ and the value P of the position is conforming if $P \leq USL^P$. As in general W and P are independent, each specification can be studied separately. However, with MMC, the position is compliant if $P \leq USL^P + (W - LSL^W)$ (assuming W is itself compliant). Thus, the conformity of the diameter and position can be rewritten as the system of equations 6.2.

$$\begin{aligned} LSL^W &\leq W \leq USL^W \\ M &\leq USL^P - LSL^W \end{aligned} \quad (6.2)$$

where $M = P - W$. The system of equations 6.2 corresponds to the study of a process (W, M) with correlated variables.

Note that the least material condition (ISO, 2021b) can receive an equivalent treatment.

High dimensional specifications

The two examples above illustrate cases with two dependent variables. But in practice, there can be much more. Consider complex parts such as the Fan blade. In this part, the dimensional characteristics are measured at different points called sections (Capiez-Lernout et al., 2005). A Fan blade with its sections is presented in figure 6.2. Thus, on this part, the conformity of several hundred characteristics must be checked. However, unlike repeated measurements, specifications of the same kinds through the different sections may be different. Hence, it is not possible to aggregate the different specifications with the approach described in section 6.1.2. In addition, because of the manufacturing processes, same kind of specifications controlled at different sections of the part are dependent. Studying part conformity therefore requires analysis of the conformity of mutually dependent characteristics.

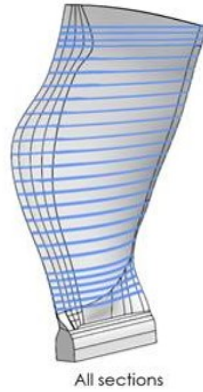


Figure 6.2 – Illustration of a Fan blade with its different sections

6.1.3 mPCIs State of the Art

Univariate PCIs

Before looking at mPCIs, one reminds some univariate PCIs, as many mPCIs are generalizations of the latter. Among all the PCIs literature, two of the most used are the Cp and the Cpk . Initially considered for a process X with tolerance limits $[LSL, USL]$ and Gaussian distribution $N(\mu, \sigma^2)$, they are defined by

$$\begin{aligned} Cp &= \frac{USL - LSL}{6\sigma} \\ Cpk &= \frac{1}{3\sigma} \min(USL - \mu, \mu - LSL) \end{aligned} \quad (6.3)$$

Later, to generalize it, to non-Gaussian distribution, (Clements, 1989) proposed to use

$$\begin{aligned} C_p^{Cle} &= \frac{USL - LSL}{X_{99,865\%} - X_{0,135\%}} \\ C_{pk}^{Cle} &= \min \left\{ \frac{X_{50\%} - LSL}{X_{50\%} - X_{0,135\%}}; \frac{USL - X_{50\%}}{X_{99,865\%} - X_{50\%}} \right\} \end{aligned} \quad (6.4)$$

where $X_{p\%}$ is the p^{th} percentile of the distribution.

The motivation behind these indices is that it can, as for the Gaussian Cpk , be interpreted in terms of the ratio of lengths (one-dimensional volumes). Moreover, it provides the advantage of being defined even when the distribution is not Gaussian.

Another generalization proposed by Castagliola (Castagliola, 1996) is

$$Cpk^{Ca} = \frac{1}{3} \Phi^{-1}(\min\{\mathbb{P}(X \leq USL), \mathbb{P}(X \geq LSL)\}) \quad (6.5)$$

where Φ^{-1} is the inverse of the cumulative distribution function of the standard Gaussian distribution. This PCI is, this time, defined as a function of the conformity rate.

For the rest of the paper, unless if mentioned, it was considered that a characteristic X_i conforms to the specification if $LSL_j \leq X_j \leq USL_j$. The case where there is only one limit is included by considering $LSL_j = -\infty$ if there is no lower specification limit, and $USL_j = \infty$ if there is no upper specification limit. In those cases, the Cp is not defined.

In case there are multiple characteristics, one uses the generic number d for the number of characteristics. For example, in the case of the MMC, the conditions given in the system of equations 6.2, the part has $d = 2$ characteristics (W and M).

mPCIs Based on the Ratio of Volumes

Many mPCIs are based on the idea of generalizing the ratio of lengths (thus, in some sense, the approach of (Clements, 1989)) to the multivariate case. It consists in comparing a measure of allowable process spread against a measure of the actual process spread (González and Sánchez, 2009). Here, for purposes of brevity, one illustrates the case where the multivariate process is bi-limits, but generalizations exist to uni-limit (see for example (A. K. Chakraborty and M. Chatterjee, 2021)). When the data $\mathbf{X}$ follow a Gaussian distribution $N(\mu, \Sigma)$, Taam et al. (Taam et al., 1993) defined an mPCI generalizing the univariate Cp . The specification region is modeled as the largest hyperellipsoid center at the target (the center of the hyperrectangle specification), and that belongs to the specification limits. The process region is defined as

$$(\mathbf{X} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{X} - \mu) \leq c \quad (6.6)$$

where c is such that $\mathbb{P}((\mathbf{X} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{X} - \mu) \leq c) = 1 - \alpha$, where $1 - \alpha$ corresponds to the target conformity rate. Another approach proposed by Shahriari et al. (Shahriari et al., 1995) is to keep the actual specification region as a hyperrectangle and to compute the smallest hyperrectangle such as the $100(1 - \alpha)\%$ process region belongs to the interval.

mPCIs Based on PCA

The family of methods based on principal component analysis (PCA) was introduced by Wang and Chen (F. K. Wang and J. C. Chen, 1998). The idea is that for a Gaussian distribution, data can be projected onto independent vectors called principal components. Then, as the projected vectors are independent, the problem reduces to estimating uPCIs and then aggregating them. For example, they consider the geometric mean,

$$Cpk_1^{PCA} = \left(\prod_{i=1}^d Cpk^{PCA,i} \right)^{1/d} \quad (6.7)$$

where $Cpk^{PCA,i}$ are the uPCIs of the projected components with the initial specification region.

However, as noticed by (Shinde and Khadse, 2009), when transforming the data, the specification limits should also be transformed. This complicates the estimation of uPCIs, as a data-dependent transformation modifies the specification region. The new region is no longer a hyperrectangle, unless the initial variables are independent, and the calculations become more complex.

Moreover, the transformed data may not explain the same amount of variance of the initial data. Tano and Vännman (Tano and Vännman, 2013) argue that only the component that most explains variability is needed. However, more than only one component can be used. In such cases, Wang (González and Sánchez, 2009) proposed to use a weighted geometric mean of the above computed Cpk , such that

$$Cpk_2^{PCA} = \left(\prod_{i=1}^d (Cpk_1^{PCA,i})^{\lambda_i} \right)^{\frac{1}{\sum_{i=1}^d \lambda_i}} \quad (6.8)$$

where the coefficient λ_i is the eigenvalue associated with the principal component i and represents the amount of explained variability of the component.

When the distribution of the data is not Gaussian, the principal components may not be independent. So, (González and Sánchez, 2009) proposed to use ICA (independent component analysis) instead. Indeed, ICA is a kind of generalization of PCA for non-Gaussian data.

mPCIs Based on Non-Conformity Rate

Other authors have proposed indices based on the probability of conformity (or equivalently the probability of non-conformity). One can expect some of them to be in some sense a generalization of the Cpk in equation 6.5. Wierda (Wierda, 1994) considers a yield-based approach

$$Cpk^{yield} = -\frac{1}{3} \Phi^{-1}(p) \quad (6.9)$$

where p is the probability of a part having a defect.

A different approach is given by (H. Chen, 1994). This time the specification region is assumed to be of the form $S = \{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d \mid h(\mathbf{X} - \mathbf{T}) \leq r_S\}$, where r_S is some positive number, $\mathbf{T}$ the target, and h some function specifying the specification region. Then for some target risk α , it defines r_α so that $\mathbb{P}(h(\mathbf{X} - \mathbf{T}) \leq r_\alpha) = 1 - \alpha$. (H. Chen, 1994) then uses as mPCIs

$$Cpk^r = \frac{r_S}{r_\alpha} . \quad (6.10)$$

So clearly $Cpk^r \geq 1$ if the probability that the production lies in the specification region is greater than $1 - \alpha$.

Estimation of the CDF

One of the problems of the mPCIs based on non-conformity rate, is the estimation of the distribution of the data. When such mPCIs are used, many authors assume that the data come from the Gaussian distribution. However, this is not sufficient for all distributions. This is why general estimation is needed. To tackle this, (Polansky, 2001) proposes to use non-parametric estimates. In particular, he considers kernel density estimators. For a sample $(X_k^{(i)})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq d}$, the density estimator at point $\mathbf{x}$ is defined as

$$\mathbb{P}(\mathbf{X} \leq \mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{k=1}^d \int_{-\infty}^{x_k} \frac{1}{h_k} K\left(\frac{y - X_k^{(i)}}{h_k}\right) dy \quad (6.11)$$

where K is a function such that $\int K(y)dy = 1$ and $|\int y^2 K(y)dy| < \infty$, and the h_d are the bandwidth parameters, for which Polansky gives some way to estimate. The author justifies its choice of estimation by highlighting that the empirical distribution function leads to poor results, unless the number of observations is very high.

Nevertheless, such methods are known to suffer from the curse of dimensionality. It implies that if the number of characteristics to consider is quite high (even $d=10$), the precision of estimation can be very small. For example, using this approach to approximate Gaussian distribution, according to Scott (Scott, 2015), to obtain the same estimation precision when the number of measured part $n = 100$, with $d = 2$ characteristics, it requires beyond one million of measured parts when $d = 10$. In particular, when looking at a Fan blade characteristic measured at 20 sections, the estimation precision for the conformity rate for $n = 1000$ is approximately of 0.32, while the error when estimating the conformity rate of the characteristic at 1 section is approximately of 0.004. This phenomenon is also illustrated in simulations (c.f. tables 6.1 or 6.2), where the variability of the nonparametric estimator is almost 10 times larger than the other considered.

6.1.4 Proposed Methods

Foreword

The industrial problem motivates the use of mPCI to monitor and prioritize complex manufacturing processes. To correspond to this requirement, it must be precisely calculable even for non-Gaussian distribution and in high dimensions. Moreover, it should have an easy interpretation. Among the reviewed estimators of mPCIs, no one answers all these points. Indeed, mPCIs, based on the ratio of volumes, are specific to the Gaussian case. MPCIs based on ICA also require non-Gaussian estimation. Hence, as for the estimation method proposed by Polansky (Polansky, 2001), for mPCIs based on non-conformity rate, it suffers from the curse of dimensionality.

Nevertheless, mPCIs based on non-conformity rates have a natural interpretation. As transformations of compliance rates, they can be compared. This property is not clearly satisfied by mPCIs based on the ratio of volumes. This makes mPCIs based on non-conformity rates interesting to provide a criterion of comparison between production processes.

If one considers those kinds of estimates, the challenge is to find an estimation of the conformity rate. This estimation step must be able to cover a wide range of distributions and not be too sensitive to the dimensionality curse problem. That is why using Vine Copula is of interest. Indeed, even if theoretically Vine Copula may not approximate all Copulas, in practice, this approach shows good performance even when it is theoretically unexpected (Hobæk Haff, Aas, and Frigessi, 2010).

On the Choice of a mPCI

The choice of a mPCI is crucial, as it allows monitoring or prioritizing. As explained, one focuses on mPCIs based on non-conformity rate. Contrary to the yield based Cpk , the mPCI proposed by (H. Chen, 1994) cannot be used to compare two different processes. However, the default of the yield based Cpk is that if $d = 1$, it does not coincide with the definition of Cpk from (Castagliola, 1996) (c.f. Equation 6.5).

This Cpk can be viewed as the transformation of the maximum over all possible configurations that leads

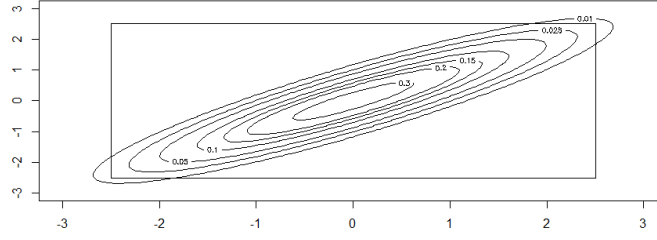


Figure 6.3 – Level lines of a bivariate Gaussian distribution with correlation of 0.9 centered with tolerance limits at $(-2.5, 2.5)$

to a non-conformity. Thus, in dimension $d = 2$, a similar mPCI would be

$$Cpk^{all} = -\frac{1}{3}\Phi^{-1}(p_{all}) \quad (6.12)$$

where p_{all} is defined in dimension 2, such that

$$p_{all} = \max\{p_2, p_3\} \quad (6.13)$$

with

$$p_2 = \max\{\mathbb{P}(X_1 \geq USL_1, X_2 \geq USL_2), \\ \mathbb{P}(X_1 \geq USL_1, X_2 \leq LSL_2), \\ \mathbb{P}(X_1 \leq LSL_1, X_2 \geq USL_2), \\ \mathbb{P}(X_1 \leq LSL_1, X_2 \leq LSL_2)\} \quad (6.14)$$

and

$$p_3 = \max\{\mathbb{P}(X_1 \leq LSL_1, LSL_2 \leq X_2 \leq USL_2), \\ \mathbb{P}(X_1 \geq USL_1, LSL_2 \leq X_2 \leq USL_2), \\ \mathbb{P}(LSL_1 \leq X_1 \leq USL_1, X_2 \leq LSL_2), \\ \mathbb{P}(LSL_1 \leq X_1 \leq USL_1, X_2 \geq USL_2)\} \quad (6.15)$$

This definition can easily be generalized in dimension d .

While the index in equation 6.12 may be the most informative because it looks at all possible kinds of non-conformity, it may be intractable. Indeed, for quite high dimension d , there are too many terms to calculate it. Hence, this mPCI cannot be used in practice unless it takes hours.

To tackle this issue, one considers the following mPCI :

$$Cpk = -\frac{1}{3}\Phi^{-1}(\max\{1 - P_u, 1 - P_l\}) \quad (6.16)$$

where $P_u = \mathbb{P}(X_1 \leq USL_1, \dots, X_d \leq USL_d)$ and $P_l = \mathbb{P}(X_1 \geq LSL_1, \dots, X_d \geq LSL_d)$. P_u , respectively P_l , is the conformity rate regarding the upper specifications limits, respectively the lower specification limits, of the d characteristics of the part. This reads as the maximum between the probability that at least one characteristic is lower than its lower limit and the probability that at least one characteristic is greater than its upper limit. Consequently, this mPCI is easier to compute, as it requires only two terms independent of the dimension.

In addition, if features are positively correlated, it's very likely that if one feature is close to the upper tolerance limit, the others will be too. And the same applies if one replaces the upper limit by the lower one. Therefore, in that sense, the mPCI in equation 6.16 can be considered an approximation of the one in equation 6.12. This phenomenon is illustrated for two characteristics in figure 6.3, with a two-dimensional Gaussian distribution with correlation of 0.9. one can see that the most probable configurations, represented by the level lines, imply that when one of the characteristics is close to one of the limits, the other characteristic is also close to the same limit.

For this reason, in this paper, one advocates for the use of the mPCI defined in equation 6.16. Nevertheless, our estimation method can be used to compute any probability based mPCI.

Why Copula?

The difficulty in estimating an mPCI based on a probability is estimating this probability. In the case where the limits of each characteristic are an interval, the conformity rate can be rewritten in terms of Copula. Informally, a Copula (Sklar, 1959) represents the dependency structure between the data. If one considers a random vector $(X_1, \dots, X_d)^T$, such that the distribution of each X_i is F_i , then the Copula is the cumulative

distribution function (CDF) of the random vector $(F_1(X_1), \dots, F_d(X_d))^T$. In particular, the CDF of the random vector $X_1, \dots, X_d$ can be written as

$$\mathbb{P}(X_1 \leq x_1, \dots, X_d \leq x_d) = C(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) \quad (6.17)$$

If the data have continuous margins $F_1, \dots, F_d$, the copula C is unique. In addition, when the random vectors have a density f , C also admits a density c such that

$$f(x_1, \dots, x_d) = c(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) \prod_{i=1}^d f_i(x_i) \quad (6.18)$$

with f_i the density of the variable X_i . This result called Sklar's theorem allows distinguishing between the estimation of the margins $F_1, \dots, F_d$ and the dependency structure modeled by the Copula C . Thus, looking at the conformity rate, one can write

$$\begin{aligned} P_u &= \mathbb{P}(X_1 \leq USL_1, \dots, X_d \leq USL_d) \\ &= \mathbb{P}(F_1(X_1) \leq F_1(USL_1), \dots, F_d(X_d) \leq F_d(USL_d)) \\ &= C(F_1(USL_1), \dots, F_d(USL_d)) \end{aligned} \quad (6.19)$$

and

$$\begin{aligned} P_l &= \mathbb{P}(X_1 \geq LSL_1, \dots, X_d \geq LSL_d) \\ &= \mathbb{P}(1 - F_1(X_1) \leq 1 - F_1(LSL_1), \dots, \\ &\quad 1 - F_d(X_d) \leq 1 - F_d(LSL_d)) \\ &= \overline{C}(F_1(LSL_1), \dots, F_d(LSL_d)) \end{aligned} \quad (6.20)$$

where the functions C and $\overline{C}$ are two Copulas. Therefore, Copulas naturally arrive when looking at conformity rate. The Copula $\overline{C}$ is called survival Copula and can be computed from C .

Note also, that $F_i(USL_i)$ is the upper conformity rate of X_i and $1 - F_i(LSL_i)$ is the lower conformity rate of X_i . Thus, there are two things to estimate: the univariate conformity rates and the Copula C (it implies the estimation of $\overline{C}$). The decomposition of the margins and the dependency structure has the advantage that it can preserve the estimate of univariate capabilities, unlike indices based on the PCA (c.f. section 6.1.3).

Vine Copula

As for the case of univariate distributions for the uPCIs, there are many families of Copulas (Joe, 2014). Here one proposes to use Vine Copulas with simplifying assumption (Bedford and Cooke, 2002). For the following, unless if mentioned, one will use the term Vine Copula for a Vine Copula with simplifying assumption. The idea behind Vine Copulas is that if the Copula of the data has a density, this density can be decomposed into the product of easier densities. For example, in dimension three, one is using Bayes and Sklar's theorems

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2, x_3) &= f_1(x_1) \cdot f_{2|1}(x_2|x_1) \cdot f_{3|1,2}(x_3|x_1, x_2) \\ &= f_1(x_1) \cdot f_2(x_2) \cdot f_3(x_3) \cdot \\ &\quad c_{12}(F_1(x_1), F_2(x_2)) \cdot c_{23}(F_2(x_2), F_3(x_3)) \cdot \\ &\quad c_{13|2}(F_{1|2}(x_1|x_2), F_{3|2}(x_3|x_2)) \end{aligned} \quad (6.21)$$

where $F_{i|j}(x_i|x_j) = C_{i|j}(F_i(x_i)|F_j(x_j))$ is the conditional distribution of characteristic i given characteristic j , $i, j \in \{1, 2, 3\}$. So in particular, using $u_i = F_i(x_i)$, leads to the decomposition of the Copula density as product of bivariate Copulas

$$\begin{aligned} c(u_1, u_2, u_3) &= c_{12}(u_1, u_2) \cdot c_{23}(u_2, u_3) \cdot \\ &\quad c_{13|2}(C_{1|2}(u_1|u_2), C_{3|2}(u_3|u_2)). \end{aligned} \quad (6.22)$$

Another example of decomposition, when $d = 5$, is given in equation 6.23.

$$\begin{aligned} c(u_1, u_2, u_3, u_4, u_5) &= c_{1,2}(u_1, u_2) \cdot c_{1,3}(u_1, u_3) \cdot c_{1,4}(u_1, u_4) \cdot \\ &\quad c_{1,5}(u_1, u_5) \cdot c_{2,3;1}(u_2, u_3; u_1) \cdot \\ &\quad c_{2,4;1}(u_2, u_4; u_1) \cdot c_{2,5;1}(u_2, u_5; u_1) \cdot \\ &\quad c_{3,4;1,2}(u_3, u_4; u_1, u_2) \cdot c_{3,5;1,2}(u_3, u_5; u_1, u_2) \cdot \\ &\quad c_{4,5;1,2,3}(u_4, u_5; u_1, u_2, u_3) \end{aligned} \quad (6.23)$$

where the c represents a copula and for any $a, c \in \{1, \dots, 5\}$, $E \subset \{\emptyset\} \cup \{1, \dots, 5\} \setminus \{a, b\}$ the

$$u_{c;a,E} = \frac{\partial c_{a,c;E}(u_{a;E}, u_{c;E})}{\partial u_{a;E}} = h_{a;c \cup E}(u_{a;E}; u_{c;E}) \quad (6.24)$$

are called conditional observations. Moreover, the sets $\{a, b\} \cup E$ are called constraint sets. They are said to be constraint sets at level K if $|\{a, b\} \cup E| = K$. The functions $h_{a;c \cup E}$ are called h -functions.

This decomposition in products holds for any dimension d and is, in general, not unique. However, this decomposition takes place according to a particular structure called Vine. Quickly, a Vine is a finite sequence of trees such that the edges of the tree t becomes a node in the tree $t + 1$ and that the proximity condition is fulfilled. The proximity condition states that if two edges in a tree t are joined by an edge in tree $t+1$ they must share a common node. One refers to (Bedford and Cooke, 2002) for details on the Vine structure and the appendix for a reminder of graph theory. Examples of Vine structures for $d = 5$ are given in figure 6.4. The label of the edges corresponds to the constraint sets, i.e., the bivariate Copulas involved in the decomposition.

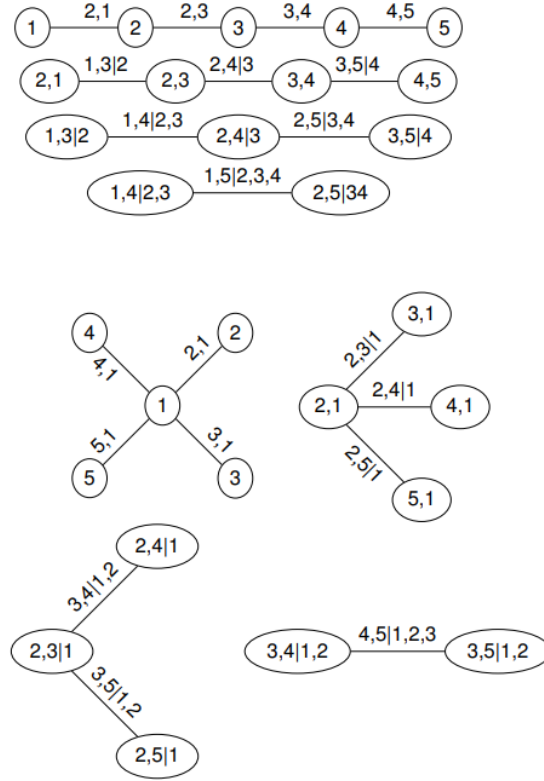


Figure 6.4 – Examples of two different Vine structures in dimension 5

The choice of the Vine Copula model is motivated by the fact that, when the dimension is high, the precision of the estimation of nonparametric methods is low. Thus, parametric (or at least semiparametric) models are needed. The most used parametric Copula models are the Gaussian Copula and Archimedean Copula. Nevertheless, they are often not sufficient to model accurately the distribution of any real dataset. Vine Copulas, which were designed as a generalization of the Gaussian Copula, offer more flexibility (Bedford and Cooke, 2002). Indeed, they allow taking any bivariate Copula in the product. And doing so, the estimation precision of the model is proportional to the worst bivariate Copula estimation precision. Thus, the estimation does not suffer from the curse of dimensionality. The simplifying assumption is an important assumption that is verified only by certain Copulas, including the Gaussian Copula (Stöber et al., 2013). However, (Hobæk Haff, Aas, and Frigessi, 2010) argue that when this hypothesis is not verified, the estimate can still be precise.

Estimation of the mPCI

One now describes our approach to estimating the mPCI. Assuming a sample $(X_j^{(i)})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq d}$ of n observations of d characteristics, one presents the estimation method of the mPCI.

Firstly, the univariate conformity rates must be estimated. Equivalently, this implies estimating the marginal CDF of the data. To do so, many methods can be used. See for example Croquelois et al. (Croquelois et al., 2022) for a comparison of estimators.

Secondly, to estimate a Copula, observations of it must be used. As they are, in general, not available, the estimation is done on what is called pseudo-observations. It consists of estimating the univariate distributions $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_d$ and then computing $(\hat{U}_j^{(i)})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq d} = (\hat{F}_j(X_j^{(i)}))_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq d}$, the pseudo-observations. Now one can estimate the Vine Copula.

Here, one considers the use of the Dißmann algorithm (Dißmann et al., 2013), which is the most used algorithm to estimate a Vine Copula. The idea is to learn sequentially the model, i.e., building the first tree of the Vine, and then estimating the Copulas of the first tree. Then, one does the same for the second tree and so on. Note that when estimating the Copulas, one can use nonparametric estimates of the bivariate Copulas. However, this requires many data to have acceptable estimation precision.

A thing about Vine Copula is that in general, its CDF is intractable. Therefore, one cannot compute directly the mPCI. However, it is possible to simulate from a Vine Copula. Therefore, one proposes to estimate the mPCI using a Monte Carlo method.

Algorithm 8 Estimation of the proposed mPCI

Input: a sample $(X_j^{(i)})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq d}$

- 1: Estimate for all $1 \leq j \leq d$ the univariate CDF $\hat{F}_j$.
- 2: Compute pseudo-observations $\hat{U}_j^{(i)} = \hat{F}_j(X_j^{(i)})$.
- 3: Use Dißmann algorithm to estimate the Vine Copula using pseudo-observations.
- 4: From the estimate Vine copula, compute $\hat{P}_u$ and $\hat{P}_l$ the Monte Carlo estimators of P_u and P_l .

Output: $\hat{Cpk} = \frac{1}{3}\Phi^{-1}(\min\{\hat{P}_u, \hat{P}_l\})$ the estimated mPCI.

Now one gives a result on the precision of estimation of the mPCI.

One shows that, if the estimation of a Vine Copula is asymptotically consistent, then the estimation by Monte Carlo, of a C_1 function of the data is itself asymptotically consistent. This approach is often the only one possible as integration is not possible in high dimensional setting and the CDF is not defined in a closed form. This approach, summarized in Algorithm 8, uses the inverse of h -functions. Occasionally, those functions are not defined in a closed form. In such cases, they are approximated by bisection search. This possibility is considered in the proof of our theorem.

One means consistent in the sense where, by construction, one can write that if $P \sim U(0, 1)$, then $U = F^{-1}(P) \sim F$, and so one speaks of asymptotic consistency if $\hat{U} = \hat{F}^{-1}(P) \rightarrow U$.

Theorem 6.1. *If there exists an asymptotically consistent estimator based on a Vine Copula of F , then a Monte Carlo estimator of F based on the estimated Vine Copula is also asymptotically consistent.*

The proof is given in Appendix 6.1.12.

Upper Bound for the Proposed mPCI

Sometimes, for an industrial solution, one needs to estimate quickly the mPCI. However, with high dimensional Vine Copulas, this could take hours. So, to reduce this time, one proposes in this section a lower bound of the value of our mPCI, which is faster to compute. Note that this is equivalent to finding an upper bound of the non-conformity rate.

The specification region is defined as a hyperrectangle. Thus, the upper conformity rate and the lower conformity rate are the intersection of events. Hence, it is the complement of a union of events:

$$1 - P_u = \mathbb{P}(\cup_{i=1}^d \{X_i > USL_i\}), \quad 1 - P_l = \mathbb{P}(\cup_{i=1}^d \{X_i < LSL_i\}) \quad . \quad (6.25)$$

In the following, one denotes E_i for $\{X_i > USL_i\}$ or $\{X_i < LSL_i\}$.

The idea is to look at upper bounds of those quantities that need fewer calculations than with the entire Vine Copula.

The most known among them is the Bonferroni inequality:

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^d E_i) \leq \sum_i \mathbb{P}(E_i) \quad . \quad (6.26)$$

Clearly, as it requires only knowledge of the margins, it is even independent of the Vine Copula. However, this is often not a tight bound.

Another one has been proposed by Hunter (Hunter, 1976),

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^d E_i) \leq \sum_{i=1}^d \mathbb{P}(E_i) - \sum_{(i,j) \in T} \mathbb{P}(E_i \cap E_j) \quad (6.27)$$

where T can be any tree. Therefore, one can take the tree that corresponds to the first tree of the Vine Copula. Thus, knowing the Copulas on this tree is enough to compute this bound.

This result can be generalized to any dimension $1 \leq K \leq d$ which gives tighter bounds. To do so, one considers the following results.

Theorem 6.2 ((Dohmen, 2002)). *Let G be a chordal graph with nodes $V = \{1, \dots, d\}$. Denotes $C(G)$ the set of cliques of G , then for all $r \in \mathbb{N}^*$,*

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^d E_i) \leq \sum_{I \in C(G), |I| \leq 2r-1} (-1)^{|I|-1} \mathbb{P}(\cap_{i \in I} E_i) \quad (6.28)$$

while the writing of the theorem may look strange, it implies Bonferroni, Hunter and thanks to the Inclusion Exclusion principle, there is equality when G is the complete graph.

Moreover, chordal graphs can be related to Vine Copula using the following result (see for example Hobæk Haff et al. (Hobæk Haff, Aas, Frigessi, and Lacal, 2016)). One calls K -truncated Vine Copula, a Vine Copula from which all bivariate Copulas in trees $K+1$ to $d-1$ correspond to independence Copula. For example, if one considers the density of the 1-truncated version of the Vine Copula in equation (6.22), as the density of the independence Copula is 1, it simplifies into

$$c(u_1, u_2, u_3) = c_{1,2}(u_1, u_2) \cdot c_{2,3}(u_2, u_3) \quad . \quad (6.29)$$

Theorem 6.3 ((Hobæk Haff, Aas, Frigessi, and Lacal, 2016)). *A K -truncated Vine Copula on d variables defines a chordal graph, whose cliques are the constraints set of the Vine at level $K+1$.*

By combining the two above results, one obtains the following result.

Theorem 6.4 (Vine adapted upper bound on conformity rate). *For any Vine, let $K \in \{1, \dots, d-1\}$ putting G_K the associated chordal graph of the K truncation of the Vine, one has*

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^d E_i) \leq \sum_{I \in C(G_K), |I| \leq T} (-1)^{|I|-1} \mathbb{P}(\cap_{i \in I} E_i) \quad (6.30)$$

where T is an odd number.

Moreover, to compute the probabilities in the sum, it is sufficient to know the T -truncated Vine and not the entire Vine.

The proof is given in Appendix 6.1.12.

If one considers the Monte Carlo estimator the conformity-rate, our theorem implies that one can have an upper bound that requires simulating from less complicated models, i.e., one needs only to estimate T -truncated Vine instead of the entire Vine. The only difficulty is to handle the sum, which is easy if T is not too big. The optimal choice of T , outside computation time, may rely on the data. This complicates the choice in the general case, and one discusses its influence on the approximation in the section 6.1.5.

For a fixed number T , one can compare the algorithmic complexity to compute the upper bound and the one in the full procedure. The estimation of the truncated vine model at level T is for a fixed Vine structure of the same order in general. Thus, one compares the complexities of the simulation and the number of computations in the upper bound. The simulation of a truncated vine at level T following algorithm 10 is approximately of $dT - T^2/2 - d + T/2$. If $T = d$, this reduces to $d(d-1)/2$. In the upper bound, as the chordal graph as $d-t+1$ cliques of size t , thus there are $Td - T(T-1)/2$ additional calculations. Thus, one has to compare $d(d-1)/2$ with $2dT - T^2 + T - d$. Rearranging the terms, one wants to know the values of T such that $d(d+1)/2 > 2T(d+1/2 - T/2)$. One can see that the simple condition $T < d/2$ makes the relation true. This confirms the potential interest of using a lower bound to reduce the computation time.

In practice, this difference can be erased if the two procedures are not implemented with the same level of optimization. This is the case of our simulation, where the implementation of our upper bound is much less optimized than the one in the full procedure.

6.1.5 Simulations and Industrial Example

Numerical Evaluation

In this section, one illustrates by the mean of simulations the ability of our estimator to predict the Cpk with precision.

In this study, to consider sample sizes (denoted by n) that are coherent with stable industrial processes in the aircraft engine field, one considers $n \in \{100, 1000\}$ as it may be difficult to gather more data in practical applications. Moreover, one considers examples where the number of characteristics d is such that $d \in \{5, 15\}$.

Table 6.1 – Comparison of the Cpk estimation bias (standard deviation) for different methods and models, where $n=100$ and $d=5$ (in lines the model used for estimation and in columns the true model)

	Gauss	Gumbel	Clayton	Vine
Gaussian	1.6E-3 (1E-2)	2.3E-2 (1E-2)	7.5E-2 (1E-2)	1.3E-2 (1E-2)
Gumbel	-2.5E-2 (1E-2)	1.2E-3 (1E-2)	5.0E-2 (1E-2)	7.5E-3 (1E-2)
Clayton	-7.0E-2 (1E-2)	- 4.6E-2 (1E-2)	5.0E-4 (1E-2)	-3.0E-2 (1E-2)
Gaussvine	6.5E-4 (1E-2)	2.4E-2 (1E-2)	5.8E-2 (1E-2)	1.0E-3 (1E-2)
Itauvine	-1.5E-3 (1E-2)	1.5E-2 (1E-2)	1.9E-3 (1E-2)	1.5E-3 (1E-2)
Np	1.4E-2 (2E-1)	6.6E-2 (2E-1)	-3.0E-2 (1E-1)	4.1E-2 (2E-1)

From the curse of dimensionality, one may expect the problem to be more difficult for large d . Choosing $d = 15$ covers a broad range of practical cases and makes it possible to do the simulation in a reasonable amount of time. The sample sizes of datasets in aircraft manufacturing may be extremely diverse. Our choice of sample sizes in the simulation is made to represent this diversity.

To analyze the ability of Vine Copula models to fit correctly the data, one compared the following Copula models for the data:

- Gaussian Copula,
- Gumbel Copula,
- Clayton Copula,
- Vine copula with only bivariate Gaussian copula, denoted Gaussvine in the following,
- Vine Copula with bivariate copulas belonging to Gaussian, Joe, Student, Gumbel or Clayton families denoted Itauvine in the following,
- nonparametric kernel density estimator for Copula (Geenens et al., 2017), denoted Np in the following.

One could have used nonparametric Copulas in the Vine. However, this requires too much data for the estimate to be accurate. One will therefore not consider this approach.

While the Gaussian Copula corresponds to the Gaussian distribution, which is well known to represent some industrial manufacturing data, the Gumbel and Clayton Copulas are more often known in reliability analysis (Q. Yang et al., 2017). Nevertheless, they appear when modeling dependencies between positions on the part, such as intermediate casing. Furthermore, when fitting Vine Copula on the whole intermediate casing leads to models with the same structures as the Itauvines considered here.

Since the transformation applied to the data to calculate the pseudo-observations is the same regardless of the Copula model, the difference between the estimate for the different models depends solely on the Copula. One has therefore evaluated only the Copula estimate.

As reference models, one considered the following cases:

- a Gaussian Copula with Kendall τ of 0.8,
- a Gumbel Copula with Kendall τ of 0.8,
- a Clayton Copula with Kendall τ of 0.8,
- a Vine Copula whom structure, bivariate Copulas and parameters are given in Appendix.

For each case, one selected the specification limits such that the true mPCI value is approximately of 1. Exact values of the specification limits are given in Appendix 6.1.13.

As the true values of the Cpk are not known, they were computed using Monte Carlo simulations with $2e6$ replications, while the estimators were computed on $1e5$ replications. Proceeding this way, it implies that the approximation error of the Monte Carlo simulations is negligible compared with the estimation error. One generated 300 samples for each case, and one computed the bias (estimated mean minus the true value) and the standard deviation of the estimators.

In the case of Gaussian copula, Gumbel copula and Clayton Copula, one used the function `fitCopula` of the R-package "Copula" (Jun Yan, 2007). For the simplified parametric Vine Copula, one chose to use the R package "rvinecopulib" (Nagler and Vatter, 2023). The detail of the parameterization is given in Appendix.

In the case $n=100$ and $d=5$ (Table 6.1), one could see that in all cases, the nonparametric estimator worked poorly compared with the others. So one did not consider it in the following discussion. When the true Copula was the Gaussian Copula, one had that the Gaussian, the Gaussian Vine and the Itauvine performed similarly with good performances (in the sense that the median is close to the target). This was clearly expected as the Gaussian Vine is just a different parameterization of the Gaussian Copula and Gaussian Vines are part of the Itauvine possibilities. However, Clayton and Gumbel models are clearly away from it. Under the Gumbel Copula, the better model was the Gumbel one, and no other model was also perfectly centered around the

Table 6.2 – Comparison of the Cpk estimation bias (standard deviation) for different methods and models, where $n=100$ and $d=15$ (in lines the model used for estimation and in columns the true model)

	Gauss	Gumbel	Clayton	Vine
Gaussian	-1.2E-3 (1E-2)	4.2E-2 (1E-2)	1.3E-1 (1E-2)	2.1E-2 (1E-2)
Gumbel	-5.0E-2 (1E-2)	4.4E-3 (1E-2)	9.3E-2 (1E-2)	-1.3E-2 (1E-2)
Clayton	-1.4E-2 (1E-1)	-8.8E-3 (1E-2)	2.6E-4 (1E-2)	-3.4E-2 (1E-2)
Gaussvine	-1.1E-2 (1E-2)	3.6E-2 (1E-2)	1.1E-1 (1E-2)	1.8E-2 (1E-2)
Itauvine	-1.7E-2 (1E-2)	2.7E-2 (1E-2)	5.0E-3 (1E-3)	5.0E-3 (1E-2)
Np	1.4E-2 (2E-1)	1.0E-2 (2E-1)	-7.6E-2 (1E-1)	2.7E-2 (1E-1)

Table 6.3 – Comparison of the Cpk estimation bias (standard deviation) for different methods and models, where $n=1000$ and $d=5$ (in lines the model used for estimation and in columns the true model)

	Gauss	Gumbel	Clayton	Vine
Gaussian	8.3E-4 (1E-2)	2.7E-2 (1E-2)	7.2E-2 (1E-2)	1.1E-2 (1E-2)
Gumbel	-2.5E-2 (1E-2)	-4.5E-4 (1E-2)	4.8E-2 (1E-2)	6.8E-3 (1E-2)
Clayton	-7.2E-2 (1E-2)	-4.7E-2 (1E-2)	6.2E-4 (1E-2)	-3.0E-2 (1E-2)
Gaussvine	3.3E-4 (1E-2)	2.3E-2 (1E-2)	5.6E-2 (1E-2)	1.0E-2 (1E-2)
Itauvine	-1.7E-3 (1E-2)	1.9E-2 (1E-2)	8.7E-4 (1E-2)	1.3E-4 (1E-2)
Np	-2.7E-2 (1E-1)	2.3E-2 (1E-1)	-2.6E-2 (6E-2)	2.9E-2 (1E-1)

target. Nevertheless, one could see that the second-best model was the Itauvine, which was not too far from the target. For the Clayton model, the Clayton copula was a good estimator, as well as the Itauvine model. This was not as surprising, as the Clayton Copula satisfies the simplifying assumption. Other estimators were quite far from the target. Finally, for simplified Vine Copula, all models except for the Clayton one were rather close to the target. And the model that best fitted was the Itauvine. It was expected as it was generated according to it.

In the case where the number of observations remained at 100, but the number of dimensions increased to 15 (Table 6.2), one saw that the kernel estimator was even worst while the performances of the other methods remained quite the same.

In the case $n=1000$, $d=5$ (Table 6.3), the nonparametric estimator performed a slightly better, but it was still the worst estimator among those considered. Moreover, all the considerations of the previous case remained true. The only difference was that the bias of the nonparametric estimator that was lower in the case of Vine and Gumbel but increased a bit in the case of the Gaussian model. While in the Clayton cases, it increased significantly. Therefore, the nonparametric estimator seemed not stable, even if the number of observations increased.

Because of the curse of dimensionality, an important case was to look at how the estimator performs with fixed n but with increasing dimension d . One could see both for $n = 100$ and $n = 1000$ that increasing the dimension d from 5 to 15 did not produce a large decrease in estimation precision (Table 6.4).

Time Saving Using the New Bound

In this section, one compared our lower bound with the full procedure as well as the Bonferroni and Hunter's bounds (c.f. equations 6.26 and 6.27). To do so, one considered different dimensions d and different sizes of truncation T for the approximation (here 3 and 5). One generated 300 vines with Gaussian Copulas whose parameters are drawn at random. One considered two quantities. The first one was the time spent by the methods to estimate the mPCI (see Table 6.5). Obviously, as the dimension grew, the time spent was also growing. Moreover, as expected, one could see that in low dimension, the full vine model estimation was almost of the same order. On the contrary, as the number of truncations of the Vine was increasing, the computation time also increased so that the approximation might not be interesting. Note that our implementation of the approximation, unlike the one from the full Vine Copula model, had not been much optimized. In particular, no parallel computing was done. Thus, providing a more complex code would probably have made our method much faster. In practice, the choice T could be driven by the time constraints to compute the mPCI. The more time allowed, the larger T could be. From our simulation, one observed that $T = 5$ performed quite well in the cases considered here, and one believes it remains true in a broader class of applications.

In addition, another quantity of interest is the difference between the approximation and the full estimated value. From the definition of the approximation, the estimator should be greater than the approximation. The results are summed up in table 6.6.

Table 6.4 – Comparison of the Cpk estimation bias (standard deviation) for different methods and models, where $n=1000$ and $d=15$ (in lines the model used for estimation and in columns the true model)

	Gauss	Gumbel	Clayton	Vine
Gaussian	-1.0E-2 (1E-2)	4.2E-2 (1E-2)	1.3E-2 (1E-1)	1.9E-2 (1E-2)
Gumbel	-5.1E-2 (1E-2)	2.0E-3 (1E-2)	9.2E-2 (1E-2)	-1.4E-2 (1E-2)
Clayton	-1.4E-1 (1E-2)	- 8.9E-2 (1E-2)	4.8E-4 (1E-4)	-3.3E-2 (1E-2)
Gaussvine	-1.1E-2 (1E-2)	3.7E-2 (1E-2)	1.0E-2 (1E-2)	1.6E-2 (1E-2)
Itauvine	-1.1E-2 (1E-2)	4.5E-2 (1E-2)	4.5E-3 (1E-4)	5.7E-3 (1E-2)
Np	-3.2E-2 (2E-1)	7.8E-2 (2E-1)	-3.6E-2 (6E-2)	4.8E-2 (1E-1)

Table 6.5 – Comparison of mean computation times (second) between the full procedure and lower bound approximations of estimated Cpk

	d = 10	d = 20	d=30	d=40	d=50
Full	9	41	99	181	270
Approx ($T = 5$)	5	41	97	155	209
Approx ($T = 3$)	3	13	27	41	55
Hunter	6	12	18	25	30
Bonferroni	1	2	4	5	6

The case Bonferroni corresponds approximately to the independence assumption. One could see that this led to poor estimation results. On the contrary, the approximation one proposes, provided better results of approximations, and was always a lower bound of the capability.

Industrial Example: Comparison of the Production of Fan blades Between Two Factories

Fan blades are produced at two different factories. Here one proposes to use the method to compare the capability of the production of the two factories. During engine assembly, Fan blades from both factories are mixed with each other. This is why, in order not to have too significant differences on the engines depending on the origin of the Fan blades, it is important that the production of the two factories is similar.

For both factories, a sample of the measurement of $n = 1000$ and $d = 314$ characteristics was gathered. The two samples were built to ensure that all the parts in the same factory were produced using the same manufacturing process.

To simplify the analysis and for privacy reasons, one considered only pseudo-observations of the data, and one sets the limits (bi-lateral) of each characteristic centered at 0.5. This implied that their univariate capability defined by Castagliola (Castagliola, 1996) is equal to 1.33. This transformation makes sense, as one observed in the data that marginal distributions of the characteristics were close between the two factories.

First, one looked at which model was the most suited for the data. For both, one observed the same conclusions, which were the following. From the Spearman correlation matrix of the data, one could see that the values range from -0.4 to 0.9 (excluding the diagonal). Thus, models such as the Clayton and Gumbel copulas were not appropriate. Indeed, those models require the data to have equal correlation between all pairs of variables. When one performed a statistical test on the data, this hypothesis was clearly rejected.

Thus, it remained to choose between the Gaussian, the Gaussian Vine and the Itauvine. The first two models required that the data have Gaussian Copulas for each pair of variables. Testing it led to several rejections so that this hypothesis could not be validated. Thus, the only model remaining was the Itauvine.

To check the validity of this model, two tests were conducted. The first one is a test proposed by (Kurz and Spanhel, 2022) to assess the validity of the simplifying assumption. One ran this test from levels 2 to 6 of the vine and no hypothesis was rejected. One stopped after level 6 because it requires a lot of time on our high-dimensional data and, because of the Dißmann algorithm, rejection was more likely to append in the first trees.

Another existing approach to test the validity of the estimated model was given by (Genest, Rémillard, et al., 2009). It consists in applying a Cramér-von Mises test to the data after the probability integral transform has been applied. This is one of the most powerful goodness of fit tests according to Schepsmeier (Schepsmeier, 2015). Running this test led to a p-value of 1 (estimate by Bootstrap). Thus, the estimated model could not be rejected.

As one had confirmed the validity of our estimator, one performed an estimation of the capability for the two factories. One proceeds using 1 million of Monte Carlo simulations for each model. One also used our proposed

Table 6.6 – Comparison of mean estimated Cpk between the full procedure and lower bound approximations

	d = 10	d = 20	d=30	d=40	d=50
Full	0.91	0.90	0.89	0.89	0.88
Approx ($T = 5$)	0.89	0.85	0.81	0.79	0.75
Approx ($T = 3$)	0.87	0.79	0.76	0.72	0.69
Hunter	0.82	0.75	0.70	0.66	0.63
Bonferroni	0.73	0.64	0.58	0.54	0.50

Table 6.7 – Result of the estimation for both factories using the full model and the approximation

Factories	Estimated Cpk	Approximated Cpk
Factory 1	0.83	0.78
Factory 2	0.83	0.78

approximation at level $T = 5$. The results are in table 6.7. In table 6.8, One highlights the computation time for each method.

From these simulations, one could see that the process in the study had very similar behavior across the two factories. Even if the estimated Cpk seemed bad, as it was lower than 1. For a part with this number of characteristics, it was not. Indeed, all characteristics had a univariate Cpk of 1.33, and thus the univariate processes were capable. In addition, when dealing with such numerous characteristics, it is usual to have more complex specification region. However, one did not consider it here.

In addition, one could see that our approximation gave a result that was not too far from the target value, while the saving time of the approximation was almost of 3 hours, which represented approximately a gain of 30% in time. Therefore, setting $T = 5$ seemed to be an adapted value in practice. Notice that this gain could increase further by providing a most optimize code integrating parallelized calculations. Those optimizations were done when using the full model, but not the approximation. Because of computation time, it was not possible to construct Bootstrap confidence intervals, which are often used to take decisions based on statistics. However, as the estimated values were the same, it was reasonable to consider that the two productions perform similarly. Hence, it was reasonable to consider that the origin of the Fan blades does not impact the engine assembly. If this were not the case, it would have been necessary to adjust the assembly procedure to take into account these differences.

6.1.6 Conclusion

In this article, one reviews some existing mPCIs and discusses of their strengths and their limits regarding some classical situations in GD&T. Indeed, the specifications of a part can be high dimensional, and their probability distribution is, in general, not Gaussian.

To solve this issue, one proposes to use a mPCI based on the conformity rate. To estimate it, one considers the use of Vine Copula, as those models allow modeling a wide variety of dependency models. The main drawback of this approach is that it is time-consuming. To tackle this issue, one provides a lower bound on the mPCIs, which is significantly less time-consuming.

The proposed approach was compared to some others on simulations, done under different models. This comparison shows this approach is often the most precise, without being restricted to the multivariate Gaussian distribution. Finally, one applies it on a real dataset to compare the production of Fan blades in two factories and demonstrate that the production of the two factories have equivalent capabilities. This result justifies not considering the origin of the parts during the Fan blades assembly procedure on engines. This demonstrates the interest of the method compared to others in the literature, which cannot deal either with non-Gaussian data or high dimensional ones. Its main drawback is that, because of its computational time and its complexity, confidence intervals cannot be easily built in massive example. Further work is necessary to provide solutions.

6.1.7 Definitions from Graph Theory

In this section, one recalls necessary graph theory elements for understanding the paper.

Definition 6.1 (Graph). A graph is a tuple (V, E) such that $V \neq \emptyset$ is a finite set and $E \subset \{(i, j) \mid i \in N, j \in N\}$.

Definition 6.2 (Undirected graph). A graph is said to be undirected if $(i, j) \in E \iff (j, i) \in E$.

Here one only considers undirected graphs.

Table 6.8 – Computation times for the estimation of both factories using the full model and the approximation

Factories	Estimation time	Approximation time
Factory 1	8h 50mins	5h 39mins
Factory 2	8h 36mins	5h 38mins

Definition 6.3 (Subgraph). A subgraph of a graph $G = (V, E)$ is a graph $S = (S_V, S_E)$ such that $S_V \in V$ and $S_E \subset \{(i, j) \in E \mid i \in S_V, j \in S_V\}$.

Definition 6.4 (Path). In a graph $G = (V, E)$, a path is a sequence of distinct nodes $e_1, e_2, \dots, e_k \in V^k$ such that $(e_i, e_{i+1}) \in E$.

Definition 6.5 (Cycle). A cycle is a path such that $e_1 = e_k$.

Definition 6.6 (Acyclic graph). A graph G is said to be acyclic if there is no cycle in it.

Definition 6.7 (Complete graph). A graph g is said to be complete if $E = V \times V$.

Definition 6.8 (Connected graph). A graph is said to be connected if, for any pair of nodes e_1, e_2 , there is a path from e_1 to e_2 .

Definition 6.9 (Clique). A clique of G is a subgraph S of G such that S is a complete graph.

Definition 6.10 (Tree). A tree is a graph that is connected and acyclic.

Definition 6.11 (Chordal graph). A graph G is said to be chordal if all cycles of four or more nodes have an edge that is not part of the cycle but connects two nodes of the cycle.

6.1.8 Simulation from a Vine Copula

Before giving the proof of the theorem, one recalls the simulation algorithm used for Vine Copula (Algorithm 10).

This algorithm requires the Vine Copula to be in a matrix form. It is a compact form to represent the Vine structure. As an example, one considers the Vine copula defined in equation 6.23.

The matrix representation consists in encoding the constraint sets in a matrix. For example, the decomposition in equation 6.23 gives

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

That kind of matrix should be read in the following way. First, select an element (for example 4), then choose any line above and select the element in the same column as the selected element for (example the third line, so element 3). Then the associated constraint set consists of the two elements and all the above elements (here 2 and 1, giving set $\{3, 4\} \cup \{1, 2\}$). So for this matrix, the constraints sets are $\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{1, 5\}, \{2, 3, 1\}, \{2, 4, 1\}, \{2, 5, 1\}, \{3, 4, 2, 1\}, \{3, 5, 2, 1\}$ and $\{1, 2, 3, 4, 5\}$.

6.1.9 Proofs of Theorems

Proof of Theorem 6.1 on the Consistency of the Estimator

One denotes: $a_n = O(b_n)$ if there is a positive constant M such that $|a_n| \leq M|b_n|$ for n large enough.

One already knows that the estimates of the h functions and of the pseudo-observations are at a $O(n^{-r})$ from their true value. Thus, applying h functions to pseudo-observations even estimated will still lead to an estimator at $O(n^{-r})$ of the true value. Hence, one has to show applying estimated h functions does not decrease the rate $O(n^{-r})$. Then by recursion, the whole resulting vector $\mathbf{U}$ will be at $O(n^{-r})$. Finally, one has to look for the approximation error of the Monte Carlo estimator.

So let $(P_j^{(i)})_{1 \leq i \leq b, 1 \leq j \leq d} \stackrel{iid}{\sim} \text{Unif}(0, 1)$.

This algorithm is based on the use of the inverse of conditional functions h . In general, they are not known and they are computed via an optimization method. In this work, one considers the use of the Bisection Method. That is $\hat{\alpha} = \hat{h}^{-1}(x|y)$ is an approximation of the 0 of the function $a \mapsto \hat{h}(a|y) - x$.

In this setting, one applies the Bisection method to an approximation of the h function.

Algorithm 9 Simulation according to a Vine Copula ((Joe, 2014))**Input:** $\mathbf{A}$, a Vine under matrix form

```

1:  $\mathbf{M} = (m_{kj})$  where  $m_{kj} = \max\{a_{1j}, \dots, a_{kj}\}$ , for  $k = 1, \dots, j-1$ ,  $j = 2, \dots, d$  and 0 otherwise.
2: Put  $I = \{0\}^{d \times d}$ 
3: for  $k = 2, \dots, d-1$  do
4:   for  $j = k+1, \dots, d$  do
5:     if  $a_{kj} < m_{kj}$  then
6:        $I_{k-1, m_{kj}} = 1$ 
7:     end if
8:   end for
9: end for
10: Draw  $(p_1, \dots, p_d)$  from independent uniform distributions.
11: Put  $(q_{ij}), (v_{ij}), (z_{ij})$ , three matrices of size  $d \times d$ , (only their upper part will be used).
12:  $u_1 = p_1$ ,  $u_2 = h_{2|1}^{-1}(p_2 | p_1)$ ,  $q_{22} = p_2$  and if  $I_{12} = 1$ ,  $v_{12} = C_{1|2}(u_1 | u_2)$ .
13: for  $j = 3, \dots, d$  do
14:    $q_{jj} = p_j$ 
15:   for  $l = j-1, \dots, 2$  do
16:     if  $a_{lj} = m_{lj}$  then
17:        $s = q_{l, a_{lj}}$ 
18:     else
19:        $s = v_{l-1, m_{lj}}$ 
20:     end if
21:      $z_{lj} = s$ 
22:      $q_{lj} = h_{j|a_{lj}; a_{1j}, \dots, a_{l-1, j}}^{-1}(q_{l+1, j} | s)$ 
23:   end for
24:    $u_j = q_{1j} = h_{j|a_{1j}}^{-1}(q_{2j} | u_{a_{1j}})$ 
25:    $v_{1j} = h_{a_{1j}|j}(u_{a_{1j}} | u_j)$ 
26:   for  $l = 2, \dots, j-1$  do
27:     if  $I_{lj} = 1$  then
28:        $v_{lj} = h_{a_{lj}|j; a_{1j}, \dots, a_{l-1, j}}(z_{lj} | q_{lj})$ 
29:     end if
30:   end for
31: end for

```

Output: $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)$ that are drawn from the R-vine distribution

Here one simply notes $h(x)$ instead of $h(x | y)$.

Let α^* be the true value of $h^{-1}(x)$, $\hat{\alpha}^*$ the true value of $\hat{h}^{-1}(x)$ and $\hat{\alpha}$ the value obtained by the bisection method.

$$|\hat{\alpha} - \alpha^*| \leq |\hat{\alpha} - \hat{\alpha}^*| + |\hat{\alpha}^* - \alpha^*| \quad . \quad (6.32)$$

The right term is the one of interest, the left is equal to the precision of the Bisection method, which can be chosen as $O(n^{-r})$.

By definition of $\hat{\alpha}^*$ and $\hat{\alpha}$, one has $|x - \hat{h}(\hat{\alpha}^*)| = 0 = |x - h(\alpha^*)|$ and so $\hat{h}(\hat{\alpha}^*) = h(\alpha^*)$. But by hypothesis, $\hat{h}(\hat{\alpha}^*) = h(\hat{\alpha}^*) + O(n^{-r})$ and by the mean value theorem and the continuity of the conditional copula, $h(\hat{\alpha}^*) = h(\alpha^*) + C(\hat{\alpha}^* - \alpha^*)$. So $C(\hat{\alpha}^* - \alpha^*) = O(n^{-r})$.

So, using the Bisection method on $\hat{h}$ gives an approximated solution at $O(n^{-r})$.

Now, since one applies the method on $\hat{x} = x + O(n^{-r})$, one also has to look at its influence. From the preceding results, one has

$$\begin{aligned} \hat{h}^{-1}(x + O(n^{-r})) &= h^{-1}(x + O(n^{-r})) + O(n^{-r}) \\ &= h^{-1}(x) + O(n^{-r}) \end{aligned} \quad (6.33)$$

where the second inequality comes from the mean value theorem.

Applying it recursively gives the wanted result, i.e. $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + O(n^{-r})$.

Now one looks at the properties of the Monte Carlo estimator of the CDF at point $\mathbf{x}$ is given by

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{U}_i \leq p) \quad . \quad (6.34)$$

So the Monte Carlo estimator of the Copula at point $\mathbf{x}$, $\hat{C}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{\mathbf{U}}_i \leq \mathbf{x})$ can be expressed as

$$\begin{aligned}\hat{C}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\mathbf{U}_i + O(n^{-r}) \leq \mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{\mathbf{U}}_i \leq \mathbf{x} + O(n^{-r})) \\ &= C(\mathbf{x} + O(n^{-r})) + o(mc) \quad .\end{aligned}\tag{6.35}$$

Since C is C_3 by hypothesis, by the Mean Value theorem, there exists $\lambda \in (0, 1)^d$ such that,

$$\begin{aligned}\hat{C}(\mathbf{x}) &= C(\mathbf{x} + O(n^{-r})) + o(mc) \\ &= C(\mathbf{x}) + O(n^{-r})c(\lambda) + o(mc) \\ &= C(\mathbf{x}) + O(n^{-r}) \quad .\end{aligned}\tag{6.36}$$

Since $c(\lambda)$ is a finite value, using enough Monte Carlo simulations one has $o(mc) = O(n^{-r})$. This concludes the proof.

For simulating according to a Vine Copula, there are $d(d-1)/2$ uses of the inverse of a h function and $d(d-1)$ of a h function. So if each of those steps can be done approximately at precision n^{-r} , one may expect the global method to converge if $d = o(n^r)$ and not only when d is constant regarding n .

Moreover, in high dimensional settings, there are often some sparsity assumptions. So, assume that the estimated structure is the true one and that there are only k copulas in the model that are different from the identity. Then, the computation requires only k inversion of a h function and $2k$ uses of a h function. Then, one can hope that the procedure is efficient even in those cases.

The theorem rests true if instead of using the classical Monte Carlo estimator, one uses the Importance Sampling method.

Proof of Theorem 6.4 for the Lower Bound

Clearly, using results of theorems 6.2 and 6.3, it gives the inequality 6.30.

Thus, it remains to show that all the terms in the sum are well-defined if one knows only a T -Vine truncated. The probabilities that involve the more variables are the one corresponding to I , a constraint sets at level K . The other elements depend on variables that are subsets of those K , it suffices to show that a Vine Copula truncated at level K encodes the distribution of the constraint sets at level $K+1$.

To do so, one proceeds by recursion on K with fixed d . Clearly, if a Vine Copula is truncated at level 1, there are only the bivariate Copulas associated with constraint sets at level 2. Therefore, the result is true. Now assume that for any $K-1$ truncated Vine Copula, the Copulas associated with variables of constraint sets at the level K are correctly defined.

Then, by definition of the Vine structures, the constraint sets at level $K+1$ are a union of two constraint sets at level K . Denoting $\{a, \mathbf{E}\}$ and $\{b, \mathbf{E}\}$ those two constraint sets (they have this form from proximity condition). Then using Bayes theorem and conditional Sklar theorem (Patton, 2004), it gives

$$c_{a,b,\mathbf{E}} = c_{a,b|\mathbf{E}}(C_{a|\mathbf{E}}, C_{b|\mathbf{E}})c_{a|\mathbf{E}}c_{b|\mathbf{E}}c_{\mathbf{E}}\tag{6.37}$$

From the definition of the K -truncated Vine Copula, copula $c_{a,b|\mathbf{E}}$ is known. In addition, by recursion, $c_{\mathbf{E}}$, $c_{a,\mathbf{E}}$ and $c_{b,\mathbf{E}}$ are also known. And it implies that $C_{a|\mathbf{E}}$ and $C_{b|\mathbf{E}}$ are also known.

This proves the theorem by recursion.

6.1.10 Simulations Details

To generate the data used in tables 6.1 and 6.3, i.e. $d=5$, one uses the specification limits $[-3.5, 3.5]$ and data in tables 6.2 and 6.4, i.e., $d=15$, one uses $[-3.75, 3.75]$. This respectively corresponds to an individual Cpk with values of 1.17 and 1.25.

For the vine considered in the simulation, one chooses a vine with Gumbel Copulas and from which the matrix representation and the associated parameters are generated from the following R code.

```
# list for the vines of dimension 5 and 15
vine_model_list <- list()
set.seed(1)
for(d in c(5, 15)){
  # generated a random structure
  r_vine_str <- rvine_structure_sim(d = d)
```

Algorithm 10 Simulation according to a Vine Copula ((Joe, 2014))**Input:** $\mathbf{A}$, a Vine under matrix form

- 1: $\mathbf{M} = (m_{kj})$ where $m_{kj} = \max\{a_{1j}, \dots, a_{kj}\}$, for $k = 1, \dots, j-1$, $j = 2, \dots, d$ and 0 otherwise.
- 2: Put $I = \{0\}^{d \times d}$
- 3: **for** $k = 2, \dots, d-1$ **do**
- 4: **for** $j = k+1, \dots, d$ **do**
- 5: **if** $a_{kj} < m_{kj}$ **then**
- 6: $I_{k-1, m_{kj}} = 1$
- 7: **end if**
- 8: **end for**
- 9: **end for**
- 10: Draw $(p_1, \dots, p_d)$ from independent uniform distributions.
- 11: Put $(q_{ij}), (v_{ij}), (z_{ij})$, three matrices of size $d \times d$, (only their upper part will be used).
- 12: $u_1 = p_1$, $u_2 = h_{2|1}^{-1}(p_2 | p_1)$, $q_{22} = p_2$ and if $I_{12} = 1$, $v_{12} = C_{1|2}(u_1 | u_2)$.
- 13: **for** $j = 3, \dots, d$ **do**
- 14: $q_{jj} = p_j$
- 15: **for** $l = j-1, \dots, 2$ **do**
- 16: **if** $a_{lj} = m_{lj}$ **then**
- 17: $s = q_{l, a_{lj}}$
- 18: **else**
- 19: $s = v_{l-1, m_{lj}}$
- 20: **end if**
- 21: $z_{lj} = s$
- 22: $q_{lj} = h_{j|a_{1j}, \dots, a_{l-1, j}}^{-1}(q_{l+1, j} | s)$
- 23: **end for**
- 24: $u_j = q_{1j} = h_{j|a_{1j}}^{-1}(q_{2j} | u_{a_{1j}})$
- 25: $v_{1j} = h_{a_{1j}|j}(u_{a_{1j}} | u_j)$
- 26: **for** $l = 2, \dots, j-1$ **do**
- 27: **if** $I_{lj} = 1$ **then**
- 28: $v_{lj} = h_{a_{lj}|j; a_{1j}, \dots, a_{l-1, j}}(z_{lj} | q_{lj})$
- 29: **end if**
- 30: **end for**
- 31: **end for**

Output: $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)$ that are drawn from the R-vine distribution

```

set.seed(1)
cop_dist <- list()
for(i in 1:(d-1)){
  cop_dist[[i]] <- list()
  for(j in 1:(d-i)){
    # sample the paramters of the Gumbel copula
    cop_dist[[i]][[j]] <- bicop_dist(
      family = "gumbel",
      rotation = 0,
      parameters = kttau_to_par(family = cop_fam_ij,
        tau = runif(1, 0, 0.9)))
  }
}
# build the vine structure
vine_model_list[[d]] <- vinecop_dist(
  pair_copulas = cop_dist,
  structure = as_rvine_structure(r_vine_str))
}

```

6.1.11 Simulation from a Vine Copula

Before giving the proof of the theorem, we recall the simulation algorithm used for Vine Copula (Algorithm 10).

This algorithm requires the Vine Copula to be in a matrix form. It is a compact form to represent the Vine structure. As an example, we consider the Vine Copula defined in equation (6.23).

The matrix representation consists in encoding the constraint sets in a matrix. For example, the decompo-

sition in equation (6.23) gives

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.38)$$

That kind of matrix should be read in the following way. First, select an element (for example 4), then choose any line above and select the element in the same column as the selected element for (example the third line, so element 3). Then the associated constraint set consists of the two elements and all the above elements (here 2 and 1, giving set $\{3, 4\} \cup \{1, 2\}$). So for this matrix, the constraints sets are $\{1, 2\}$, $\{1, 3\}$, $\{1, 4\}$, $\{1, 5\}$, $\{2, 3, 1\}$, $\{2, 4, 1\}$, $\{2, 5, 1\}$, $\{3, 4, 2, 1\}$, $\{3, 5, 2, 1\}$ and $\{1, 2, 3, 4, 5\}$.

6.1.12 Proofs of Theorems

Proof of Theorem 6.1 on the Consistency of the Estimator

We denote: $a_n = O(b_n)$ if there is a positive constant M such that $|a_n| \leq M|b_n|$ for n large enough.

We already know that the estimates of the h functions and of the pseudo-observations are at a $O(n^{-r})$ from their true value. Thus, applying h functions to pseudo-observations even estimated will still lead to an estimator at $O(n^{-r})$ of the true value. Hence, we have to show applying estimated h functions does not decrease the rate $O(n^{-r})$. Then by recursion, the whole resulting vector $\mathbf{U}$ will be at $O(n^{-r})$. Finally, we have to look for the approximation error of the Monte Carlo estimator.

So let $(P_j^{(i)})_{1 \leq i \leq b, 1 \leq j \leq d} \stackrel{iid}{\sim} \text{Unif}(0, 1)$.

This algorithm is based on the use of the inverse of conditional functions h . In general, they are not known and they are computed via an optimization method. In this work, we consider the use of the Bisection Method. That is $\hat{\alpha} = \hat{h}^{-1}(x|y)$ is an approximation of the 0 of the function $a \mapsto \hat{h}(a|y) - x$.

In this setting, we apply the Bisection method to an approximation of the h function.

Here we simply note $h(x)$ instead of $h(x|y)$.

Let α^* be the true value of $h^{-1}(x)$, $\hat{\alpha}^*$ the true value of $\hat{h}^{-1}(x)$ and $\hat{\alpha}$ the value obtained by the bisection method.

$$|\hat{\alpha} - \alpha^*| \leq |\hat{\alpha} - \hat{\alpha}^*| + |\hat{\alpha}^* - \alpha^*| \quad (6.39)$$

The right term is the one of interest, the left is equal to the precision of the Bisection method, which can be chosen as $O(n^{-r})$.

by definition of $\hat{\alpha}^*$ and α^* , we have $|x - \hat{h}(\hat{\alpha}^*)| = 0 = |x - h(\alpha^*)|$ and so $\hat{h}(\hat{\alpha}^*) = h(\alpha^*)$. But by hypothesis, $\hat{h}(\hat{\alpha}^*) = h(\hat{\alpha}^*) + O(n^{-r})$ and by the mean value theorem and the continuity of the conditional copula, $h(\hat{\alpha}^*) = h(\alpha^*) + C(\hat{\alpha}^* - \alpha^*)$. So $C(\hat{\alpha}^* - \alpha^*) = O(n^{-r})$.

So, using the Bisection method on $\hat{h}$ gives an approximated solution at $O(n^{-r})$.

Now, since we apply the method on $\hat{x} = x + O(n^{-r})$, we also have to look at its influence. From the preceding results, we have

$$\begin{aligned} \hat{h}^{-1}(x + O(n^{-r})) &= h^{-1}(x + O(n^{-r})) + O(n^{-r}) \\ &= h^{-1}(x) + O(n^{-r}) \end{aligned} \quad (6.40)$$

where the second inequality comes from the mean value theorem.

Applying it recursively give the wanted result, i.e. $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + O(n^{-r})$.

Now we look at the properties of the Monte Carlo estimator of the CDF at point $\mathbf{x}$ is given by

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{U}_i \leq p) \quad (6.41)$$

So the Monte Carlo estimator of the Copula at point $\mathbf{x}$, $\hat{C}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{\mathbf{U}}_i \leq \mathbf{x})$ can be expressed as

$$\begin{aligned} \hat{C}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\mathbf{U}_i + O(n^{-r}) \leq \mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\hat{\mathbf{U}}_i \leq \mathbf{x} + O(n^{-r})) \\ &= C(\mathbf{x} + O(n^{-r})) + o(mc). \end{aligned} \quad (6.42)$$

Since C is C_3 by hypothesis, by the Mean Value theorem, there exists $\lambda \in (0, 1)^d$ such that,

$$\begin{aligned}\hat{C}(\mathbf{x}) &= C(\mathbf{x} + O(n^{-r})) + o(mc) \\ &= C(\mathbf{x}) + O(n^{-r})c(\lambda) + o(mc) \\ &= C(\mathbf{x}) + O(n^{-r})\end{aligned}\tag{6.43}$$

Since $c(\lambda)$ is a finite value, using enough Monte Carlo simulations we have $o(mc) = O(n^{-r})$. This concludes the proof.

For simulating according to a Vine Copula, there are $d(d-1)/2$ use of the inverse of a h function and $d(d-1)$ of a h function. So if each of those step can be done approximately at precision n^{-r} , we may expect the global method to converge if $d = o(n^r)$ and not only when d is constant regarding n .

Moreover, in high dimensional settings, there are often some sparsity assumptions. So, assume that the estimated structure is the true one and that there are only k copulas in the model that are different from the identity. Then, the computation requires only k inversion of a h function and $2k$ uses of a h function. Then, we can hope that the procedure is efficient even in those cases.

The theorem rests true if instead of using the classical Monte Carlo estimator, we use the Importance Sampling method.

Proof of Theorem 6.4 for the Lower Bound

Clearly, using results of theorems 6.2 and 6.3, it gives the inequality (6.30).

Thus, it remains to show that all the terms in the sum are well-defined if we know only a T -Vine truncated. The probabilities that involve the more variables are the one corresponding to I , a constraint sets at level K . The other elements depend on variables that are subsets of those K , it suffices to show that a Vine Copula truncated at level K encodes the distribution of the constraint sets at level $K+1$.

To do so, we proceed by recursion on K with fixed d . Clearly, if a Vine Copula is truncated at level 1, there are only the bivariate Copulas associated with constraint sets at level 2. Therefore, the result is true. Now assume that for any $K-1$ truncated Vine Copula, the Copulas associated with variables of constraint sets at the level K are correctly defined.

Then, by definition of the Vine structures, the constraint sets at level $K+1$ are a union of two constraint sets at level K . Denoting $\{a, \mathbf{E}\}$ and $\{b, \mathbf{E}\}$ those two constraint sets (they have this form from proximity condition). Then using Bayes theorem and conditional Sklar theorem (Patton, 2004), it gives

$$c_{a,b,\mathbf{E}} = c_{a,b|\mathbf{E}}(C_{a|\mathbf{E}}, C_{b|\mathbf{E}})c_{a|\mathbf{E}}c_{b|\mathbf{E}}c_{\mathbf{E}}\tag{6.44}$$

From the definition of the K -truncated Vine Copula, copula $c_{a,b|\mathbf{E}}$ is known. In addition, by recursion, $c_{\mathbf{E}}$, $c_{a,\mathbf{E}}$ and $c_{b,\mathbf{E}}$ are also known. And it implies that the $C_{a|\mathbf{E}}$ and $C_{b|\mathbf{E}}$ are also known.

This proves the theorem by recursion.

6.1.13 Simulations Details

To generate the data used in tables 6.1 and 6.3, i.e. $d=5$, we use the specification limits $[-3.5, 3.5]$ and data in tables 6.2 and 6.4, i.e., $d=15$, we use $[3.75, 3.75]$. This respectively corresponds to an individual Cpk with values of 1.17 and 1.25.

For the vine considered in the simulation, we choose a vine with Gumbel Copulas and from which the matrix representation and the associated parameters are generated from the following R code.

```
# list for the vines of dimension 5 and 15
vine_model_list <- list()
set.seed(1)
for(d in c(5, 15)){
  # generated a random structure
  r_vine_str <- rvine_structure_sim(d = d)
  set.seed(1)
  cop_dist <- list()
  for(i in 1:(d-1)){
    cop_dist[[i]] <- list()
    for(j in 1:(d-i)){
      # sample the paramters of the Gumbel copula
      cop_dist[[i]][[j]] <- bicop_dist(
        family = "gumbel",
        rotation = 0,
        parameters = ktau_to_par(family = cop_fam_ij,
```

```

    tau = runif(1, 0, 0.9)))
  }}
  # build the vine structure
  vine_model_list[[d]] <- vinecop_dist(
    pair_copulas = cop_dist,
    structure = as_rvine_structure(r_vine_str))
}

```

6.2 Estimation of Simplified Vine Copulas

In this chapter, we will discuss an alternative method to the Dißman algorithm (c.f. Algorithm 1) for estimating a Vine Copula model. We then demonstrate that our new approach, based on the Rosenblatt transformation, can be rewritten as a neural network learning problem.

6.2.1 Introduction

Estimating the distribution, especially its density, poses a significant challenge in high-dimensional spaces due to the curse of dimensionality. Recently, neural networks have shown promise in tackling this problem by leveraging their ability to learn the intrinsic dimension of the data (Kingma and Welling, 2019; Kohler and Langer, 2021). However, two main challenges arise in this context.

The first challenge is that the resulting distribution from the neural network is generally not a proper probability distribution. Indeed, even if the density is defined, it often fails to integrate exactly to one. The second challenge is the substantial data requirement, which is not always feasible, and the outcomes are often challenging to interpret. Despite these difficulties, neural networks have garnered considerable attention, leading to numerous works focusing on both theoretical aspects and the acceleration of computations with large datasets.

Another method employed in the literature to estimate probability distributions in high dimensions is the simplified Vine Copula. Vine Copulas represent a way to express any Copula density as a product of (conditional) bivariate Copula densities. The simplifying assumption involves assuming that all bivariate Copulas do not depend on conditional values. While this assumption holds for certain Copulas, such as the Gaussian Copula, it is not universally valid. Despite simplifying computations and reducing model complexity, this assumption has a significant drawback, as this class of models may not be dense in the space of Copulas, depending on the considered metric (Mroz et al., 2021).

A particularly relevant metric is the d_∞ norm, where simplified Copulas are dense in the space of Copulas (Mroz et al., 2021). However, estimating a simplified Vine Copula close to the true distribution can be challenging. The classical approach in the literature is the Dißmann algorithm (Dißmann et al., 2013), which involves sequentially estimating different bivariate Copulas. While this approach works well under the simplified assumption, it may lead to significant discrepancies if the assumption is not met, resulting in an estimated Vine Copula that deviates from the true distribution.

So, in some sense Vine Copula provides an interpretable structure for distribution estimation, while neural networks can offer good performances in estimation on high dimensional data. So it may seem interesting to use techniques built for neural networks to improve the estimation of Vine Copula. In particular, if we can build an approach that relies on gradient descent where the gradient can be easily computed, for example using automatic differentiation, we may expect some global properties instead of local ones.

As Vine Copula requires two elements : the Vine structure and the different bivariate Copula, they both must be estimated. From the definition of Vine Copula, any Vine structure can be used. But if combined with simplifying assumption and use of non-simplified data, the different structures may not be equivalent. However, here, we consider fixed Vine (we discuss a briefly about this in the perspectives). We motivate it by the fact that if we can optimize globally the model, all the Vine structures must lead to close results.

The idea of using automatic differentiation to estimate Vine Copula parameters is not new. (Dong et al., 2017) propose an R package that allows to estimate a D-Vine by maximum likelihood using gradient descent and automatic differentiation. However, because of the particular form of the likelihood, doing so is not really an easy task, and it cannot be used with good performances in high dimension. So here we propose a different approach.

As we can not really use the likelihood, we look for other criterion. Thus, we look at the goodness-of-fit (GOF) test literature for (Vine) Copula. According to the papers of (Genest, Quessy, et al., 2006) and (Schepsmeier, 2015), GOF tests that have the better performances are those based on the Rosenblatt transform also known as Probability Integral Transform (PIT). The idea behind those tests is to apply Rosenblatt transform of the estimated model to the data. If the data distribution is close to the estimated model, the transformed data will be approximately uniformly distributed and independent. Thus, any test can be used to measure the distance to uniformity. For example, according to those papers, a test that performs well is the Cramer-von Mises (CvM)

test. As for simplified Vine Copula, there are existing algorithms to compute the Rosenblatt Transform, we propose to use this as a criterion for estimation. In addition, we also consider other criteria, some for their simplicity, others for their particular properties.

Note that estimation using such kinds of approaches has already been considered (see for example (Weiß, 2011) and references therein). In their work, they argue that in a well specified model, the likelihood approach performs way better than this one. Nevertheless, they also exhibit some examples where those methods seem to perform better in misspecified settings. Here there are two main differences from their analysis. First, the true likelihood is not available in general (even if some thing can be said when the model satisfies the simplifying assumption (Nagler and Czado, 2016)). Moreover, in general as the simplifying assumption is not true, data are often misspecified thus motivates the interest in an analysis of those methods.

A particularity of the Rosenblatt transform is that it can, in fact, be rewritten as a neural network. In particular, we draw some parallels between our approach and the well-known Generative Adversarial Network (GAN) (Goodfellow, Pouget-Abadie, et al., 2014). So evaluation and computing the gradient of a Rosenblatt transform for simplified Vine Copula can be done efficiently even in high dimension. This also gives a framework to study the properties of the optimization.

(Mroz et al., 2021) demonstrate that the set of simplified Vine Copula is dense in the space of Copula for the infinite norm but not for the total variation distance. Therefore, in practice, the use of simplified Vine Copula may be restrictive for certain applications. Before going further, we show that this result is nevertheless sufficient to give meaningful indicators in Statistical Process Control (SPC) fields.

6.2.2 Vine and Neural Network Structure

In the remainder we use the notations of section 2.3.4 on Vine Copulas.

Matrical Representation of Vine Copula

Initially, Vine structures were defined as a sequence of trees (Bedford and Cooke, 2002). However, for algorithmic purposes, this may not be the more suitable representation. Therefore, (Morales Nápoles, 2010) proposes to represent them as a matrix. This matrix represents the constraint sets of the Vine structure.

To illustrate this method, let us consider the following example the matrix in equation (6.45).

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.45)$$

That kind of matrix should be read in the following way. First, select a diagonal element, for example 4, and choose any line under and select the element in the same column as the selected element, for example the third line, so element 3. Then the associated constraint set consists of the two elements and all the elements on the lines below the selected one, here, we have selected line 3, so this corresponds to lines 4 and 5, i.e. elements 2 and 1. This gives the set $\{3, 4\} \cup \{1, 2\}$. So for this matrix, the constraints sets are $\{1, 2\}$, $\{1, 3\}$, $\{1, 4\}$, $\{1, 5\}$, $\{2, 3, 1\}$, $\{2, 4, 1\}$, $\{2, 5, 1\}$, $\{3, 4, 2, 1\}$, $\{3, 5, 2, 1\}$ and $\{1, 2, 3, 4, 5\}$.

The matrix (6.45) corresponds to the Vine structure in Figure 6.5.

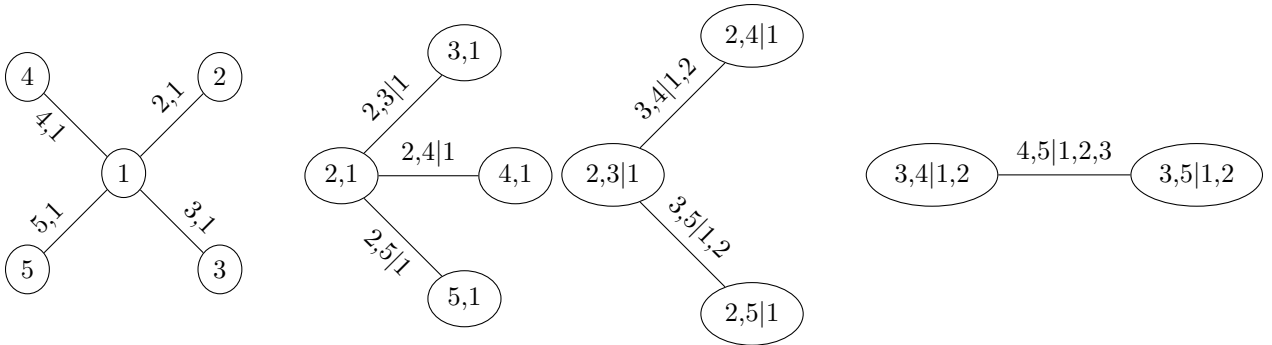


Figure 6.5 – Example of Vine structure in dimension 5.

Neural Network

Neural networks correspond to structures of neurons organized into layers, with connections between them (You et al., 2020). The structure of relations between the nodes is called architecture of the network.

The structure of the network can be represent by its **computational graph**, which is simply a directed graph whose nodes are the neurons of the network and the edges are the connections between the neurons.

With this representation, a neural network structure can (often) be identified to a **directed acyclic graph** (DAG), sometimes with additionnal assumptions such as that the graph is bipartite at the layer level.

Among the particular network architectures, there are for example

- multi-layer perceptron (MLP) which consists in layers of nodes where the nodes of a layer are connect to all other nodes of adjacent layers (c.f. Figure 6.6a),
- residual networks are neural networks in which some nodes are linked to another layer than an adjacent layer (c.f. Figure 6.6b), such connections are called skip connections,
- recurrent networks contain some nodes, for which the output of the node can influence its inputs (c.f. Figure 6.6c).

More details on neural network architectures, can be found in (Goodfellow, Bengio, et al., 2016).

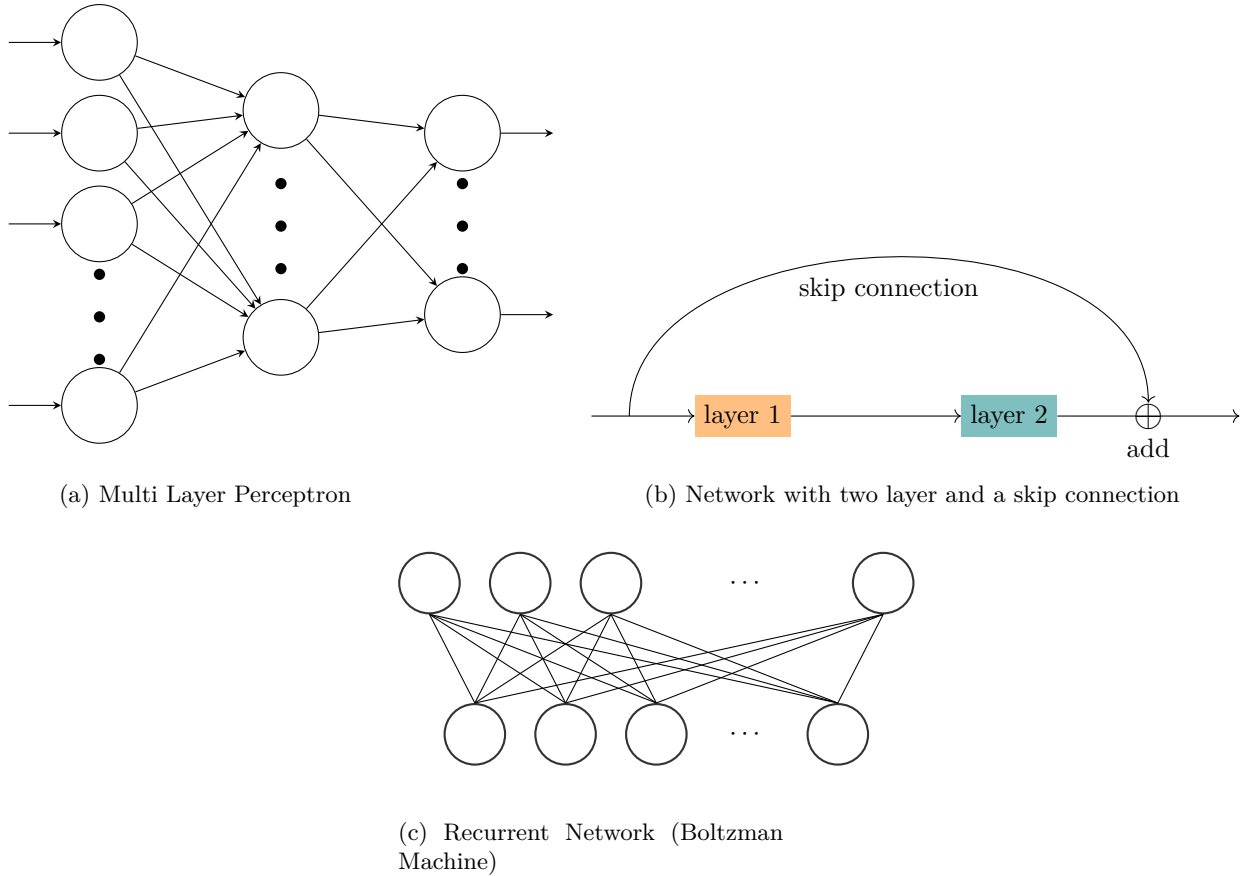


Figure 6.6 – Examples of Network Architectures.

6.2.3 Simplified Vine Copula and applications in SPC

Now that we have defined simplified Vine Copulas, we can recall more formally the result of (Mroz et al., 2021). It states that for any Copula C and any real $\epsilon > 0$, there exists a simplified Copula C^S such that

$$d_{\infty}(C, C^S) < \epsilon. \quad (6.46)$$

This result can be generalized to include the survival Copula.

Proposition 6.1. *For any Copula C , and any $\epsilon > 0$, there exists a simplified Copula C^S such that*

$$d_{\infty}(C, C^S) < \epsilon, \quad d_{\infty}(\bar{C}, \bar{C}^S) < \epsilon \quad (6.47)$$

where $\bar{C}$ represent the survival Copula of C .

Proof. The survival Copula $\bar{C}$ can be expressed as the weighted sum of K evaluations of C (Georges et al., 2001). Thus, $|\bar{C}(\mathbf{u}) - \bar{C}^S(\mathbf{u})| \leq K d_\infty(C, C^S)$. Then, taking C^S such that $d_\infty(C, C^S) < \frac{\epsilon}{K}$ leads to the result. $\square$

(Mroz et al., 2021) also demonstrate that, for other measure of distance such as the total variation, the space of simplified Vine Copulas is not dense in space of Copulas.

This may be problematic, for example when we want to do reliability analysis where the quantity of interest is of the form

$$\mathbb{P}(g(\mathbf{U}) \leq 0) \quad (6.48)$$

where $\mathbf{U}$ is a random variable and g is some function (Jiang et al., 2015).

Nevertheless, the result of denseness can be sufficient for several applications, as we demonstrate in the following.

Industrial Capability

In industry, an indicator to evaluate the ability of the production to produce in conformity with the specifications is called capability. In general, those specifications define a hyperrectangle, i.e., a multivariate industrial process $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ is conforming to its specifications if $\mathbf{L} \leq \mathbf{X} \leq \mathbf{U}$, where the vector $\mathbf{U}$ (respectively $\mathbf{L}$) represents the upper (respectively lower) specification limit. Several indicators of capability for those kinds of processes are considered in the literature. Here we consider the one defined in equation (6.16) of Section 6.1.4 defined as

$$\frac{1}{3} \Phi^{-1} \left(\min \{C(F_1(U_1), \dots, F_d(U_d)), \bar{C}(F_1(L_1), \dots, F_d(L_d))\} \right)$$

where F_i is the cumulative distribution of X_i , $1 \leq i \leq d$.

Thus, Proposition 6.1 makes the simplified family of particular interest for it.

However, the error is not relative thus for small and large probabilities, even if the estimation and the true one are quite different relatively to the other, the absolute difference will remain close to 0. Therefore, the relative error should be more representative of the difference between the estimation and its target. This leads us to the following proposition.

Proposition 6.2. *Let $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ be a d dimensionnal random vector with marginal distributions $F_1, \dots, F_d$ and Copula C . Let $\mathbf{L}, \mathbf{U} \in \mathbb{R}^d$. Denote $p_{inf}^i = \mathbb{P}(L_i \leq X_i)$ and $p_{sup}^i = \mathbb{P}(X_i \leq U_i)$. Assume that there exists $\lambda > 0$, such that*

$$\lambda \leq \min \{C(p_{sup}^1, \dots, p_{sup}^d), \bar{C}(p_{inf}^1, \dots, p_{inf}^d)\} \quad . \quad (6.49)$$

Then, for any $\epsilon > 0$, there exists a simplified Vine Copula C^S such that

$$\left| \frac{C^S(\mathbf{u})}{C(\mathbf{u})} - 1 \right| < \delta, \quad \left| \frac{\bar{C}^S(\mathbf{u})}{\bar{C}(\mathbf{u})} - 1 \right| < \epsilon \quad . \quad (6.50)$$

Proof. Let $\epsilon > 0$. Let C^S be a simplified Vine Copula such that $d_\infty(C, C^S) \leq \lambda \epsilon$ and $d_\infty(\bar{C}, \bar{C}^S) \leq \lambda \epsilon$. Such simplified Vine Copula exists as demonstrated in proposition 6.1. And from hypothesis, we have that $\lambda \leq C(\mathbf{u}) \leq 1$, with $\mathbf{u} = p_{sup}^1, \dots, p_{sup}^d$.

Then,

$$\left| \frac{C^S(\mathbf{u}) - C(\mathbf{u})}{C(\mathbf{u})} \right| \leq \left| \frac{C^S(\mathbf{u}) - C(\mathbf{u})}{\lambda} \right| \leq \frac{d_\infty(C, C^S)}{\lambda} \leq \epsilon \quad .$$

The case of $\bar{C}$ can be handle in the same way, which demonstrate the proposition. $\square$

In practice condition (6.49) may be difficult to verify as it depends on C which is both unknown and difficult to estimate. Therefore, we give a sufficient condition which relies only on the probabilities $\mathbf{p}_{inf}$ and $\mathbf{p}_{sup}$.

Corollary 6.4.1. *Let $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ be a d dimensionnal random vector with marginal distributions $F_1, \dots, F_d$ and Copula C . Let $\mathbf{L}, \mathbf{U} \in \mathbb{R}^d$. Denote $p_{inf}^i = \mathbb{P}(L_i \leq X_i)$ and $p_{sup}^i = \mathbb{P}(X_i \leq U_i)$. Assume that there exists $\lambda > 0$, such that*

$$\lambda \leq \min \left\{ \max \left\{ 0, 1 - d + \sum_{i=1}^d p_{sup}^i \right\}, \max \left\{ 0, 1 - d + \sum_{i=1}^d p_{inf}^i \right\} \right\} \leq 1 \quad . \quad (6.51)$$

Then, for any $\epsilon > 0$, there exists a simplified Vine Copula C^S such that

$$\left| \frac{C^S(\mathbf{u})}{C(\mathbf{u})} - 1 \right| < \delta, \quad \left| \frac{\overline{C}^S(\mathbf{u})}{\overline{C}(\mathbf{u})} - 1 \right| < \epsilon \quad . \quad (6.52)$$

Proof. The only difference with proposition 6.2 is the lower bound of $\min \{C(p_{\sup}^1, \dots, p_{\sup}^d), \overline{C}(p_{\inf}^1, \dots, p_{\inf}^d)\}$.

Using the Fréchet-Hoeffding bound for Copulas (c.f. Theorem 2.12), as the function $\mathbf{u} \mapsto \overline{C}(1 - \mathbf{u})$ defines a Copula, we have

$$\begin{aligned} \max \left\{ 0, 1 - d + \sum_{i=1}^d p_{\sup}^i \right\} &\leq C(p_{\sup}^1, \dots, p_{\sup}^d) \\ \max \left\{ 0, 1 - d + \sum_{i=1}^d p_{\inf}^i \right\} &\leq \overline{C}(p_{\inf}^1, \dots, p_{\inf}^d) \quad . \end{aligned}$$

Thus, combined with hypothesis (6.51), we have

$$\lambda < C(p_{\sup}^1, \dots, p_{\sup}^d) \quad \lambda < \overline{C}(p_{\inf}^1, \dots, p_{\inf}^d) \quad .$$

Applying the proposition 6.2 concludes the proof. $\square$

Remark 6.1. A sufficient condition for the condition (6.51) and so (6.49) to be satisfied is $\min\{p_{\inf}^i, p_{\sup}^i\} \geq 1 - \frac{1}{d}$. In industry, it is often required that $1 - \min\{p_{\inf}^i, p_{\sup}^i\} \geq 1 - \frac{1}{d} \geq 0.00135$. This is met for any vector of size $d \leq 740$, thus covering a vast majority of practical cases.

Multivariate Control Chart

Copulas have other interesting applications. One of them is to build multivariate control charts. Those methods aim at building some tolerance region such that an alarm is sent to the user when an observation is out of the tolerance region. This tolerance is often built so that the probability of false alarm (i.e. probability of obtaining a point outside the tolerance region while the distribution remains the same) is of level $1 - \alpha$.

To construct such method, (Verdier, 2013) proposes to use Copula. He defines the tolerance region as the set

$$D(c_\alpha) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d | C(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) \geq c_\alpha\} \quad (6.53)$$

with c_α is such that $\mathbb{P}(\mathbf{X} \in D(c_\alpha)) = 1 - \alpha$.

Proposition 6.3. For any $\alpha \in [0, 1]$, for any $\epsilon > 0$, assume that $X \sim C(F_1(\cdot), \dots, F_d(\cdot))$, where C is a Copula admitting continuous density, and $F_1, \dots, F_d$ are cumulative distributions admitting continuous density, there exists a simplified Copula C^S such that

$$1 - \alpha - \epsilon \leq \mathbb{P}(\mathbf{x} \in D^S(c_\alpha^S)) \leq 1 - \alpha + \epsilon \quad (6.54)$$

where $D^S(c) = \{\mathbf{x} | C^S(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) > c\}$ and c_α^S is such that $\mathbb{P}(\mathbf{x} \in D^S(c_\alpha^S)) = 1 - \alpha$.

Proof. By definition, for any $\epsilon > 0$, there exists $\delta > 0$, such that $c_{\alpha \pm \epsilon} = c_\alpha \pm \delta$. Assume that C^S is such that $\|C^S - C\|_\infty < \frac{\delta}{2}$. Then

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(C^S(\mathbf{X}) > c_\alpha^S) &= 1 - \alpha = \mathbb{P}(C(\mathbf{X}) > c_\alpha) \\ &= \mathbb{P}(C^S(\mathbf{X}) > c_\alpha + C^S(\mathbf{X}) - C(\mathbf{X})) \in \left[\mathbb{P}(C^S(\mathbf{X}) > c_\alpha + \frac{\delta}{2}), \mathbb{P}(C^S(\mathbf{X}) > c_\alpha - \frac{\delta}{2}) \right] \end{aligned} \quad (6.55)$$

Thus, $c_\alpha^S \in [c_\alpha - \frac{\delta}{2}, c_\alpha + \frac{\delta}{2}]$. In addition,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathbf{x} \in D^S(c_\alpha^S)) &\geq \mathbb{P}\left(\mathbf{x} \in D^S\left(c_\alpha + \frac{\delta}{2}\right)\right) \\ &= \mathbb{P}\left(\left\{\mathbf{x} | C(\mathbf{x}) + (C^S(\mathbf{x}) - C(\mathbf{x})) > c_\alpha + \frac{\delta}{2}\right\}\right) \\ &\geq \mathbb{P}\left(\left\{\mathbf{x} | C(\mathbf{x}) - \frac{\delta}{2} > c_\alpha + \frac{\delta}{2}\right\}\right) \\ &= \mathbb{P}(\{\mathbf{x} | C(\mathbf{x}) > c_\alpha + \delta\}) \\ &= \mathbb{P}(\{\mathbf{x} | C(\mathbf{x}) > c_{\alpha+\epsilon}\}) = 1 - \alpha - \epsilon \end{aligned} \quad (6.56)$$

The upper bound follows with the same arguments. $\square$

Algorithm 11 Rosenblatt Transform of a C-Vine (Aas et al., 2009)**Input:** A C-Vine specification, a vector $(u_1, \dots, u_d)^T$ **Output:** The transformed vector $(z_1, \dots, z_d) = \text{RosenblattTransform}(u_1, \dots, u_d)$.

```

1:  $z_1 = u_1$ .
2: for  $i = 2, \dots, d$  do
3:    $z_i = x_i$ 
4:   for  $k = 1, \dots, i - 1$  do
5:      $z_i = h_{i|i, D_{ij}}(z_i | z_j)$ 
6:   end for
7: end for
8: return  $(z_1, \dots, z_d)$ .

```

Thus, simplified Vine Copula can also be used to produce approximation of control charts.

6.2.4 Estimation of Simplified Vine Copula : Rewriting the Rosenblatt Transform as a Sparse Neural Network

Now that we have shown that simplified Vine Copula can provide meaningful approximation in some SPC problems, we look at their estimation. The result of (Mroz et al., 2021) explains that there exist simplified Vine Copula that can approximate the target distribution, but not how it can be estimated with precision in practice. Usual algorithms (Dißmann et al., 2013) sequentially estimate the Vine structure and the Copulas. However, in the case of non-simplified Copula, the classical sequential estimation can lead to bad estimators (Spanhel and Kurz, 2019). Alternative attempts to sequential estimation have been proposed (see e.g. (B. Chang et al., 2019; Y. Sun et al., 2019)), however, they often requires way larger computation times.

Thus, instead, we propose to consider learning Copula by measuring a distance between the data after a Rosenblatt transform and uniform distribution as in (Weiß, 2011). Our main is to take advantage of the particular structure of a Vine Copula Rosenblatt transform to write it as a neural network, thus having fast estimation procedures. To do so we consider a slightly different algorithm to compute the Rosenblatt transform than in (Schepsmeier, 2015) and demonstrate that the operations corresponds to the computational graph of a neural network.

The **Rosenblatt transform** (Rosenblatt, 1952) of a random vector $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)$ is a random vector $\mathbf{v}$ defined as

$$z_1 = F_1(u_1), z_2 = F_{2|1}(u_2 | u_1), \dots, F_{d|1, \dots, d-1}(u_d | u_1, \dots, u_{d-1}) \quad (6.57)$$

where F_1 is the cumulative distribution of u_1 and $F_{k|1, \dots, k-1}(u_k | u_1, \dots, u_{k-1})$ is the conditional distribution of $u_k | u_1, \dots, u_{k-1}$. The vector $\mathbf{z}$ then have an uniform distribution on $[0, 1]^d$. If the functions involved in the transform do not correspond to the conditional functions of the $\mathbf{u}$ law, then the transformed vector $\mathbf{z}$ is not uniformly distributed. Moreover, for classical Copula families the Rosenblatt transform has the same parameters as the Copula. Thus, estimating the Rosenblatt transform is equivalent to estimating the Copula. (Weiß, 2011) then proposes to estimate the Rosenblatt transform by minimizing the distance between the uniform distribution and the distribution of the transformed data. This is illustrated in figure 6.7.



Figure 6.7 – Structure of Copula learning through the Rosenblatt transform.

Even if in (Weiß, 2011), for classical parametric Copula, this approach seems not optimal, in the case of non-simplified Vine Copula, we expect things to be different. Indeed, in such cases, unlike the sequential approach, this problem should allow global optimization of the model parameters as long as the Rosenblatt transform, and the distance are easy to compute. In this section, we consider the formulation of the Rosenblatt transform. We discuss of some choices for the distance in the next section.

Recently, there has been a huge amount of work to develop fast implementation of neural networks, especially using automatic differentiation and backpropagation to efficient estimation for the parameters gradients (Hecht-nielsen, 1992; Baydin et al., 2018). Thus, being able to write the Rosenblatt transform using this formalism should allow fast and scalable estimation. To do so, we first recall the simulation algorithm given by (Aas et al., 2009) in case of C-Vine recalled in algorithm 11. A general version of this algorithm for any Vine structure is given in algorithm 13.

To illustrate how it works, consider the case of a C-Vine with $d = 4$. Then, if we plot the graph of the operation done to compute the Rosenblatt Transform, we obtain Figure 6.8.

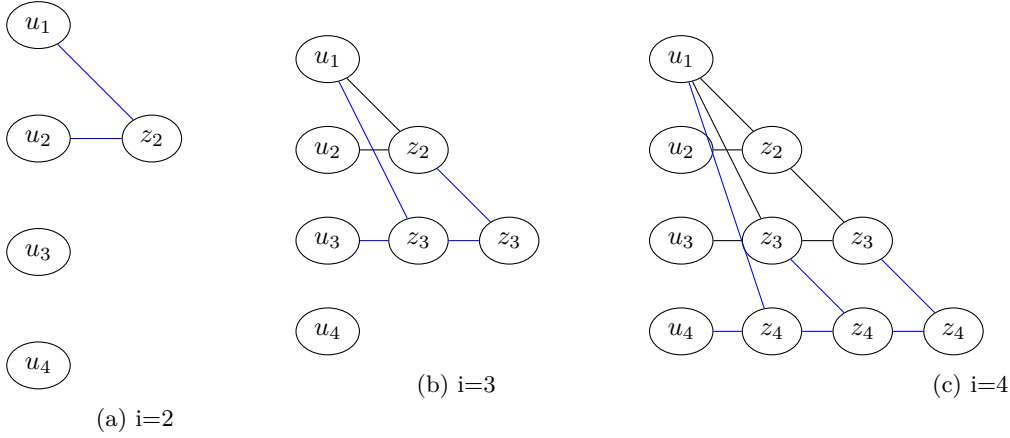


Figure 6.8 – Example of the Rosenblatt transform operations for a sample $u_1, \dots, u_4$ in case of a C-vine of dimension 4 after each iteration i of algorithm 11. Calculations done at step i are in blue.

From there, we recognize a graphical model, thus corresponding to a network. In fact, we can also build this transform in an alternative way, illustrated for $d = 4$ in figure 6.9. This corresponds simply to algorithm 13, where we change the order of the two for loops. From a statistical perspective, the two transforms have different interpretations. If we stop the algorithm after step i , in the first case (Figure 6.8), we obtain the Rosenblatt transform of the vector $u_1, \dots, u_i$, while in the second case (Figure 6.9), we obtain the Rosenblatt transform of the vector $u_1, \dots, u_d$ for initial C-Vine truncated at level i .

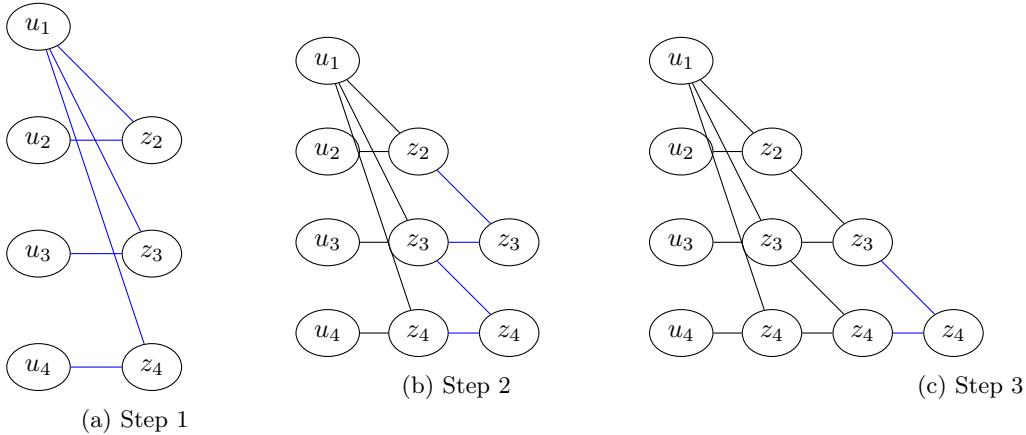


Figure 6.9 – Example of the Rosenblatt transform of a sample $u_1, \dots, u_4$ in case of a C-Vine in a different order than in algorithm 11. Calculations done at step i are in blue.

In general case, rewriting the Rosenblatt transform is not this easy. Indeed, it requires the introduction of additional variables (c.f. (Aas et al., 2009), algorithm 6 for the case of D-Vine and (Schepsmeier, 2015) for the general case recalled in algorithm 13). Nevertheless, we can still represent the method using a directed graph. Following the idea of looking at the Rosenblatt transform with modified loop order, we obtain the following result.

Theorem 6.5. *The Rosenblatt transform of an R-Vine truncated at level T can be computed by algorithm 12.*

Proof. We consider the case where $T = d - 1$. Other cases are demonstrated in the same way.

The Rosenblatt transform algorithm in case of general R-Vine is given in 13.

To rewrite the algorithm, we need to justify that we can do the transform layer by layer (i.e. in column) instead of per variable (in row). To do so, we start by inverting the two for loops in algorithm 13. This leads to consider $k = d, \dots, 2$ in line 6 and $i = k - 1, \dots, 1$ in line 7 of algorithm 13.

To demonstrate that this inversion is justified, we proceed by recursion. First, for $k = d, i = k - 1 = d - 1$, we have that $y_1 = v_{d,d-1}^{direct}$ which is well-defined. Moreover, $\tilde{m}_{d,d-1} = \max\{m_{d,d-1}\} = m_{d,d-1}$, thus $y_2 = v_{d,d-m_{d,d-1}+1}^{direct}$ which is also well-defined. Then $v_{d-1,d-1}^{direct}$ and $w_{d-1,d-1}$ are well-defined. Also, $z_2 = z_{d-i+1} = v_{k-1,i}^{direct} = v_{d-1,d-1}^{direct}$ is well-defined. Thus, the inversion can be done for this step. Now assume that up to k and

Algorithm 12 Rosenblatt transform of a T -truncated R-Vine**Input:** d -dimensional R-Vine specification (with structure $\mathbf{M}$ and h functions) and an observations $u_1, \dots, u_d$.The level T where the R-Vine should be truncated.**Output:** $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_d)$ the Rosenblatt transform of $u_1, \dots, u_d$ for the given R-Vine specification.

```

1: Initialize  $\mathbf{v}$  and  $\mathbf{w}$  two matrices of dimension  $d \times d$ .
2: Set  $(v_{d,1}, \dots, v_{d,2}, \dots, v_{d,d}) = (u_d, u_{d-1}, \dots, u_1)$ .
3: Let  $\tilde{\mathbf{M}} = (\tilde{m}_{k,i})_{1 \leq i \leq d, i \leq k \leq d}$  where  $\tilde{m}_{k,i} = \max_{k \leq j \leq d} m_{j,i}$ .
4: Set  $z_1 = u_1$ 
5: for  $k = 1, \dots, T$  do
6:   for  $i = k + 1, \dots, d$  do
7:      $y_1 = v_{d-k+1, d-i+1}$ 
8:     if  $\tilde{m}_{d-k, d-i+1} = m_{d-k, d-i+1}$  then
9:       Set  $y_2 = v_{d-k+1, (d-\tilde{m}_{d-k+1, d-i+1}+1)}$ 
10:    else
11:      Set  $y_2 = w_{d-k+1, (d-\tilde{m}_{d-k+1, d-i+1}+1)}$ 
12:    end if
13:    Set  $v_{d-k, d-i+1} = h_{k|i, D_{ik}}(y_1 | y_2)$ 
14:    Set  $w_{d-k, d-i+1} = h_{k|i, D_{ik}}(y_2 | y_1)$ 
15:    Set  $z_i = v_{d-k, d-k}$ 
16:  end for
17: end for
18: return  $\mathbf{z}$ 

```

Algorithm 13 Rosenblatt transform of a R-Vine (Schepsmeier, 2015)**Input:** d -dimensional R-Vine specification (with structure $\mathbf{M}$ and h functions) and an observations $u_1, \dots, u_d$.**Output:** $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_d)$ the Rosenblatt transform of $u_1, \dots, u_d$ for the given R-Vine specification.

```

1: Initialize  $\mathbf{v}$  and  $\mathbf{w}$  two matrices of dimension  $d \times d$ .
2: Set  $(v_{d,1}, \dots, v_{d,2}, \dots, v_{d,d}) = (u_d, u_{d-1}, \dots, u_1)$ .
3: Let  $\tilde{\mathbf{M}} = (\tilde{m}_{k,i})_{1 \leq i \leq d, i \leq k \leq d}$  where  $\tilde{m}_{k,i} = \max_{k \leq j \leq d} m_{j,i}$ .
4: Set  $z_1 = u_1$ 
5: for  $i = d - 1, \dots, 1$  do
6:   for  $k = d, \dots, i + 1$  do
7:      $y_1 = v_{k,i}$ 
8:     if  $\tilde{m}_{k,i} = m_{k,i}$  then
9:       Set  $y_2 = v_{k, (d-\tilde{m}_{k,i}+1)}$ 
10:    else
11:      Set  $y_2 = w_{k, (d-\tilde{m}_{k,i}+1)}$ 
12:    end if
13:    Set  $v_{k-1, i} = h_{k|i, D_{ik}}(y_1 | y_2)$ .
14:    Set  $w_{k-1, i} = h_{k|i, D_{ik}}(y_2 | y_1)$ .
15:    Set  $z_{d-k+1} = v_{i-1, k}$ 
16:  end for
17: end for
18: return  $(z_1, \dots, z_d)$  the transformed vector.

```

for i (included) all steps have been going well. We want to show that the next step will also be correct. There are two possibilities. In the first one only i changes and the next step correspond to $k, i - 1$. In the second, k change and it corresponds to $k - 1, k - 2$.

In the first case, $y_1 = v_{k-1, k-2} = v_{(k-1)-1, (k-1)-1}$. This has been defined in line 14 of the previous step. More generally, in the previous step, for all $k \geq i \geq 1$, $v_{k-1, i}^{direct}$ and $w_{k-1, i}$ have been defined. Thus, y_2 is also well-defined. This implies that the algorithm terminates without error.

In addition, we must verify that the z_{d-i+1} take the right values. In the original algorithm, we have in fact $z_{d-i+1} = v_{i, i}$ for all $d - 1 \geq i \geq 1$. When doing the inversion, we have that the value of z_k is equal to $v_{d+1-k, d+1-k}$, $d \geq k \geq 2$. Which is what we expect.

Finally, we can denote $\tilde{k} = d - k + 1$, we can replace the loop $k = d, \dots, 2$ by $\tilde{k} = 1, \dots, d - 1$. Also denoting $\tilde{i} = d - i + 1$, the loop $i = k - 1, \dots, 1$ can be replaced by $\tilde{i} = k + 1, \dots, d$, which gives algorithm 12. $\square$

Corollary 6.5.1. *The structure of the Rosenblatt transform of a R-Vine Copula, can be identified with the*

computational graph (i.e. the structure) of a neural network.

Proof. We can see that for each value of k that the loops in i takes values computed at step $k - 1$ and combined pairs of them to build the input of the next layers. Thus, the computations take the form of a directed acyclic graph (DAG). In addition, the connections of element at level l are done to level $l + 1$ thus the connection's structure is bipartite at the layer level. According to (You et al., 2020), this meets the condition for the graph structure to be the computational graph of a neural network. $\square$

Thus, the estimation of the Rosenblatt transform can benefit from all the literature on the neural network estimation.

6.2.5 On the Choice of the Difference to Uniformity

Obviously, the choice of the distance to the uniformity of the transformed data is crucial. In the settings of GOF test, (Genest, Quessy, et al., 2006) and (Schepsmeier, 2015) observed some important disparities between different measures, such as the Cramér-von Mises, Anderson Darling, Kolmogorov-Smirnov and the criterion of (Breyman et al., 2003) among others. Among them, according to their simulations, one of the tests the most efficient is the one based on the Cramér-von Mises test.

Here, we discuss of three different measures :

- moment conditions (for example, the distance between the covariance of the uniform and the one of the transformed data),
- the Cramér-von Mises discrepancy between the distribution of the transformed data and the uniform,
- learn a discriminator as in generative adversarial learning.

The moment conditions have two principal interests. First, since if two distributions have the same moments they are equal, choosing as criterion the difference between the m -th moment of the transformed data and the uniform allows controlling the level of approximations. In addition, such criteria are easy to compute, even if this can be quite long as computing the m -th moment has complexity in $O(d^m)$. In simple cases such as learning Gaussian Copula, it is sufficient to learn the second moment distribution, i.e.

$$M_n = \sum_{k=1}^d \sum_{l=1}^d \left(\hat{\Sigma}_{kl} - \frac{1}{12} \delta_{kl} \right)^2 \quad (6.58)$$

with $\hat{\Sigma}_{kl}$ is the estimated covariance between variables k and l .

The Cramér-von Mises discrepancy is relatively easy to compute. Indeed, using properties of the independence Copula, assuming that the margins are known, it is sufficient to compute (Genest, Rémillard, et al., 2009)

$$\begin{aligned} S_n &= n \int_{[0,1]^d} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(\mathbf{U}_i \leq \mathbf{u}) - C_{\perp}(\mathbf{u}) \right]^2 d\mathbf{u} \\ &= \frac{n}{3^d} - \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{i=1}^n \prod_{k=1}^d (1 - E_{ik}^2) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{k=1}^d (1 - \max\{U_{ik}, U_{jk}\}) \quad . \end{aligned} \quad (6.59)$$

Even if this criterion is not differentiable because of the maximum, it is easy to compute with software such as Pytorch (Paszke et al., 2019) and automatic differentiation with sub-gradient can be used. In addition, it is possible to replace the maximum by a relaxation (see for example (Asadi and Littman, 2017)) thus making the criterion differentiable.

Finally, we can learn a function that should be able to discriminate between the transformed data and the uniform distribution. This can be done using an approach similar to GAN (Goodfellow, Pouget-Abadie, et al., 2014). In GAN, a network called generator is trained to produce samples whose distribution is close to the one of the data. To evaluate the proximity between the two, another network called discriminator (or critic) is learned. As the optimization of the two networks has to be done in parallel, the loss function was originally written as a classification task with two labels. The discriminator then must predict if the data come from the sample or if they has been generated from noise. The discriminator can then be learned as in a classical classification with binary cross entropy loss and the generator should try to maximize the number of errors made by the discriminator. An overview of the GAN structure is given in figure 6.10a. The original loss function to learn GAN is given by

$$\max_D \min_G E_{\text{data}}[\log(D(X))] + E_{\text{noise}}[\log(1 - D(G(Y)))] \quad , \quad (6.60)$$

where the generator G and the discriminator D are two neural networks.

While this loss function is quite complicated, it has been shown that optimal G and D lead to a case where the distribution generated by G is the same as the one of the data. In particular, it has been shown that the loss function is related to the Jensen-Shannon divergence between the distribution of the data and the one of the generator (Goodfellow, Pouget-Abadie, et al., 2014). The divergence in the training can be modified to be related to a particular φ -divergence (Nowozin et al., 2016).

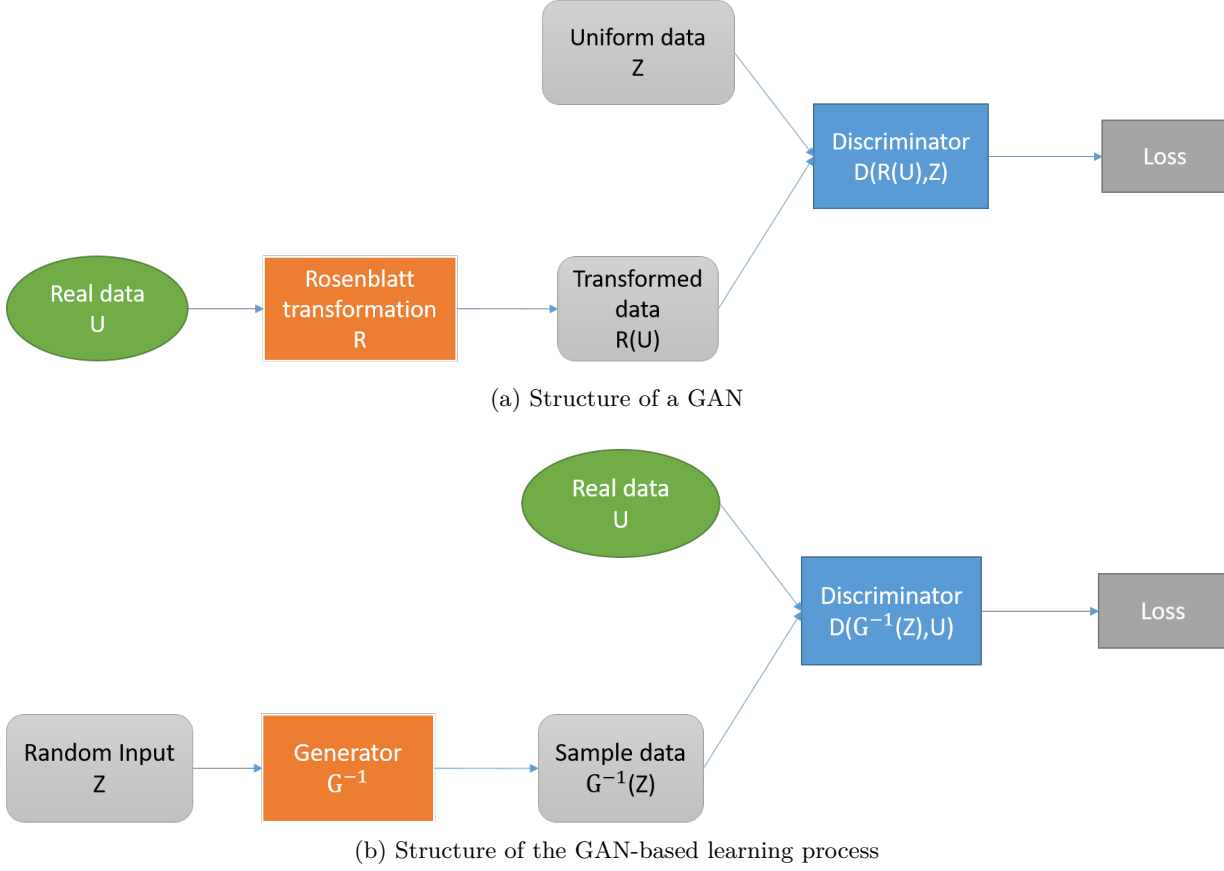


Figure 6.10 – Structures of generative based learning process

In our cases, we would rather not learn to generate random data with a distribution close to one of the available samples. Instead, we want that the transformed data are as close as possible to the uniform distribution. In addition, it is easy to simulate from uniform distribution. Thus we can then learn a network, whose objective is to differentiate between a uniform sample and the distribution of the data after the Rosenblatt transform. An overview of this structure is given in figure 6.10b. The associated loss function can be then written as

$$\max_R \min_G E_{\text{data}}[\log(D(R(X)))] + E_{\text{uniform noise}}[\log(1 - D(Y))] \quad , \quad (6.61)$$

where R is the neural network corresponding to the Rosenblatt transformation.

From the introduction of GAN, several authors point out the difficulties when minimizing such loss functions (Creswell et al., 2018). In order to reduce such problem, one possibility considered by (Arjovsky et al., 2017) is to look at the so-called Wasserstein GAN (WGAN).

6.2.6 A Link Between Likelihood, Rosenblatt Transform and Neural Networks

Often when learning statistical models, the likelihood of the model is an interesting criterion as it has many interesting properties. However, with Vine Copula the likelihood as a complex form which often makes it difficult to use. On the contrary, the approach based on the Rosenblatt transform, which may be easier to handle thanks to its link with neural neural network does not have well studied theoretical properties. Thus it may be interesting trying to draw parallel between Rosenblatt transform and likelihood if there exists some. To do some we consider a particular construction of neural network called **normalizing flows** (Kobyzev et al., 2021).

Normalizing flows share a similarity with the Rosenblatt transform, that they aim at being a transformation of the data to a simple target distribution.

More precisely, this kind of neural networks associate each layers of a network to an invertible transform. Denoting those transforms $f_1, \dots, f_K$ the aim of normalizing flows is that the distribution of $f_1 \circ f_2 \circ \dots \circ f_K(\mathbf{u})$

meets some simple distribution such as $N(0, \mathbf{I})$. Then as the transforms are invertible functions, generating a sample $\mathbf{x} \sim N(0, \mathbf{I})$ allows to simulate a point $\mathbf{y} = f_1^{-1} \circ \dots \circ f_K^{-1}(\mathbf{x})$.

The transforms often correspond to parametric function, whose parameters are optimized by maximizing the likelihood of the transformed data $f_1 \circ f_2 \circ \dots \circ f_K(\mathbf{u})$ for the target distribution (such as multivariate normal distribution).

Also, as going from the distribution $N(0, \mathbf{I})$ to the uniform distribution on $[0, 1]^d$ can be done simply, denoting such a transform f_{K+1} , the network f defined through transforms $f_1, f_2, \dots, f_K, f_{K+1}$ should provide transformed data $\mathbf{x} = f(\mathbf{y})$ with uniformed distribution. Thus the transformation shares similarity with the Rosenblatt transform.

Thus we have in some sense the following relationship between likelihood (of some model), the Rosenblatt transform and a neural network :

$$\text{likelihood} \longrightarrow \text{neural network} \longleftarrow \text{Rosenblatt transform} \quad .$$

And thus we aim at using the connection with neural network to link the Rosenblatt transform and the likelihood.

In general, a normalizing flow correspond to some neural network, which is a sequence of parametric functions, which have very good approximation guarantees (Kohler and Langer, 2021). However, there is no particular structure such as in Rosenblatt transform of a Vine Copula, where each parameter correspond to the parameter of a conditionnal Copula. Thus using a Vine Copula to build a normalizing flow could bring some explainability to the model (from the neural network point of view) or provide fast optimization for the Copula parameters (from the Vine Copula point of view).

When considering a Rosenblatt transform of a parametric Vine Copula as a normalizing flow and using the neural network optimization technics for the parameters allows to link the optimization of the parameters of the Rosenblatt transform to the likelihood of the associated Vine Copula.

Theorem 6.6. *Consider a parametric C-Vine Copula, and the associated Rosenblatt transform F . Then optimizing the parameters of the Rosenblatt transform seen as a normalizing flow is equivalent to maximize the likelihood of the C-Vine Copula.*

Proof. The idea behind a normalizing flow with k layer is that if the data have initial distribution p , then using the rule for change of variables, the log-likelihood of a point $\mathbf{x}$ can be written as

$$\log p(\mathbf{x}) = \log p_z(f(\mathbf{x})) + \log \left| \det \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right| \quad (6.62)$$

where p_z correspond to the distribution of $f(\mathbf{x})$. In normalizing flow literature, p_z is expected to be $N(0, \mathbf{I})$. In addition, from the structure of f , the term $\log \left| \det \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right|$ can be decomposed as

$$\sum_k \log \left| \det \frac{df_k(\mathbf{x})}{df_{k-1}(\mathbf{x})} \right| \quad (6.63)$$

with $f_0(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$.

The objective of normalizing flows is thus to maximize

$$\log p_z(f(\mathbf{x})) + \log \left| \det \frac{df(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right| \quad . \quad (6.64)$$

In case of a C-Vine, we have that

$$f_k(\mathbf{y}) = (y_1, \dots, y_k, h(y_{k+1}, y_k), \dots, h(y_d, y_k)) \quad . \quad (6.65)$$

From this, denoting by $\mathbf{e}_j$ the vector in which all elements have value 0 except element j whose value is 1,

$$\frac{\partial f_k(\mathbf{y})}{\partial y_j} = \begin{cases} \mathbf{e}_j, & \text{if } j < k \\ \frac{\partial h(y_j, y_k)}{\partial y_j} \mathbf{e}_j & \text{if } j = k \\ \mathbf{g}_j & \text{if } j > k \end{cases} \quad (6.66)$$

where $\mathbf{g}_j$ is the vector, whose element are 0 for index $l < k$, 1 for $l = k$ and $\frac{\partial h(y_j, y_k)}{\partial y_k}$ if $j > k$.

Thus the matrix, $\frac{df_k(\mathbf{x})}{df_{k-1}(\mathbf{x})}$ is an upper triangular matrix with element 1 on the diagonal up to coefficient k and $\frac{\partial h(y_j, y_k)}{\partial y_j}$ for coefficient $j, j > k$.

Algorithm 14 Simulation from a C-Vine (Joe, 2014)**Input:** A C-Vinespecification**Output:** A vector $(u_1, \dots, u_d)$ sampled according to the C-Vine specification given in input.

- 1: Sample a vector $(z_1, \dots, z_d)$ from the uniform distribution on $[0, 1]^d$.
- 2: Let $u_1 = z_1$ and $u_2 = C_{2|1}^{-1}(z_2 | z_1)$
- 3: **for** $j = 3, \dots, d$ **do**
- 4: $u_j = z_j$
- 5: **for** $l = j - 1$ **To** $l = 1$ **do**
- 6: $u_j = h_{j|l, \{1, \dots, (l-1)\}}(u_j | z_l)^{-1}$
- 7: **end for**
- 8: **end for**
- 9: **return** $(u_1, \dots, u_d)$.

Noticing that by definition of the h functions, $\frac{\partial h(y_j, y_k)}{\partial y_j} = c_{j,k}(y_j, y_k)$ the density of copula corresponding to i, j, D^{ij} .

Using the fact that the determinant of a triangular matrix is the product of its diagonal terms, we have

$$\left| \det \frac{df_k(\mathbf{x})}{df_{k-1}(\mathbf{x})} \right| = \sum_{e \in E_k} \log c_{j(e), k(e); D(e)}(h_{j(e); D(e)}(u_{j(e)}; \mathbf{u}_{D(e)}), h_{k(e); D(e)}(u_{k(e)}; \mathbf{u}_{D(e)})) \quad (6.67)$$

Thus maximizing the loss of the Rosenblatt network seen as a normalizing flow is equivalent to maximize

$$\log p(z) + \sum_k \sum_{e \in E_k} \log c_{j(e), k(e); D(e)}(h_{j(e); D(e)}(u_{j(e)}; \mathbf{u}_{D(e)}), h_{k(e); D(e)}(u_{k(e)}; \mathbf{u}_{D(e)})) \quad (6.68)$$

where here p_z is the distribution of the uniform distribution on $[0, 1]^d$. As p_z is constant equal to 1 on $[0, 1]^d$ and that by definition of the Rosenblatt network, $f(\mathbf{x}) \in [0, 1]^d$, the aim reduces to maximize the right term of equation (6.68), which is exactly the log-likelihood of the C-Vine specification. $\square$

Remark 6.2. A natural question is whether this theorem remains true for any Vine Structure and not only C-Vine. As the Roseblatt transform is much easier to handle in the case of a C-Vine than for a general R-Vine structure, this question is left as a future work.

6.2.7 Learning C-Vine Copula as a Generative Learning Problem

In fact, if we can write the Copula generating process, we can also map the problem of estimating the Vine Copula directly using the same approach as for GAN. To do so, we demonstrate that a C-Vine Copula generation algorithm can be mapped as a neural network as for the case of the Rosenblatt transform. From the algorithm given by (Joe, 2014) and recalled in algorithm 14, we can see that to sample the observation u_t , it requires starting from the uniform sample z_1 . Thus, unlike the previous cases, this is a bit more complicated. In the language of neural networks, this is called skip or residual connections¹.

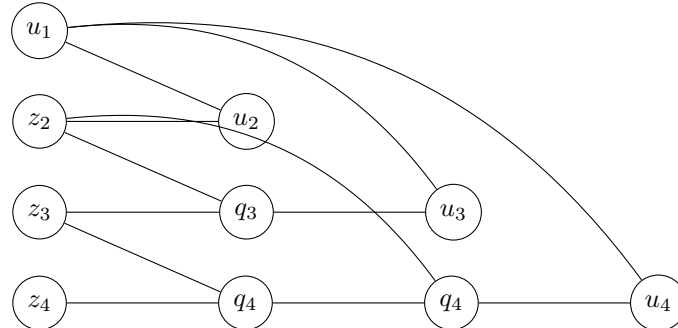


Figure 6.11 – Example of the computation graph of for simulating according to a C-Vine in dimension 4.

Using this as a generator network, we can learn the Vine Copula generating model using the same algorithm as for the GAN. Of course, the GAN loss can be replaced by other ways to do. For example, to draw parallels

1. Interestingly, (He et al., 2020) considered a residual network as a stem with some additional links between different position of the stem. They call the pairs of positions of those links as Vines. Even though it seems to have no connection with Vine structure as considered by (Bedford and Cooke, 2002), we find the use of the same terms for a prior two different most surprisingly enough to mention it.

with the moments matching presented in the previous section, an equivalent formulation for learning generator has been developed, see for example (Y. Li et al., 2015; Y. Zhang et al., 2017).

6.2.8 Perspectives

This section presents ongoing work on the estimation of Vine Copulas. Indeed, from a theoretical perspective, simplified Vine Copulas are very interesting. While global estimation, in practice, the global estimation of the parameters of these models is an open problem. However, this is important to fully benefit from their theoretical properties in practice.

Thus, we are currently studying the possibility of rewriting the estimation problems of these models as a law estimation problem using neural networks. We hope to be able to combine the advantages of the two methods, i.e. the structure and interpretability of Copula models, as well as the efficient high-dimensional estimation of neural networks.

However, much work still needs to be carried out. Unlike the classic sequential estimation formula in the literature, our method does not allow easy selection of a Copula family. Thus, we plan to explore two solutions to this problem. A first approach would be to use the results of (Khaled and Kohn, 2023) to approximate the conditional distributions via mixtures of laws. Another possibility is to estimate a mixture of Copulas, as proposed by (Kim et al., 2013). We should then look at whether the networks can adapt easily.

In addition, where the choice of structure is essential in practice in the sequential approach (Kraus and Czado, 2017). If we know how to maximize a criterion globally, the theory indicates that all Vine structures are equivalent, we can therefore be satisfied with the same structure. However, it might be nice to have a method for choosing among different structures. Finally, like the hierarchical Archimedean Copula, it will be interesting to look at the influence of penalty (Okhrin and Ristig, 2023). This can be done simply with the neural network formulation.

Finally, a last task, but perhaps the most important, is to find optimization methods adapted to this problem. Indeed, training a GAN is a very complex task, and even if our network here is simple, nothing indicates that its training is also simple. On the contrary, while GAN tend to generate data closer to original sample, normalizing flows are in general easier to train (Bond-Taylor et al., 2022). This may provide a compromise between sequential estimation and the GAN training problem.

Application sur les Données Industrielles

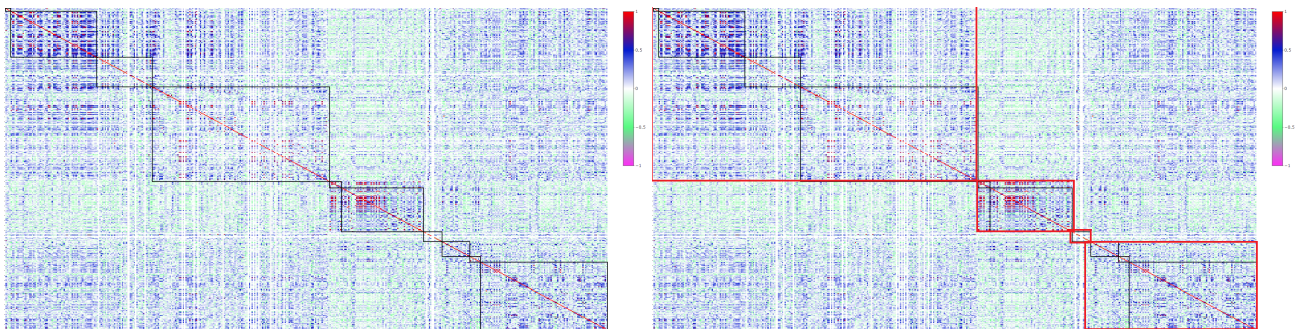
7.1 Classification des Caractéristiques en Production

Cette section est une application du résultat du chapitre 5.2 aux données industrielles. Cette application fait l'objet d'un dépôt de brevet.

7.1.1 VCI : un exemple de l'intérêt de l'étude des corrélations pour la modélisation

Une des pièces emblématiques des particularités de l'industrie aéronautique est la virole de carter intermédiaire (VCI). En effet, elle est produite à des fréquences relativement faibles, de l'ordre d'une dizaine par semaine, mais pour autant, de très nombreuses caractéristiques sont mesurées sur la pièce afin de juger de sa conformité. Parmi ces caractéristiques, il y a notamment des couronnes de trous. Sur ces couronnes, on s'attend donc à ce que les caractéristiques d'un même type (diamètres, enveloppes ou localisations) soient dépendantes.

La mesure de la dépendance est un vaste sujet et de très nombreuses méthodes peuvent être utilisées rien que pour mesurer la dépendance entre deux caractéristiques. Sur le jeu de données de la VCI présenté en section 1.4.1, la matrice de corrélation de Spearman a été choisie comme indicateur de dépendance et est affichée en Figure 7.1. Les données n'étant pas toutes normales, la corrélation de Spearman est plus pertinente que celle de Pearson. Cette figure est telle que les caractéristiques dans les blocs en noirs correspondent à un même type de caractéristiques, et les blocs rouges servent à illustrer la présence de blocs ayant une valeur moyenne de corrélation assez similaire pour les caractéristiques dans le bloc.



(a) Matrice de corrélation sur un jeu de données de la VCI (b) Mise en évidence de la structure de blocs présente entre les caractéristiques de la VCI

FIGURE 7.1 – Existence de différents blocs dans la matrice de corrélation sur des données de la VCI

Dans l'objectif de retrouver certaines informations sur la fabrication de la pièce à l'aide de méthodes d'apprentissage statistique, on peut donc supposer qu'il existe des blocs de caractéristiques avec des corrélations similaires. Ce genre de modèles qui considèrent qu'il existe des blocs s'appellent SBM pour modèles stochastiques par blocs. Bien évidemment, il est probable que les données ne correspondent pas exactement à ce modèle. Une modélisation statistique faisant le lien entre matrice de corrélation et SBM est présentée en section 5.2.5. Néanmoins, nous espérons qu'il puisse nous permettre d'apprendre certaines informations. Par exemple, la structure de blocs mise en évidence sur la figure 7.1 peut ne pas correspondre exactement à un SBM, car les blocs ne sont pas toujours totalement homogènes.

D'un point de vue industriel, les blocs considérés précédemment sont de plus trop généraux. En effet, cette première classification est basée uniquement sur le nom des caractéristiques, car de manière général, les noms correspondent à un type de caractéristique particulier. Or les noms de ce jeu de données ne correspondent pas à un type de caractéristique par nom. Il est alors possible de construire une nouvelle partition plus raffinée que celle précédente en regardant le type de caractéristique directement. On obtient alors la partition en figure 7.2. On voit alors que ce raffinement de la partition, met en évidence des blocs avec des caractéristiques assez fortement corrélées entre elles.

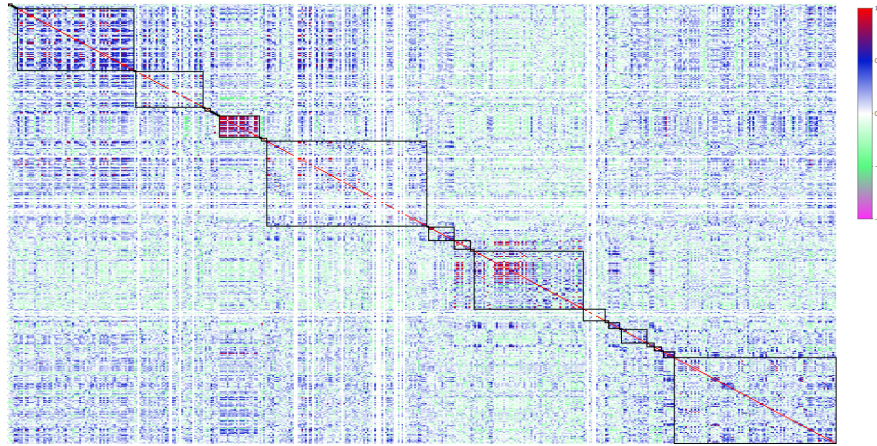


FIGURE 7.2 – Matrice de corrélation sur les données de la VCI organisée par type des caractéristiques

En pratique, s'il y a réellement une structure de blocs dans ces données, elle est inconnue. Néanmoins, on peut se demander s'il est possible de la retrouver à l'aide d'une approche purement statistique (c.f. 5.2.5). Pour cela, on utilise la méthode des K-moyennes. La partition initiale ayant 33 blocs, on cherche une partition avec le même nombre de blocs. On obtient alors la matrice en figure 7.3. Le bloc blanc correspond à des caractéristiques où il n'y a pas de mesures.

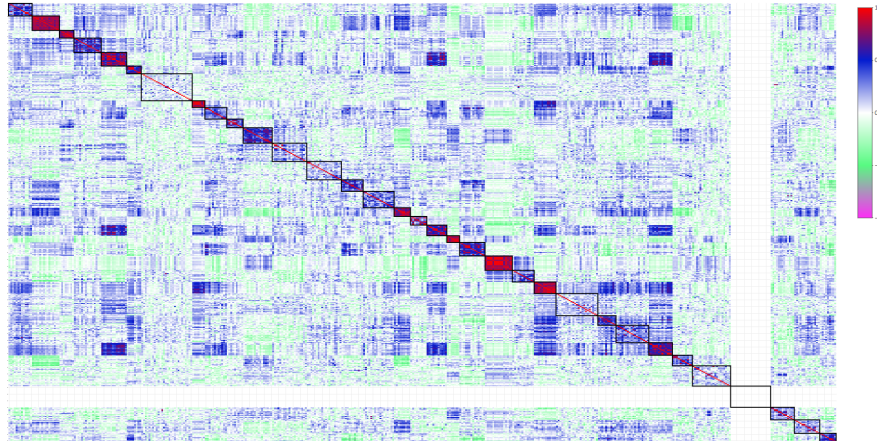


FIGURE 7.3 – Classification avec un K-moyennes ($K=33$) sur la matrice de corrélation des données de la VCI

On voit alors que les deux partitions bien qu'ayant le même nombre de blocs sont assez différentes. La partition basée sur des connaissances métiers contient principalement de gros blocs qui ne sont pas forcément très homogènes. A contrario, la partition basée sur une approche statistique met en évidence de nombreux groupes de faibles tailles mais plutôt homogènes et avec des corrélations significatives. Dès lors, on peut investiguer dans ces blocs si la corrélation observée est attendue ou non entre ces caractéristiques. Pour la plupart d'entre eux, les variables à l'intérieur d'un bloc sont de même nature ou sont peu dépendantes. Cependant, dans quelques blocs, la corrélation est forte mais les caractéristiques sont de types différents. Par exemple dans le bloc numéro 15 (voir figure 7.4 pour un zoom), on observe des corrélations entre des caractéristiques distinctes.

On voit alors que les caractéristiques, même si elles sont de natures différentes, correspondent à des positions similaires sur la pièce. Cela se voit aussi sur d'autres groupes tels que le groupe numéro 2 (voir figure 7.4 pour un zoom) dans lequel il y a uniquement des épaisseurs de toile, mais mesurées à différents endroits de la pièce. D'où la présence de dépendance entre les caractéristiques du bloc.

Ainsi, même si la classification obtenue de manière statistique ne correspond pas à celle à laquelle on s'attend, elle n'en reste pas moins cohérente et contient des informations sur la production de la pièce.

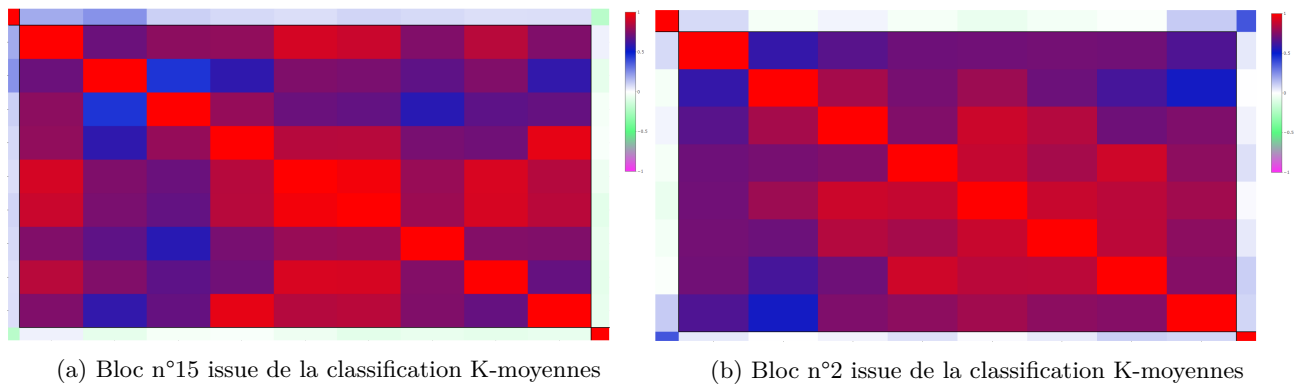


FIGURE 7.4 – Zooms sur certains blocs de la matrice de corrélation de la VCI

7.1.2 Rotor : utilisation des dépendances pour l'optimisation des gammes de fabrication

En plus d'étudier les dépendances entre les caractéristiques lors du contrôle final de la pièce, il est possible de regarder celles entre une même caractéristique à différents moments de la production. En effet, les pièces étant complexes, leur fabrication l'est aussi. Le processus de fabrication d'une pièce comporte de nombreuses étapes. Parmi elles, il arrive qu'il y ait plusieurs opérations de contrôle en plus de celle effectuée une fois la pièce finie. Lors de ces contrôles intermédiaires, toutes les caractéristiques ne sont pas forcément mesurées. Un intérêt de ces contrôles dit intermédiaires, est de ne pas continuer la fabrication d'une pièce dont on sait qu'elle va être rebutée. En effet, les pièces sont souvent fabriquées avec des matériaux coûteux comme le titane et les opérations de fabrication et de contrôle nécessitent des machines de hautes technologies. Dès lors, il est important de faire le maximum d'économie en matière première et de bien optimiser l'utilisation des différentes machines. La mesure des pièces représente une partie importante de son coût de production. Supprimer ou réduire les étapes de contrôles inutiles peut alors rapporter de réels gains.

Cependant, pour justifier la suppression d'un contrôle, il est nécessaire de démontrer qu'il n'est pas nécessaire (c.f. Figure 1.8 en Section 1.3). Au-delà de la manière de justifier la réduction du nombre de contrôles, il est nécessaire de connaître les caractéristiques ayant un lien entre elles. Or, il peut être compliqué de connaître précisément l'influence d'une opération de fabrication sur les caractéristiques, à l'aide de connaissance de la physique de la fabrication. On peut alors appliquer des méthodes statistiques à la place.

La difficulté de la mise en application de ce genre d'analyse n'est pas forcément d'ordre statistique, mais plutôt dans la récupération des données. Un exemple de pièce sur laquelle on dispose de données est le rotor d'un disque de compresseur. D'un point de vue statistique, la particularité de ce genre de données est que les contrôles intermédiaires peuvent avoir une précision moindre que celle des contrôles finaux. C'est par exemple le cas lorsque l'un des contrôles est fait en utilisant des calibres de différentes tailles et qu'une autre est réalisée avec une MMT, qui elle est très précise.

Comme on peut s'y attendre on observe alors que certaines caractéristiques mesurées à une même opération sont dépendantes et que les mesures d'une même caractéristique mesurée à des étapes différentes de la production peuvent également être dépendantes. Par exemple, dans ce jeu de données, on observe ce phénomène sur des diamètres. Mais plus surprenant, à l'aide de la statistique, on peut observer qu'il y a de la dépendance entre deux caractéristiques différentes à deux étapes de production différentes, en l'occurrence sur ce jeu de données entre la mesure d'une toile et d'une bride (c.f. figure 7.5).

De même que dans le cas précédent, on peut utiliser la méthode K-moyennes pour retrouver des blocs avec de fortes corrélations. En particulier, pour la production de cette pièce, il y a 16 opérations de contrôles. Nous considérons donc $K = 16$. On obtient alors la matrice en figure 7.6.

Si l'on zoome sur les deux blocs avec de fortes corrélations juste au-dessus du gros bloc, on observe alors des caractéristiques dépendantes. En particulier ces deux blocs contiennent des caractéristiques mesurées à différentes opérations du même type (par exemple des mesures de différents diamètres). La méthode permet donc de détecter tous les types de liens entre les données. Ces dépendances entre des caractéristiques différentes à des opérations différentes ne sont pas toujours celles auxquelles pensent en premier les experts métiers.

7.1.3 Aubes fan : peut-on retrouver les sections via la statistique ?

Nous considérons maintenant l'aube fan pour étudier notre approche. Sur ces données, correspondant au jeu de données n°1 présenté en section 1.4.2, il y a des valeurs manquantes. On ne garde alors que les mesures de pièces avec les mesures de toutes les caractéristiques. En effet, s'il y a des valeurs manquantes, les mesures de

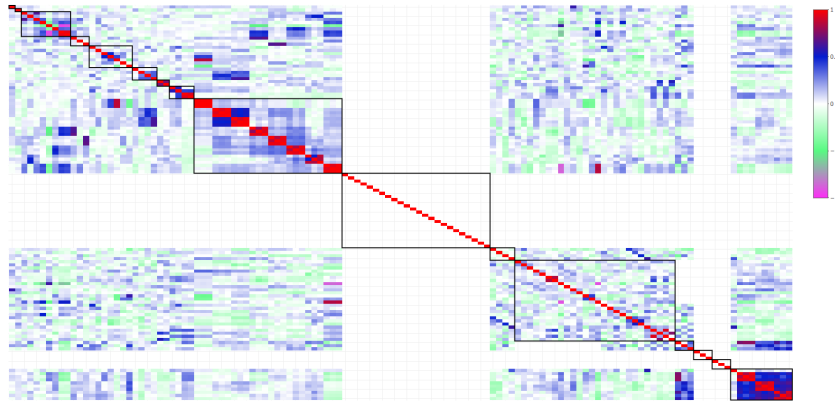


FIGURE 7.5 – Matrice de corrélation sur le jeu de données d’un rotor. Les caractéristiques dans un même bloc sont mesurées à la même opération de contrôle. La zone hachurée indique qu’il y avait moins de trente mesures (pas de corrélation calculées).

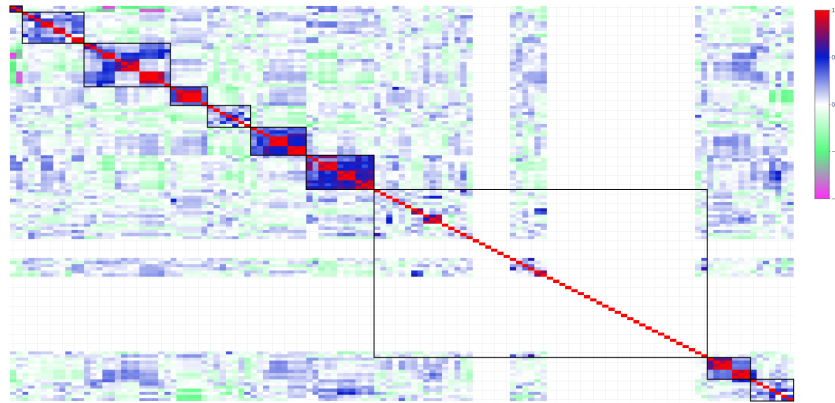


FIGURE 7.6 – Matrice de corrélation sur le jeu de données d’un rotor. Les blocs ont été construits en utilisant l’algorithme des K-moyennes. La zone hachurée indique qu’il y avait moins de trente mesures (pas de corrélation calculées).

dépendances ne seront pas calculées sur des échantillons de mêmes tailles, ce qui ajoutera un biais. Une autre possibilité aurait pu être d’imputer les valeurs manquantes.

L’aube est une pièce sur laquelle sont définies plusieurs sections réparties sur toute la hauteur de la pièce (c.f. Figure 1.12 en Section 1.4.2). Différentes caractéristiques sont alors mesurées sur chacune des sections. En particulier, nous regardons les mesures de 17 caractéristiques géométriques avec notamment des caractéristiques de formes, des épaisseurs, des angles ou encore des positions.

Sur les aubes, les experts métiers s’attendent en général à ce que les mesures faites pour des caractéristiques similaires (par exemple l’épaisseur du bord d’attaque de la pale) soient dépendantes entre les sections. Cependant, il arrive aussi qu’il y ait des comportements un peu différents entre le pied, le milieu et la tête de l’aube. Alors, lorsqu’on affiche la matrice de corrélation de Spearman sur les données triées par types de caractéristiques, on obtient la figure 7.7.

Dans l’objectif de regrouper les caractéristiques, on peut s’attendre à quelques difficultés. En effet, on observe que certains blocs ne sont pas réellement homogènes. Par exemple, si l’on prend le bloc en haut à gauche (c.f. Figure 7.8a pour un zoom), on observe trois comportements distincts. Néanmoins, cela n’est pas étonnant au vu de ce que l’on a dit précédemment et il paraît raisonnable d’associer un bloc du modèle à chacun de ces comportements. Un autre cas plus complexe au vue de la modélisation statistique (blocs homogènes), est donné en figure 7.8b. La structure dans ce bloc ressemble plus à une matrice de Toeplitz dans le sens où la structure de dépendance entre les caractéristiques semble dépendre non seulement du bloc, mais aussi de la position des caractéristiques sur la pièce. Plus les sections sont éloignées, moins les caractéristiques sont dépendantes. D’un point de vue physique, cela est assez logique, mais cela ne correspond pas réellement au modèle statistique associé.

Néanmoins, on peut tout de même regarder les résultats de la méthode K-moyennes sur les données. On considère deux nombres de blocs différents. Le premier étant 17, le même que le nombre de types de caractéristiques par section. Pour le deuxième, on considère 51 (c.f. Figure 7.9). Cela correspond au nombre de types de caractéristiques multiplié par trois (pour les différences de comportement entre le pied, le milieu et la tête de

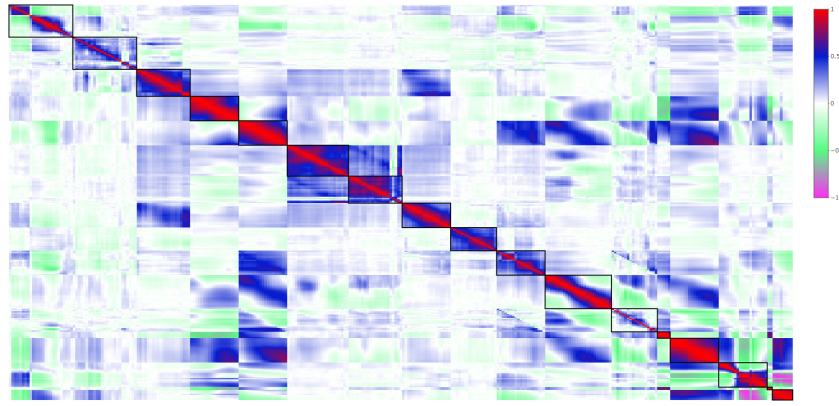
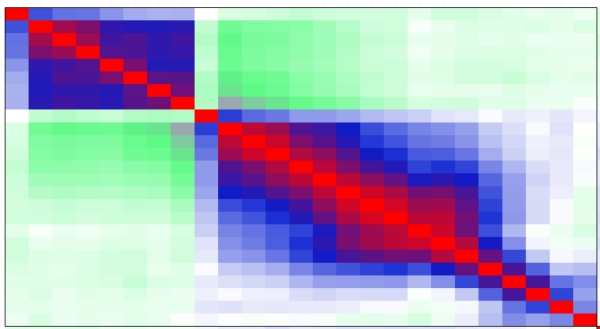
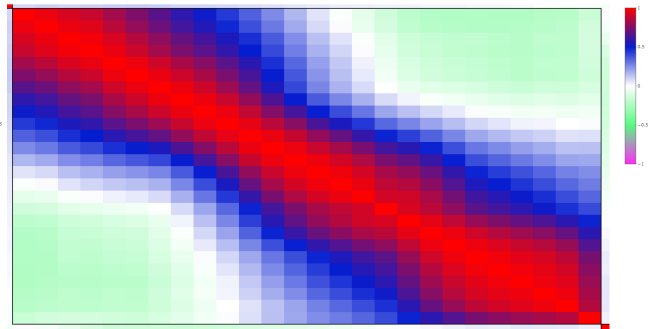


FIGURE 7.7 – Matrice de corrélation sur le jeu de données de l'aube fan. Les blocs représentent les différents types de caractéristiques.



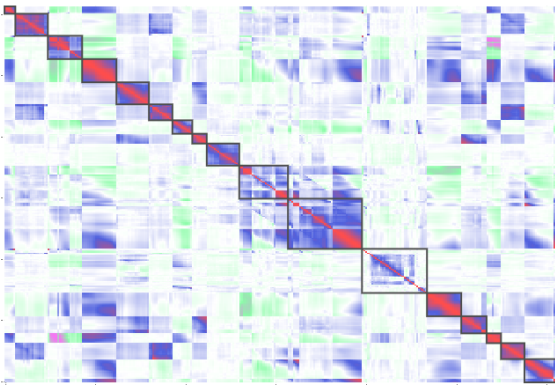
(a) Forme de l'extrados



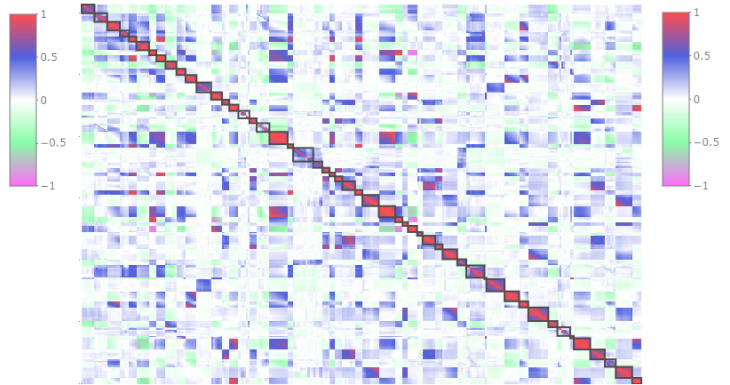
(b) Coefficients Beta 2

FIGURE 7.8 – Zooms sur la dépendance entre certaines caractéristiques de l'aube fan en fonction des sections.

l'aube).



(a) 17 classes



(b) 51 classes

FIGURE 7.9 – Matrice de corrélation des aubes fan avec des blocs issus de la méthode K-moyennes

Enfin, on considère le nombre de blocs sélectionnés de manière automatique par la méthode de la vraisemblance intégrée pour un modèle SBM gaussien. La matrice est présentée en figure 7.10. La méthode choisit 30 classes. Cette valeur est un entre deux entre les cas avec 17 et 51 classes de la figure 7.9.

Pour la méthode K-moyennes avec 17 blocs, on obtient que 7 des 17 blocs estimés mélangent plusieurs types de caractéristiques. En particulier, parmi eux, 1 bloc contient des variables peu corrélées. Pour les autres, les caractéristiques dans ces blocs sont corrélées aux alentours de 0.5. Cela n'est pas vraiment satisfaisant, car les variables ne sont pas fortement dépendantes.

Si nous regardons maintenant la classification K-moyennes avec 51 blocs, on obtient alors 5 blocs qui comportent des caractéristiques de différents types. L'un d'entre eux représente les variables faiblement corrélées. Ainsi, ce bloc ne peut pas être distingué par des méthodes statistiques. Pour les 4 autres, l'un deux est comme dans le cas avec 17 classes uniquement composé de variables moyennement corrélées (0.4 en moyenne). Les

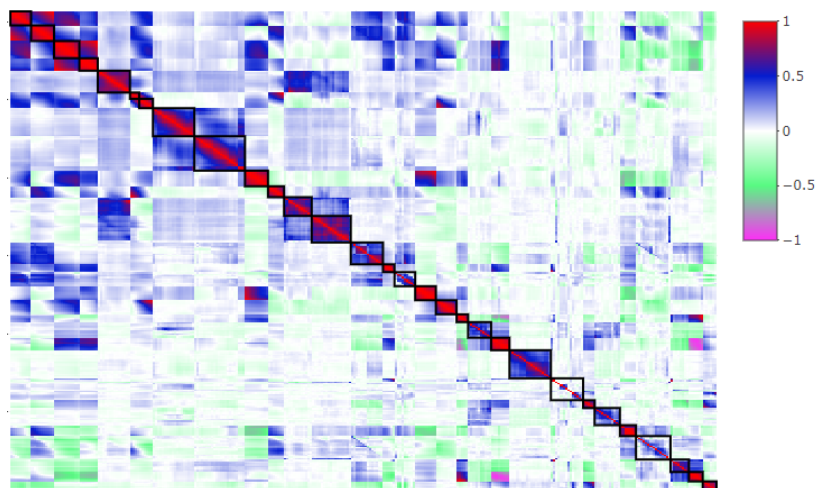


FIGURE 7.10 – Matrice de corrélation avec les blocs estimés de manière automatique par vraisemblance d'un SBM gaussien 30 classes)

autres sont fortement corrélés avec des valeurs supérieures à 0.75.

Une autre propriété intéressante avec la méthode statistique est qu'en général, elle préserve la géométrie de la pièce. En effet, si l'on regarde comment un même type de caractéristiques est réparti dans la classification, on observe une continuité entre les sections dans les différents groupes. Un tel exemple est présenté en figure 7.11. Ainsi pour trois sections adjacentes (notées 1,2,3) sur la pièce, réparties dans deux blocs, on a soit (1,2) et (3) soit (1) et (2,3) mais pas (1,3) (2).

	28	36	38
10	0	0	1
15	0	0	1
20	0	0	1
25	0	0	1
30	1	0	0
35	1	0	0
40	1	0	0
45	1	0	0
50	1	0	0
54	1	0	0
58	1	0	0
63	1	0	0
67	0	1	0
71	0	1	0
75	0	1	0
79	0	1	0
84	0	1	0
88	0	1	0
90	0	1	0

FIGURE 7.11 – Exemple de la séparation d'une caractéristique en fonction des sections et des blocs

7.2 Optimisation des Contrôles en Production

Cette partie est soumise au brevet FR 3 063 153 A1.

7.2.1 Problématique

Comme dit en introduction, pour obtenir une des caractéristiques qui nous permettent de juger de la conformité, on fait souvent plusieurs mesures intermédiaires.

C'est le cas des diamètres de trous, où pour chaque trou de la couronne on ne regarde à la fin que le minimum et le maximum. Mais c'est aussi valable pour d'autres caractéristiques. Par exemple, si on regarde la coaxialité entre deux trous, on doit au préalable mesurer le plan de chacun des trous, ainsi que leurs positions par rapport au plan. De fait, la manière de mesurer est elle-même complexe. Et si l'on cherche à optimiser les contrôles sans faire attention (i.e. sans prendre en compte la manière dont les caractéristiques sont mesurées), on risque de ne pas faire de gain en terme de temps de contrôles. Dans l'optique d'un risque acceptable, on définit pour chaque caractéristique un risque de se tromper dans la prédiction conforme versus non conforme. Ainsi, le problème

que l'on cherche à résoudre est le suivant : minimiser le temps de mesure, tout en s'assurant que le risque que l'on prend en ne mesurant pas toutes les caractéristiques soit inférieur à un seuil α .

Aujourd'hui, un outil permet de faire cela dans un cas simplifié. En considérant que le diagramme de mesure est simplement composé de blocs de même taille, l'idée est d'appliquer une approche heuristique pour la sélection des blocs de caractéristiques que l'on va mesurer. Une fois les blocs choisis, lors du contrôle d'une pièce, ces derniers sont mesurés et les valeurs des caractéristiques non mesurées sont prédites à l'aide de la régression linéaire multiple. Si l'intervalle de prévision à un niveau donné (par exemple 99,73%), est dans les limites de spécifications, la pièce est dite conforme. Sinon, les caractéristiques qui n'avaient pas été contrôlées le sont et la pièce est sanctionnée en fonction des résultats de mesure. Enfin pour s'assurer que le modèle de régression reste valide et qu'il n'y a pas de dérive dans la production, des pièces sont mesurées entièrement à une fréquence donnée.

Ainsi, il y a deux axes d'amélioration pour la méthode :

1. adapter l'approche à des diagrammes de mesures plus complexes,
2. proposer une méthode de sélection des blocs (idéalement automatique) qui permette un choix optimal.

Dans cette partie, on se concentre sur le deuxième point, i.e. trouver une meilleure manière de choisir les caractéristiques à mesurer.

7.2.2 Méthode actuelle et limitations

Aujourd'hui, la méthode de sélection des variables pour l'optimisation des contrôles est faite manuellement par un expert statisticien. Dans ce but, il construit des blocs de variables corrélées en regardant la matrice de corrélation de Pearson des données. Puis, il sélectionne pour chaque groupe une variable qui sera mesurée. Les autres seront échantillonnées. Pour choisir la variable par groupe cela peut être la plus corrélée aux autres, i.e. celle minimisant l'erreur de reconstruction du groupe, ou bien une variable choisie en fonction des contraintes métier.

Pour le nombre de variables à inclure dans l'analyse, il peut être choisi par le statisticien à partir des données disponibles ou par les experts métiers (si cela n'est pas en contradiction avec l'analyse statistique).

La méthode actuelle présente deux principaux défauts. Le premier, est que la méthode ne permet pas de gérer des structures complexes entre les mesures. En effet, elles supposent que les mesures sont faites par blocs indépendants. Or en pratique, il arrive que ce ne soit pas le cas (un tel exemple est donné plus loin). Le second problème est que le choix des caractéristiques nécessite un statisticien et est fait de manière heuristique. En effet, alors que le véritable critère de la méthode est de maximiser le gain de temps tout en assurant un contrôle sur le risque, la méthode actuelle se base uniquement sur les corrélations. Dans certains cas cela peut être suffisant, mais pas toujours.

Par exemple une utilisation de cette méthode a été faite sur l'aube Fan. L'objectif était de réduire de 28 à 11 le nombre de sections où les Balloons 26 et 36 étaient mesurés. Comme on le verra dans la suite, le gain de temps est lié directement à la capacité du processus échantillonné à être conforme à des tolérances restreintes. De plus en regardant les données, on s'aperçoit que les capacités individuelles des Balloons sur les différentes sections varient environ de 1 à 3. Or, restreindre les tolérances implique une diminution des capacités des caractéristiques échantillonnées. Dès lors, si les caractéristiques avec les capacités les plus faibles ne sont pas mesurées, la capacité pièce va être mauvaise et l'on va devoir recontrôler toute la pièce. Au vu de cette remarque, mesurer les caractéristiques avec les capacités les plus faibles devrait impliquer (en présence de dépendance suffisamment forte) une diminution faible de la capacité du process. Ainsi en comparant les performances entre les deux manières de sélectionner les caractéristiques, on obtient pour le choix par corrélation une capacité estimée d'environ 0.8, alors que celle avec les variables choisies par capacité, la capacité pièce n'a pas changé et est restée aux alentours de 1.

Ainsi, il peut être intéressant de changer d'approche lors de l'optimisation. De plus, pour soulager la forte demande en analyses statistiques, et rendre plus autonome les responsables de production, il peut être intéressant de rendre la sélection des caractéristiques automatique.

7.2.3 Optimisation des contrôles comme un problème de sélection de variables pénalisé

Dans cette section, on propose une manière de réécrire le problème que l'on cherche à résoudre en terme mathématique.

Ecriture mathématique du problème

Lors de l'optimisation des contrôles, on cherche à minimiser le temps de mesure des pièces. Pour cela, on considère une pièce avec d caractéristique $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$. Soit $V \in \{1, \dots, d\}$, on note $\|V\|$ le temps de

mesure nécessaire afin de contrôler les caractéristiques $(X_j)_{j \in V}$. De plus on note $T = \|\{1, \dots, d\}\|$ le temps nécessaire à la mesure de la pièce.

Lors de l'optimisation des contrôles, un sous ensemble V des caractéristiques de la pièce est sélectionné et une fonction f est construite afin de prédire la conformité de la pièce à partir des caractéristiques mesurées. En pratique, lorsque qu'une telle optimisation des contrôles est mise en place, la stratégie est la suivante :

1. Seulement un sous ensemble V des caractéristiques est mesuré et
 - (a) si la pièce est prédite conforme (l'intervalle de prédiction des données est dans les limite de spécifications), la pièce est déclarée conforme,
 - (b) sinon, elle est recontrôlée entièrement
2. Avec une fréquence $1/10$, la pièce est contrôlée entièrement,

Le gain de temps peut donc se faire uniquement à cette étape. On se concentre donc dessus. En notant p_{opt} la probabilité qu'une pièce soit prédite conforme, on peut alors écrire

$$\text{Temps de mesure} = p_{opt}(V)\|V\| + (1 - p_{opt}(V))(\|V\| + T) \quad . \quad (7.1)$$

Remarque 7.1. On pourrait aussi considérer que lorsque la pièce est prédite non conforme, on ne recontrôle que ce qui manque. Cela revient à un problème équivalent. De plus, la fonction f est supposée telle qu'elle offre un contrôle sur le risque d'erreur de prédiction de la conformité.

Minimiser le temps de mesure revient donc à minimiser $\|V\| - p_{opt}(V)T$. On cherche donc $\hat{V} \in \{1, \dots, d\}$ tel que

$$\hat{V} = \operatorname{argmin}_V \left\{ -p_{opt}(V) + \frac{1}{T}\|V\| \right\} \quad (7.2)$$

Or on a

$$\begin{aligned} \min_V \left\{ -p_{opt}(V) + \frac{1}{T}\|V\| \right\} &= \min_{t \leq T} \left\{ \min_{V: \|V\|=t} \left[-p_{opt}(V) + \frac{1}{T}\|V\| \right] \right\} \\ &= \min_{t \leq T} \left\{ \frac{t}{T} - \max_{V: \|V\|=t} p_{opt}(V) \right\} \\ &= \min_{t \leq T} \left\{ \frac{t}{T} - \max_{V: \|V\| \leq t} p_{opt}(V) \right\} \end{aligned} \quad (7.3)$$

Ainsi, une manière alternative de minimiser le temps de mesure, est de calculer pour différent temps t

$$\max_{V: \|V\| \leq t} p_{opt}(V) \quad (7.4)$$

Puis de sélectionner celui qui minimise l'équation (7.2).

Pour cela, il faut expliciter plus en détail $p_{opt}(V)$ et $\|V\|$. Pour simplifier la présentation, on fait plusieurs hypothèses :

1. La pièce se compose d'une caractéristique répétée (d fois). C'est-à-dire que les caractéristiques peuvent être mesurées indépendamment les unes des autres et qu'elles sont le même temps de mesure $\lambda > 0$.
2. On dispose d'un jeu de données composé de n mesures d'une production *i.i.d.* ayant une loi normale multivariée.

L'hypothèse 1 permet de définir $\|V\|$ comme le nombre de caractéristiques mesurées multiplié par le temps de mesure d'une caractéristique, i.e. $\|V\| = \|V\|_0$. L'hypothèse 2 motive l'utilisation de la régression linéaire comme base pour la fonction de prédiction.

L'hypothèse 1 peut être supprimée et cela fera l'objet de la section 7.2.4. L'hypothèse 2 est plus complexe à supprimer. Afin d'avoir des données qui s'en approche une possibilité est de transformer les données pour que les distributions des caractéristiques soient individuellement Gaussiennes.

Pour la suite, on considère aussi que les données sont centrées (potentiellement réduites), i.e. on retranche leur moyenne. De plus, on suppose que les limites de spécification subissent le même traitement. On considère donc un modèle de régression sans "intercept".

Afin de contrôler l'erreur possible lors de la prédiction, on regarde non pas directement si la prédiction du modèle linéaire est conforme à ses spécifications, mais si son intervalle de prédiction au niveau $1 - \alpha$ est dans les spécifications, i.e.

$$\begin{aligned} X_j^u &\leq USL_j \\ X_j^l &\geq LSL_j \end{aligned} \quad (7.5)$$

avec

$$\begin{aligned} X_j^u &= \mathbf{x}^T \beta_j + q_{n-p}(1 - \alpha/2) \sqrt{\frac{\|X_j - \mathbf{x}^T \beta_j\|_2^2}{n-p}} \sqrt{1 + \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}} \\ X_j^l &= \mathbf{x}^T \beta_j - q_{n-p}(1 - \alpha/2) \sqrt{\frac{\|X_j - \mathbf{x}^T \beta_j\|_2^2}{n-p}} \sqrt{1 + \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}} \end{aligned} \quad (7.6)$$

où p est le nombre de caractéristiques mesurées, $\mathbf{x}$ est une nouvelle mesure faite des V caractéristiques, $\mathbf{X}$ des p caractéristiques de V mesurées sur n pièces et β_j les coefficients de régression pour prédire la caractéristique j .

Remarque 7.2. Pour simplifier les notations, on se contente de X_j^u et X_j^l au lieu de $X_j^u(V, \beta_j)$ et $X_j^l(V, \beta_j)$. Si X_j est mesurée, en prenant un certain β_j , on a bien que $X_j = X_j^u = X_j^l$.

Plus généralement, on peut définir la matrice $\beta \in \mathbb{R}^{d \times d}$ comme la matrice telle que pour tout j , $(\beta)_{ij}$ soit le i -ème coefficient de β_j et $(\beta)_{ij} = 0$ si $i \notin V$. Alors,

$$\lambda \|\beta\|_{0,1} = \lambda \left\| \sum_{i=1}^d \beta_i \right\|_0 = \lambda |V| = \|V\| \quad . \quad (7.7)$$

De plus, si on suppose que les données sont dépendantes, il n'est pas incohérent de considérer que

$$\mathbb{P}(\cap_{j=1}^d \{X_j^u \leq USL_j\} \cap \{X_j^l \geq LSL_j\}) \approx \min_j \min\{\mathbb{P}(X_j^u \leq USL_j), \mathbb{P}(X_j^l \geq LSL_j)\} \quad . \quad (7.8)$$

En continuant dans les approximations, X_j^u et X_j^l sont approximativement Gaussiennes,

$$\begin{aligned} p_{opt}(V) &\approx \min_j \min(\mathbb{P}(X_j^u \leq USL_j), \mathbb{P}(X_j^l \geq LSL_j)) \\ &= \Phi(\min_j \min(\Phi^{-1}(\mathbb{P}(X_j^u \leq USL_j)), \Phi^{-1}(\mathbb{P}(X_j^l \geq LSL_j)))) \\ &= \Phi(3 * \min_j \min(Cpk_j^u, Cpk_j^l)) \end{aligned} \quad (7.9)$$

où

$$\begin{aligned} Cpk_j^u &= \frac{USL_j - E[X_j^u]}{3sd[X_j^u]} \\ Cpk_j^l &= \frac{E[X_j^l] - LSL_j}{3sd[X_j^l]} \quad . \end{aligned} \quad (7.10)$$

On cherche alors

$$\begin{aligned} \arg\max_{V: \|V\| \leq t} p_{opt}(V) &= \arg\max_{V: \|V\| \leq t} \Phi(3 * \min_j \min(Cpk_j^u, Cpk_j^l)) \\ &= \Phi(3 * \arg\max_{V: \|V\| \leq t} \min_j \min(Cpk_j^u, Cpk_j^l)) \\ &= \arg\max_{V: \|V\| \leq t} \min_j \min(Cpk_j^u, Cpk_j^l) \\ &= \arg\max_{\beta: \lambda \|\beta\|_{0,1} \leq t} \min_j \min(Cpk_j^u, Cpk_j^l) \quad . \end{aligned} \quad (7.11)$$

Deux problèmes se posent. Le premier est le calcul de Cpk_j^u et Cpk_j^l définis en équation (7.10). Si le calcul de ces indices est trop coûteux ou complexe, l'optimisation ne pourra pas se faire. De plus, l'ensemble d'optimisation étant complexe, il y a de grande chance que le problème ne soient pas convexe. En fait, comme on cherche à faire de l'optimisation sur un ensemble discret, il est NP-hard.

On va donc maintenant proposer une solution à ces deux problèmes.

Approximation du Cpk

Afin de calculer l'approximation de la capabilité, il est donc nécessaire de calculer $E[X_j^u]$ et $sd[X_j^u]$ ainsi que leurs équivalents pour la borne inférieure.

Ici, on illustre uniquement le cas de la limite inférieure, celui de la limite supérieure se traitant de manière équivalente. On cherche la moyenne et la variance de la variable X_j^l .

On rappelle que le jeu de données disponible, $\mathbf{X}$, contient n observations et d caractéristiques et qu'il est centré et réduit. Les limites de tolérances sont celles qui ont subi la même transformation. De plus, on ne considère pas de terme de biais dans la régression.

Un résultat classique de statistique Bayésienne (voir par exemple (D. Sun et Berger, 2007)) permet de montrer que, conditionnellement à $\mathbf{X}$, la loi d'une nouvelle observation est donnée par $\mathbf{x}_{new} \sim t(0, \frac{(n+1)(n-1)}{n(n+1-d)} \hat{\Sigma}, n+1-d)$.

De plus, en notant $\hat{\sigma}$ la norme 2 des résidus divisée par $n - p$, on obtient

$$\begin{aligned} E[X_j^l | \mathbf{X}] &= E \left[\text{pred}(\mathbf{x}_{new}) - q_{1-\alpha/2} \sqrt{1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}} \hat{\sigma} | \mathbf{X} \right] \\ &= E [\text{pred}(\mathbf{x}_{new})] - q_{1-\alpha/2} \hat{\sigma} E \left[\sqrt{1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}} | \mathbf{X} \right] . \end{aligned} \quad (7.12)$$

Le premier terme de la dernière équation est nulle par hypothèse. Pour le second terme, il faut estimer $E \left[\sqrt{1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}} | \mathbf{X} \right]$. Cela peut être fait par simulation ou analytiquement en utilisant le fait que l'on connaisse la distribution de $\mathbf{x}_{new}$. En utilisant la méthode Delta, comme $E[\mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}] = \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}$, on l'approxime par $\sqrt{1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}}$. Pour n relativement grand, environ $100 + d$, l'écart entre l'approximation et la réalité est négligeable.

Pour la variance, on a une expression qui est la somme de deux termes. Empiriquement, dès que la corrélation n'est pas trop faible entre les variables, la variance est dictée par le premier terme. Ainsi,

$$\begin{aligned} \text{Var}(X_j^l | \mathbf{X}) &= \text{Var} \left(\mathbf{x}_{new}^T \beta_j + q_{n-p}(\alpha/2) \sqrt{\frac{\|X_j - x^T \beta_j\|_2^2}{n-p}} \sqrt{1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}} \middle| \mathbf{X} \right) \\ &\approx \text{Var}(\mathbf{x}_{new}^T \beta_j | \mathbf{X}) + v_{2,j} \\ &= E[\beta_j \mathbf{x}_{new}^T \mathbf{x}_{new} \beta_j^T] - E[\beta_j \mathbf{x}_{new}^T] E[\beta_j \mathbf{x}_{new}^T]^T + v_{2,j} \\ &= \beta_j E[\mathbf{x}_{new}^T \mathbf{x}_{new}] \beta_j^T - 0 = \beta_j \hat{\Sigma} \beta_j^T + v_{2,j} \end{aligned} \quad (7.13)$$

où $v_{2,j} = \text{Var}(q_{n-p}(1 - \alpha/2) \sqrt{\frac{\|X_j - x^T \beta_j\|_2^2}{n-p}} \sqrt{1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}} | \mathbf{X})$, c'est à dire que l'on néglige la dépendance entre les deux termes, car c'est une constante multipliée par $E[\mathbf{x}_{new} \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}] \approx 0$ car $E[\mathbf{x}_{new}] = 0$. En particulier, on a que $v_2 \approx 0$ si l'erreur de prédiction est faible. En pratique cela n'est pas toujours le cas (du moins si l'on prend une mauvaise selection de variable). Ainsi, $v_{2,j}$ doit être prise en compte. Pour cela, on l'approxime par

$$\begin{aligned} v_{2,j} &= q_{n-p}^2 1 - \alpha/2 \frac{\|X_j - x^T \beta_j\|_2^2}{n-p} \left(E[1 + \mathbf{x}_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_{new}] - E[\sqrt{1 + x_{new}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} x_{new}}] \right) \\ &\approx q_{n-p}^2 1 - \alpha/2 \frac{\|X_j - x^T \beta_j\|_2^2}{n-p} \left(1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)} - \sqrt{1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}} \right) \\ &\approx \frac{q_{n-p}^2 1 - \alpha/2 \frac{\|X_j - x^T \beta_j\|_2^2}{n-p}}{2} \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)} . \end{aligned} \quad (7.14)$$

On peut donc écrire

$$Cpl^j = \frac{-q_{1-\alpha/2} \hat{\sigma}(\beta_j) \sqrt{1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}} - LSL_j}{3 \sqrt{\beta_j \hat{\Sigma} \beta_j^T + v_{2,j}}} . \quad (7.15)$$

En utilisant la même approche, on obtient

$$Cpu^j = \frac{USL_j - q_{1-\alpha/2} \hat{\sigma}(\beta_j) \sqrt{1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}}}{3 \sqrt{\beta_j \hat{\Sigma} \beta_j^T + v_{2,j}}} \quad (7.16)$$

et finalement,

$$Cpk^j = \frac{\min\{USL^j, -LSL^j\} - q_{1-\alpha/2} \hat{\sigma}(\beta_j) \sqrt{1 + \frac{p(n+1)}{n(n+1-d)}}}{3 \sqrt{\beta_j \hat{\Sigma} \beta_j^T + v_{2,j}}} \quad (7.17)$$

On arrive alors au problème

$$\text{argmax}_{V: \|V\| \leq t p_{opt}(V)} = \text{argmax}_{\beta: \lambda \|\beta\|_{0,1} \leq t} \min_j Cpk^j . \quad (7.18)$$

7.2.4 Estimation des paramètres

Reformulation du problème

Maintenant que l'on a écrit le critère en fonction de β , on peut chercher à le résoudre. Ce problème n'admet pas de solution simple. On va donc utiliser une méthode numérique. La particularité de ce problème est que c'est un problème min-max. En effet, il peut se réécrire comme

$$\min_{\beta: \|\beta\|_{1,0} \leq t} \max_{\mathbf{y} \in \Delta} f(\mathbf{y}, \beta; \mathbf{X}) \quad (7.19)$$

où $f(\mathbf{y}, \beta) = \sum_{j=1}^d -y_j^u Cpk^j(\beta_j; \mathbf{X})$

De fait, l'optimisation n'est pas facilement faisable. Cependant, les fonctions $\beta_j \mapsto Cpk^j$ sont régulières. On peut donc calculer leur gradient. La méthode classique pour résoudre ce genre de problèmes est de réaliser une descente de gradient projetée avec une alternance entre le calcul du gradient en $\mathbf{y}$ et en β . Cependant, bien que l'ensemble Δ soit convexe, l'ensemble $\{\beta : \|\beta\|_{0,1} \leq t\}$, ne l'est pas et n'admet pas de projection simple. Dans ce cas là, une approche classique de la littérature est de regarder une relaxation convexe du modèle, avec ou sans pénalité. Typiquement, une possibilité serait de remplacer la norme $\|\cdot\|_{0,1}$ par la norme l_1 par élément, ou une norme du type *group lasso*. Le problème de ces deux approches est que les variables sont dépendantes entre elles. Or, en présence de corrélations, elles ne sont pas stables pour faire de la sélection de modèles.

La contrainte sur β implique qu'elle ne doit pas avoir plus de t colonnes non nulles. En particulier, une manière de résoudre ce problème est de supposer qu'il y en a exactement p et de faire l'optimisation pour chaque $p \in \{1, \dots, t\}$. Dans ce cas, si $\mathbf{X}$ avait simplement p colonnes, il n'y aurait pas de contraintes sur β . Une manière de faire cela, est de ne garder que les p premières colonnes de $\mathbf{X}$. Cela peut être fait par exemple en considérant $\mathbf{X}\mathbf{P}$ où $\mathbf{P}$ est la matrice de projection de taille $d \times p$ telle que $P_{ii} = 1$ si $1 \leq i \leq p$ et 0 sinon. Dans ce cas, on impose que les colonnes gardées sont les p premières. Or en pratique rien n'indique que ce soit le cas. Ainsi, pour résoudre ce problème, une possibilité est de regarder plutôt $\mathbf{X}\mathbf{M}\mathbf{P}$, où $\mathbf{M}$ est une matrice de permutation de taille $d \times d$. Ainsi, on obtient le problème

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p \times p}, \mathbf{M} \in \mathcal{D}} \max_{\mathbf{y} \in \Delta} f(\mathbf{y}, \beta; \mathbf{X}\mathbf{M}\mathbf{P}) \quad (7.20)$$

avec $\mathcal{D}$, l'ensemble des matrices de permutations. Cependant, cet ensemble dont les membres sont aussi appelés matrices doublements stochastiques n'est toujours pas convexe. Dans ce cas là, une approche classique de la littérature est de regarder une relaxation convexe du modèle.

Cette formulation se prête néanmoins mieux à une relaxation convexe. En effet, plusieurs pénalités permettent d'imposer des contraintes de parcimonie en ayant de meilleures performance que les normes l_1 ou *group lasso* (Bach, 2008). Deux exemples classiques sont le ratio L_1/L_2 ou la différence $L_1 - L_2$ (Yin et al., 2014). On va ici s'intéresser à cette dernière. Cette pénalité a notamment été considérée par (Lyu et al., 2020) pour apprendre des permutations. Pour une matrice $\mathbf{m}$, elle se définit dans ce cas comme

$$P(\mathbf{m}) = \sum_i \left[\sum_j |m_{ij}| - \left(\sum_j m_{ij}^2 \right)^{1/2} \right] + \sum_j \left[\sum_i |m_{ij}| - \left(\sum_i m_{ij}^2 \right)^{1/2} \right] \quad (7.21)$$

où ils demandent en plus que $m_{ij} \geq 0, \forall i, j$ et que la somme de chaque ligne et chaque colonne soit égale à 1.

Cette fonction présente la particularité que $P(\mathbf{m}) = 0$ si et seulement si $\mathbf{m}$ est une matrice de permutation.

Bien que cette formulation soit plus adaptée, la contrainte que la somme de chaque ligne et chaque colonne soit égale à 1 est difficile à réaliser en pratique, et souvent, seulement une approximation est possible (Lyu et al., 2020). Néanmoins, on peut en fait simplifier ce problème en ne gardant qu'une seule des deux contraintes.

Proposition 7.1. Soit $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ telle que pour tout $i, \mathbb{M}_i \in \Delta$ ou pour tout $j, \mathbb{M}_j \in \Delta$.

Alors $\mathbf{m}$ est une matrice de permutation si et seulement si

$$P(\mathbf{m}) = 0 \quad (7.22)$$

Démonstration. Clairement, si $\mathbf{m}$ est une matrice de permutation, on a bien $\mathbf{m}_i \in \Delta$ et $\mathbf{m}_j \in \Delta$ et la condition est bien respectée.

Pour le sens inverse, on se concentre sur le cas où pour tout $i, \mathbb{M}_i \in \Delta$. En effet le cas $j, \mathbb{M}_j \in \Delta$ se déduit du fait que $P(\mathbf{m}) = P(\mathbf{m}^T)$.

Comme $\|\mathbf{m}_i\|_1 = \|\mathbf{m}_i\|_2$ est possible uniquement si $\mathbf{m}_i$ a au plus un coefficient non nul et que par hypothèse, $\mathbf{m}_i \in \Delta$, cela implique que ce coefficient vaut 1.

De plus, supposons que deux lignes aient leurs coefficients non nuls dans une même colonne j , i.e. $m_{ij} = 1 = m_{i'j}, i \neq i'$. Alors sur cette colonne, on aurait $\|\mathbf{m}_j\|_1 - \|\mathbf{m}_j\|_2 > 0$. Ce qui est contradictoire avec $P(\mathbf{m}) = 0$. Donc les coefficients non nuls sont dans des colonnes différentes et $\mathbf{m}$ est une matrice de permutation. $\square$

Remarque 7.3. Si $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est telle que pour tout i , $\mathbb{M}_i \in \Delta$, alors

$$P(\mathbf{m}) = 2d - \sum_{i=1}^d \|\mathbf{m}_i\|_2 - \sum_{j=1}^d \|\mathbf{m}_j\|_2 \quad (7.23)$$

Ainsi, le problème s'écrit comme

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p \times p}, \mathbf{M}: \mathbb{M}_i \in \Delta, P(\mathbf{M})=0} \max_{\mathbf{y} \in \Delta} f(\mathbf{y}, \beta; \mathbf{XMP}) \quad (7.24)$$

Alors, pour λ assez grand, on peut montrer que c'est équivalent au problème

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p \times p}, \mathbf{M}: \mathbb{M}_i \in \Delta} \max_{\mathbf{y} \in \Delta} f(\mathbf{y}, \beta; \mathbf{XMP}) - \sum_{i=1}^d \|\mathbf{M}_i\|_2 - \sum_{j=1}^d \|\mathbf{M}_j\|_2 \quad (7.25)$$

Remarque 7.4. En fait, on pourrait réécrire la matrice $\mathbf{MP}$ comme directement une matrice $\mathbf{P}$ telle que ses colonnes appartiennent à Δ et $P(\mathbf{P}) = 0$ pour obtenir une matrice de projection. La seule différence est que la norme 2 est différentiable partout sauf en $\mathbf{0}$. Alors avec cette formulation, comme la matrice de projection aura des lignes nulles par définition, elle ne sera pas différentiable. A contrario, dans le cas de la matrice de permutation, la fonction sera différentiable. Bien que dans la définition cela ne change rien, pour l'optimisation pratique du critère, les hypothèses de différentiabilité permettent souvent de simplifier les choses.

Remarque pratique

D'un point de vue pratique, la méthode peut prendre beaucoup de temps sur de très grands jeux de données. Une possibilité pour simplifier les calculs est de choisir dans un bloc (si la structure se décompose ainsi) les caractéristiques à mesurer avec les moins bonnes capacités. Cette approche plus rapide à mettre en oeuvre, en comparaison du problème en équation (7.24), permet d'avoir une première idée rapide des gains possibles avec l'optimisation des contrôles.

Aubes Fan : BLN 26

Nous considérons ici les données du balloon 26 présentées en section 1.4.2. Sur cet exemple, nous allons évaluer les performances de notre approximations, i.e. en résolvant le problème défini à l'équation (7.24), en comparaison de la méthode simplifiée qui consiste à sélectionner les caractéristiques avec les plus petites capacités. On obtient alors le graphique en figure 7.12.

On observe que les deux méthodes donnent des résultats très proches excepté pour le nombre de variables à mesurer 7. Lorsque l'on regarde les variables sélectionnées à chaque étape, on voit alors que bien que les capacités les plus faibles sont celles correspondantes aux sections 3 et 8. Or, une étude plus détaillée des caractéristique sélectionnées (c.f. Figure 7.13), montre que dans le cas de la selection avec 7 variables, la section n°3 n'est pas sélectionnée comme à mesurer. Il est donc logique que le résultat soit moins bon. Une autre situation problématique est la situation avec une seule variable où ni la section 3 ni la section 8 ne sont à mesurer selon le résultat de notre optimisation.

En dehors de ces deux cas, notre approche de sélection semble donc particulièrement adaptée sur cet exemple. De plus notre méthode invite à ne mesurer que deux sections. Cependant, comme elles ne sont pas fortement corrélées à toutes les autres sections, d'un point de vue industriel, il est difficile de justifier ce choix.

Bien que sur ce jeu de données, les variables soient plutôt fortement dépendantes entre elles, dans le cas général ce n'est pas le cas. Ainsi, pour s'assurer que les variables que l'on mesure sont bien dépendantes des variables à prédire, on utilise une méthode de classification pour rassembler les caractéristiques dépendantes entre elles, puis dans chaque bloc, on choisit une variable à mesurer en fonction des capacités dans le bloc.

On peut de plus comparer cette méthode avec la méthode actuelle basée uniquement sur les corrélations. On obtient alors la figure 7.14. Dans ce cas, on observe que la méthode basée sur la capacité donne de meilleurs résultats que la méthode basée sur la corrélation.

Aubes Fan : BLN 26 et 36

On considère maintenant le cas plus complexe de la combinaison des balloons 26 et 36. Dans ce cas, pour réduire les temps de calcul, on considère simplement la méthode qui consiste à choisir les sections avec les meilleures capacités bivariées. Pour estimer ces capacités, on utilise la méthode faisant intervenir une copule et l'indice basé sur les taux de conformité comme présentée en section 6.1. Néanmoins, ici les taux de non conformité sont souvent tellement faibles et l'hypothèse d'une copule Gaussienne pour les données n'est pas rejetée. On utilise alors le fait que pour une copule gaussienne, qui correspond bien aux données bivariées,

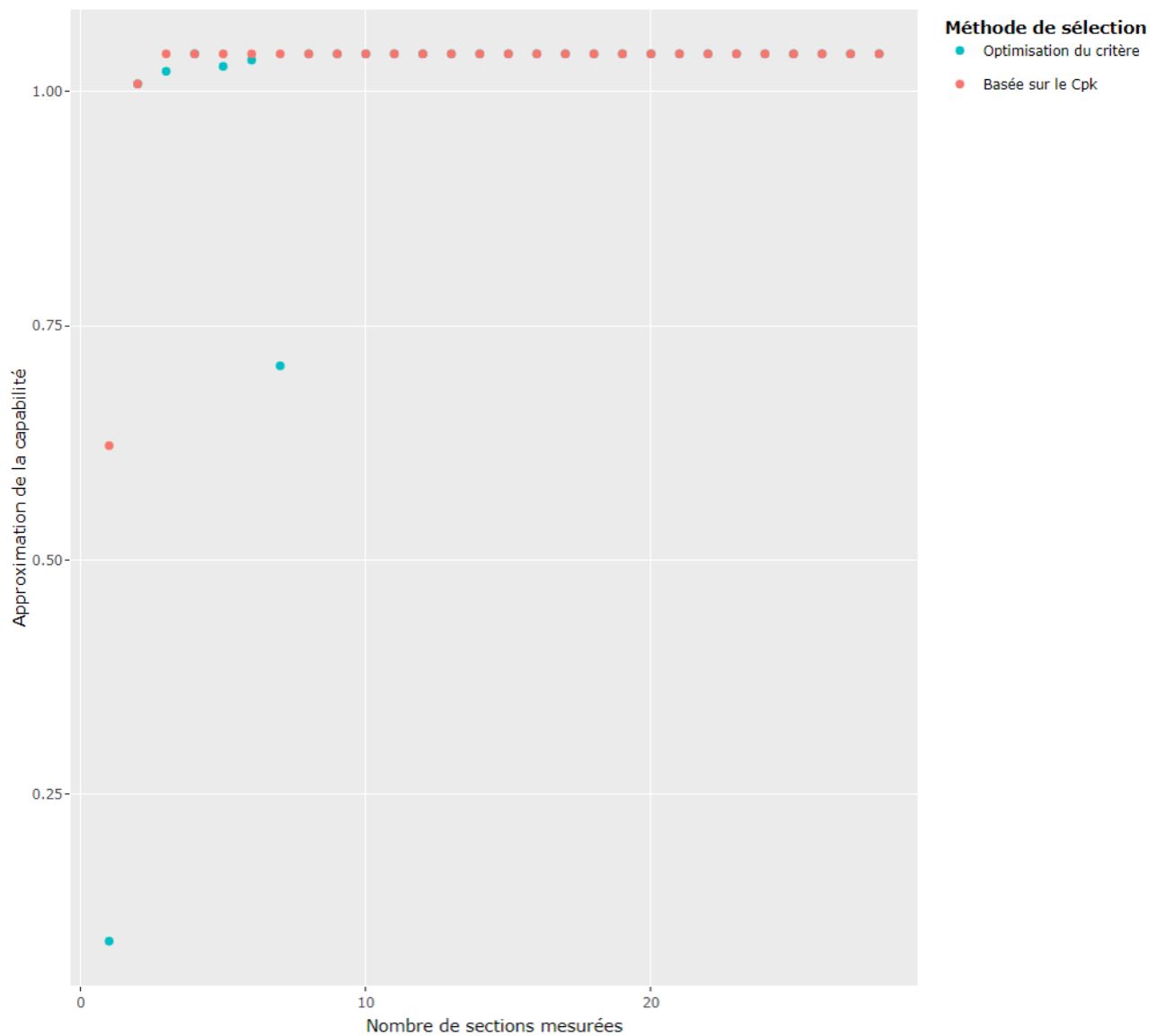


FIGURE 7.12 – Comparaison en fonction du nombre de caractéristiques à sélectionner de l'approximation du Cpk pour le choix basé sur la capacité et celui obtenu par optimisation du critère

les queues de distributions sont indépendantes (Joe, 2014). On peut alors facilement calculer la probabilité de conformité comme le produit des probabilités univariées.

Pour la méthode basée sur la corrélation, on utilise la corrélation des distances (c.f. Section 2.3.2), qui peut être vue comme une généralisation du coefficient de corrélation de Pearson dans un cadre multivarié.

On obtient alors la figure 7.15. Sur cet exemple, plus complexe, on observe à nouveau que la méthode de sélection la plus performante est celle basée sur la capacité.

En pratique, les experts métiers avaient décidés pour des raisons pratiques de mesurer 11 sections, alors qu'il aurait été possible, en se basant uniquement sur les corrélations, de choisir seulement 5 sections, valeur plébiscitée par le statisticien qui avait participé à l'étude. De plus, lorsque l'on regarde les résultats de notre étude, on observe que choisir 5 sections permettrait aussi d'avoir un procédé échantillonné avec une capacité presque égale à celle du procédé sans échantillonnage. Dans le cas particulier des 11 sections, les capacités estimées pour les deux approches sont les mêmes.

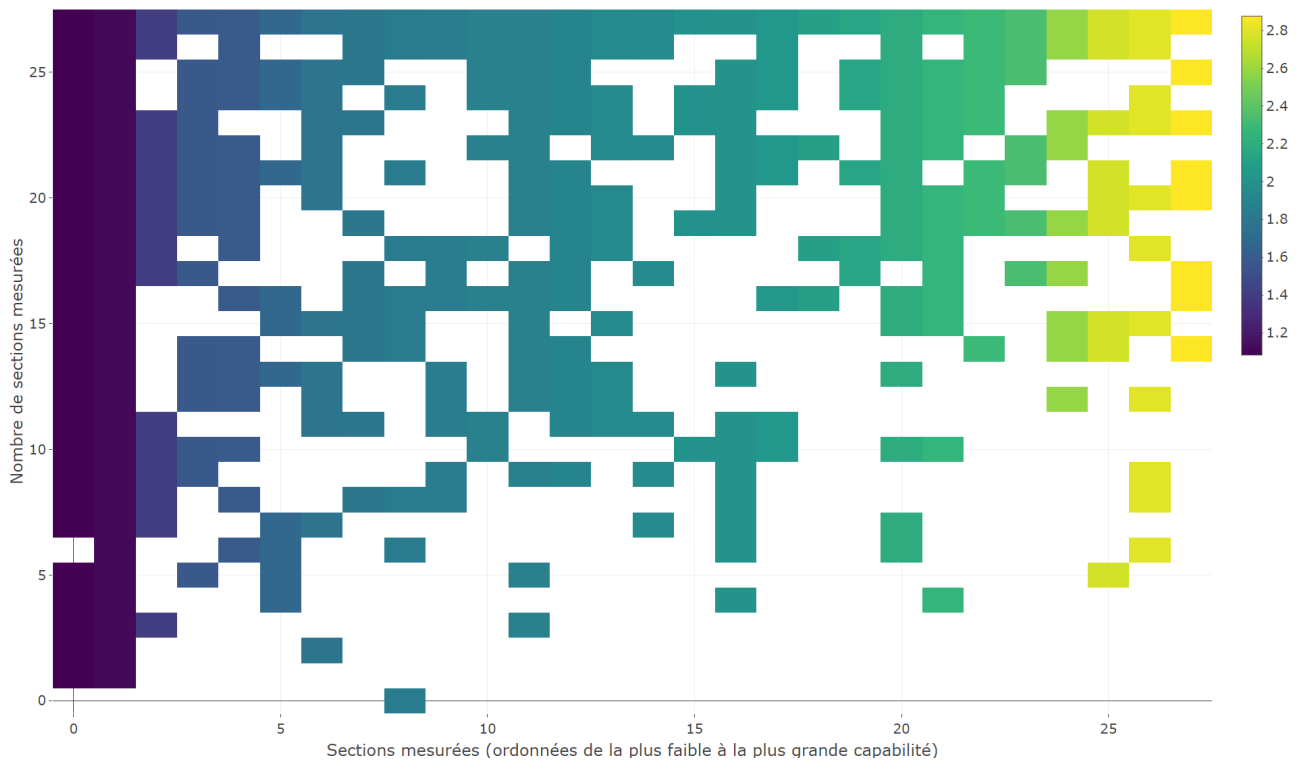


FIGURE 7.13 – Affichage des capacités univariées des sections sélectionnées pour différents nombres de sections.

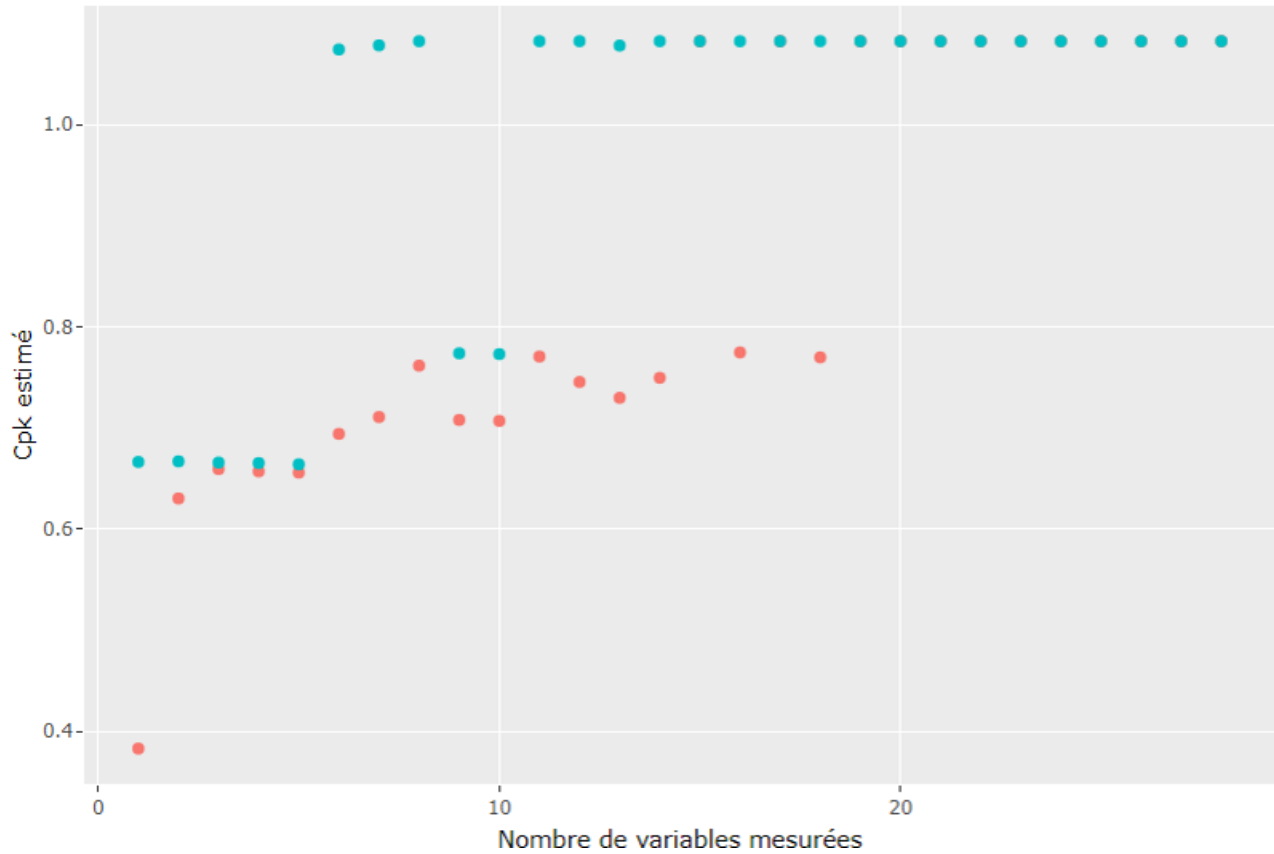


FIGURE 7.14 – Comparaison de la capacité du procédé de contrôle du ballon 26, pour la sélection basée sur les corrélations (rouge) et celle basée sur la capacité (bleue).

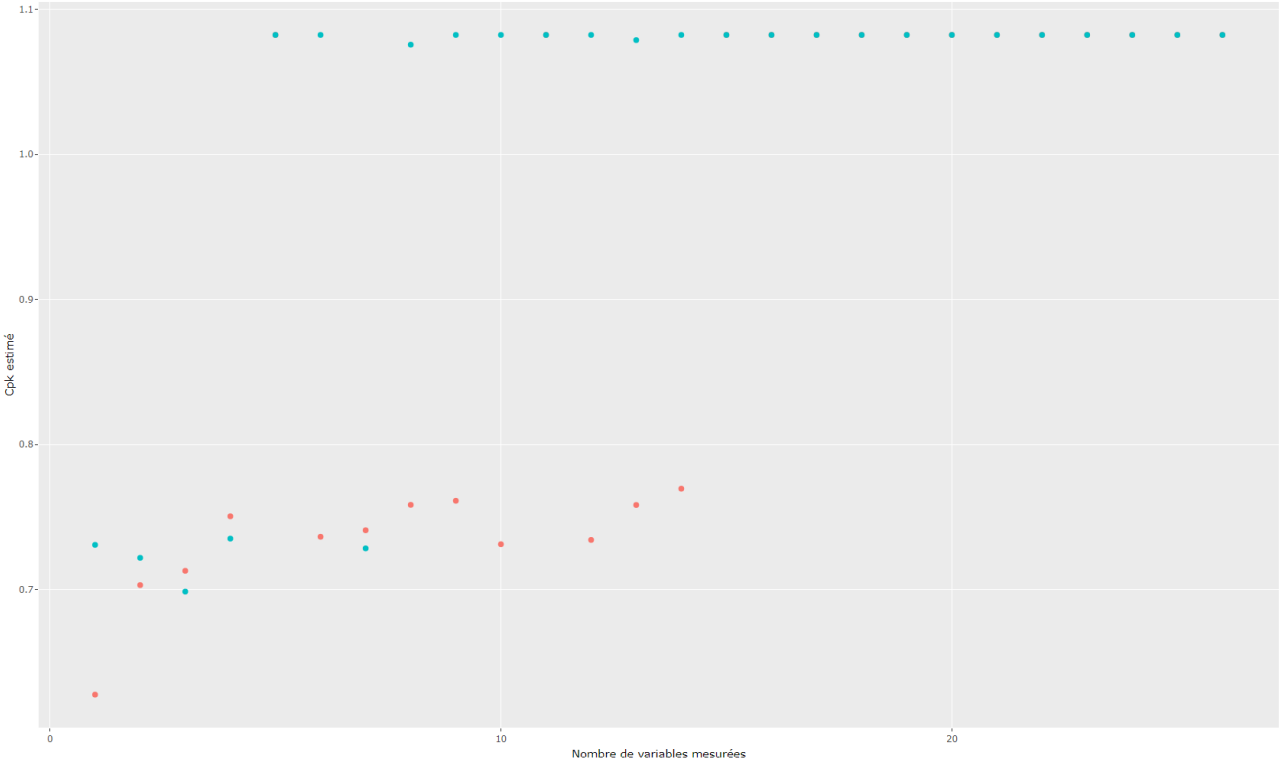


FIGURE 7.15 – Comparaison de la capacité du procédé de contrôle du balloon 26 et 36 pour la sélection basée sur les corrélations (rouge) et celle basée sur la capacité (bleue).

Conclusion

Les apports

Dans ce manuscrit, nous nous sommes principalement concentrés sur l'étude de la structure de dépendance entre les mesures des caractéristiques sur les pièces de moteurs d'avion. Pour ce faire, nous regardons le graphe formé par les dépendances entre deux caractéristiques. Nous formons alors des groupes de caractéristiques ayant un comportement similaire. Puis, dans un deuxième temps, nous proposons une modélisation plus fine de la structure de dépendance entre les caractéristiques à l'aide de la notion de copules. Les modélisations ainsi obtenues ont permis de calculer la probabilité de produire une pièce conforme à ses exigences sans retouches. De plus en nous basant sur une simplification de la structure de dépendance, nous proposons un critère d'aide à la décision pour optimiser les procédures de contrôle des pièces.

Cette thèse présente plusieurs contributions théoriques sur l'étude des graphes aléatoires. En particulier, sur la famille de graphes aléatoires appelée *stochastic block model*. Ces modèles de graphes ont la particularité que les nœuds peuvent être partitionnés en groupes, tels que les nœuds dans un même bloc ont le même comportement moyen. Les travaux sur ces modèles se décomposent en deux parties. Dans la première partie, nous proposons une nouvelle famille de critères pour l'estimation de la structure de groupes ainsi que les paramètres de ces groupes. Cette nouvelle famille est motivée par le fait que la méthode d'estimation classique de ces modèles est très sensible à certaines mauvaises spécifications du modèle, telles que la présence de valeurs aberrantes. A contrario, notre méthode basée sur les divergences, comme par exemple la distance de Hellinger, permet un gain important en robustesse sur les méthodes de la littérature. Nous avons alors étudié les propriétés asymptotiques des estimateurs obtenus en optimisant notre critère et nous avons montré leur convergence. Afin que notre approche puisse être utilisée, nous avons aussi développé une méthode d'estimation pour nos critères et une méthode pour sélectionner le nombre de paramètres du modèle. Dans la seconde partie, nous avons essayé de mieux comprendre les propriétés de deux méthodes classiques de la littérature : la modularité et la vraisemblance profilée. La modularité est une méthode de partitionnement extrêmement rapide pouvant être utilisée sur de très grands graphes. Cependant, elle est connue pour ne pas permettre de retrouver la structure de blocs dans tous les cas. Afin de mieux comprendre son fonctionnement et de proposer des améliorations, nous l'avons étudiée ainsi que différentes variantes, en utilisant son lien avec la vraisemblance d'un modèle de graphes aléatoires particuliers. Quant à la vraisemblance profilée, nous avons montré que si l'on maximisait celle de modèles particuliers, comme les SBM Poisson ou gaussien, sous certaines hypothèses, malgré que le graphe réel ne soit pas dans le modèle choisi, la méthode est tout de même capable d'estimer correctement la structure de blocs. Ces méthodes ont ensuite été utilisées sur des données de production pour mieux comprendre les procédés de fabrication. Des méthodes issues de la littérature des copules et en particulier les copules arborescentes ont alors été considérées pour raffiner la modélisation et estimer avec précision la probabilité de produire une pièce selon ses exigences, sans avoir besoin de la retoucher.

Les perspectives

Ce travail laisse de nombreuses perspectives. Tout d'abord, notre méthode basée sur les divergences développée au chapitre 4, en comparaison avec les méthodes basées sur la vraisemblance, a deux limites. La première, est qu'en fonction du choix de la divergence, son temps de calcul peut prendre plusieurs heures sur des graphes avec plusieurs centaines de nœuds, là où une méthode alternative de la littérature prendrait une dizaine de minutes. Ainsi, la recherche d'une meilleure méthode d'optimisation est une suite importante. De plus, pour s'assurer que le modèle estimé correspond bien aux données, dans la littérature, il existe des tests comme le rapport de vraisemblance (Y. X. R. Wang et P. J. Bickel, 2017). Dans le cas de certains estimateurs de divergences, il existe aussi des tests pour juger de la pertinence du modèle estimé (Broniatowski et Keziou, 2009). Cependant, dans le cas des graphes, les tests basés sur les divergences ne sont pas directement généralisables et un travail supplémentaire est nécessaire.

Dans le cadre des travaux du chapitre 5, nous avons notamment étudié différentes méthodes basées sur la vraisemblance de profile. Nous avons montré la convergence théorique de l'estimateur de la structure de blocs en présence de certaines mauvaises spécifications du modèle. Cependant, le calcul de cet estimateur est NP-difficile et des approximations variationnelles sont utilisées en pratique (Vu et al., 2013). Aussi, pour s'assurer que les propriétés de robustesse ne sont pas seulement théoriques, mais que les méthodes d'estimation en bénéficient elles aussi, une analyse plus complète est nécessaire.

De plus, la méthode d'estimation des vines a encore de nombreuses possibilités d'améliorations. D'une part, pour être capable d'approximer un maximum de distributions. Pour cela, une possibilité est notamment de remplacer les copules bivariées par des mélanges de copules ou directement d'estimer un mélange de vine copula. Enfin, même si d'un point de vue théorique, au sens du résultat de (Mroz et al., 2021), toutes les structures de vine sont équivalentes, en pratique ce n'est pas le cas (Kraus et Czado, 2017). Ainsi, une perspective serait de développer une nouvelle procédure pour estimer la structure de vine. Cette dernière étant liée aux DAG (Pircalabelu, Claeskens et Gijbels, 2017; Müller et Czado, 2018), une approche possible serait de regarder dans la vaste littérature (Yu et al., 2019; Lachapelle et al., 2020), s'il existe une méthode pouvant être utilisée.

Bibliographie

Graphes Déterministes et Aléatoires

- Abbe, Emmanuel (2018). « Community Detection and Stochastic Block Models : Recent Developments ». *Journal of Machine Learning Research* 18.177, p. 1-86 (cf. p. 81).
- Acharya, Jayadev et al. (2022). « Robust Estimation for Random Graphs ». *Proceedings of Thirty Fifth Conference on Learning Theory*. PMLR, p. 130-166 (cf. p. 82, 96).
- Aicher, C., A. Z. Jacobs et A. Clauset (2015). « Learning latent block structure in weighted networks ». *Journal of Complex Networks* 3.2, p. 221-248 (cf. p. 82).
- Airoldi, Edo M et al. (2008). « Mixed Membership Stochastic Blockmodels ». *Advances in Neural Information Processing Systems*. T. 21. Curran Associates, Inc. (cf. p. 28, 82, 133, 150, 157).
- Ambroise, Christophe et Catherine Matias (2012). « New Consistent and Asymptotically Normal Parameter Estimates for Random-Graph Mixture Models ». *Journal of the Royal Statistical Society Series B : Statistical Methodology* 74.1, p. 3-35 (cf. p. 82).
- Amini, Arash A. et al. (2013). « Pseudo-likelihood methods for community detection in large sparse networks ». *The Annals of Statistics* 41.4 (cf. p. 144).
- Babkin, Sergii et al. (2020). « Large-scale estimation of random graph models with local dependence ». *Computational Statistics & Data Analysis* 152, p. 107029 (cf. p. 86, 144, 152, 154, 155).
- Barrat, A. et al. (2004). « The architecture of complex weighted networks ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 101.11, p. 3747-3752 (cf. p. 81).
- Berry, Jonathan W. et al. (2011). « Tolerating the community detection resolution limit with edge weighting ». *Physical Review E* 83.5, p. 056119 (cf. p. 119, 124).
- Bertrand, Pierre, Michel Broniatowski et Jean-François Marcotorchino (2022). « Independence versus indetermination : basis of two canonical clustering criteria ». *Advances in Data Analysis and Classification* 16.4, p. 1069-1093 (cf. p. 62, 122, 127, 135).
- Bezdek, James C. (1981). « Objective Function Clustering ». *Pattern Recognition with Fuzzy Objective Function Algorithms*. Sous la dir. de James C. Bezdek. Advanced Applications in Pattern Recognition. Boston, MA : Springer US, p. 43-93 (cf. p. 132).
- Bickel, Peter et al. (2013). « Asymptotic normality of maximum likelihood and its variational approximation for stochastic block-models ». *The Annals of Statistics* 41.4, p. 1922-1943 (cf. p. 30, 82, 84, 133, 146, 159).
- Bickel, Peter J. et Aiyu Chen (2009a). « A nonparametric view of network models and Newman–Girvan and other modularities ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 106.50, p. 21068-21073 (cf. p. 28, 73).
- (2009b). « Supplementary material for : a nonparametric view of network models and Newman–Girvan and other modularities ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 106.50, p. 21068-21073 (cf. p. 138, 139).
- Blondel, Vincent D. et al. (2008). « Fast unfolding of communities in large networks ». *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2008.10, P10008 (cf. p. 27, 82, 119, 121).
- Boutin, Rémi, Charles Bouveyron et Pierre Latouche (2023). « Embedded topics in the stochastic block model ». *Statistics and Computing* 33.5, p. 95 (cf. p. 81, 82).
- Brandes, Ulrik et al. (2008). « On Modularity Clustering ». *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering* 20.2, p. 172-188 (cf. p. 27).
- Cai, T. Tony et Xiaodong Li (2015). « Robust and computationally feasible community detection in the presence of arbitrary outlier nodes ». *The Annals of Statistics* 43.3 (cf. p. 38, 73, 82).
- Chen, Mingming, Konstantin Kuzmin et Boleslaw K. Szymanski (2014). « Extension of Modularity Density for Overlapping Community Structure ». *2014 IEEE/ACM International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining (ASONAM 2014)*, p. 856-863 (cf. p. 132).
- Chen, Yudong, Xiaodong Li et Jiaming Xu (2018). « Convexified modularity maximization for degree-corrected stochastic block models ». *The Annals of Statistics* 46.4 (cf. p. 131, 144).
- Choi, D. S., P. J. Wolfe et E. M. Airoldi (2012). « Stochastic blockmodels with a growing number of classes ». *Biometrika* 99.2, p. 273-284 (cf. p. 30, 59, 74, 82, 83, 87, 144, 151, 159).
- Conde-Céspedes, Patricia (2013). « Modélisations et extensions du formalisme de l'Analyse Relationnelle Mathématique à la modularisation des grands graphes ». PhD Thesis. Paris 6 (cf. p. 128).
- Conde-Céspedes, Patricia, Jean-François Marcotorchino et Emmanuel Viennet (2017). « Comparison of Linear Modularization Criteria Using the Relational Formalism, an Approach to Easily Identify Resolution Limit ». *Advances in Knowledge Discovery and Management : Volume 6. Studies in Computational Intelligence*. Cham : Springer International Publishing, p. 101-120 (cf. p. 119, 122, 123, 127).

- Daudin, J.-J., F. Picard et S. Robin (2008). « A mixture model for random graphs ». *Statistics and Computing* 18.2, p. 173-183 (cf. p. 30, 82, 133, 134, 144).
- Daudin, J.-J., L. Pierre et C. Vacher (2010). « Model for Heterogeneous Random Networks Using Continuous Latent Variables and an Application to a Tree-Fungus Network ». *Biometrics* 66.4, p. 1043-1051 (cf. p. 133).
- De Nicola, Giacomo, Benjamin Sischka et Göran Kauermann (2022). « Mixture models and networks : The stochastic blockmodel ». *Statistical Modelling* 22.1-2, p. 67-94 (cf. p. 82).
- Decelle, Aurelien et al. (2011). « Asymptotic analysis of the stochastic block model for modular networks and its algorithmic applications ». *Physical Review E* 84.6, p. 066106 (cf. p. 119).
- Erdős, P. et A. Rényi (1959). « On random graphs. I. ». *Publicationes Mathematicae Debrecen* 6.3-4, p. 290-297 (cf. p. 81).
- Fellows, Ian et Mark S. Handcock (2012). « Exponential-family Random Network Models ».
- Fortunato, Santo (2010). « Community detection in graphs ». *Physics Reports* 486.3, p. 75-174 (cf. p. 28).
- Fortunato, Santo et Marc Barthélemy (2007). « Resolution limit in community detection ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 104.1, p. 36-41 (cf. p. 119, 123, 124, 144).
- Frieze, Alan et Michał Karoński (2015). *Introduction to Random Graphs*. 1^{re} éd. Cambridge University Press (cf. p. 121).
- Funke, Thorben et Till Becker (2019). « Stochastic block models : A comparison of variants and inference methods ». *PLOS ONE* 14.4, e0215296 (cf. p. 76, 82).
- Gao, Chao et John Lafferty (2017). « Testing Network Structure Using Relations Between Small Subgraph Probabilities ». *arXiv :1704.06742 [cs, math, stat]* (cf. p. 82).
- Giraud, Christophe et Nicolas Verzelen (2019). « Partial recovery bounds for clustering with the relaxed K-means ». *Mathematical Statistics and Learning* 1.3, p. 317-374 (cf. p. 82, 84, 144, 147, 148, 152).
- Girvan, M. et M. E. J. Newman (2002). « Community structure in social and biological networks ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 99.12, p. 7821-7826 (cf. p. 73, 82, 119).
- Gómez, Daniel et al. (2016). « A new modularity measure for Fuzzy Community detection problems based on overlap and grouping functions ». *International Journal of Approximate Reasoning* 74, p. 88-107 (cf. p. 132).
- Gómez, Sergio, Pablo Jensen et Alex Arenas (2009). « Analysis of community structure in networks of correlated data ». *Physical Review E* 80.1, p. 016114 (cf. p. 129).
- Gulikers, Lennart, Marc Lelarge et Laurent Massoulié (2018). « An impossibility result for reconstruction in the degree-corrected stochastic block model ». *The Annals of Applied Probability* 28.5 (cf. p. 124, 150).
- Handcock, Mark S. et Krista J. Gile (2010). « Modeling social networks from sampled data ». *The Annals of Applied Statistics* 4.1 (cf. p. 81).
- Holland, Paul W., Kathryn Blackmond Laskey et Samuel Leinhardt (1983). « Stochastic blockmodels : First steps ». *Social Networks* 5.2, p. 109-137 (cf. p. 27, 81, 119, 120, 145).
- Hollocou, Alexandre, Thomas Bonald et Marc Lelarge (2019). « Modularity-based Sparse Soft Graph Clustering ». *Proceedings of the Twenty-Second International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. T. 89. Proceedings of Machine Learning Research. PMLR, p. 323-332 (cf. p. 27, 64, 82, 119, 131-133).
- Huang, Sihan, Haolei Weng et Yang Feng (2022). « Spectral Clustering via Adaptive Layer Aggregation for Multi-Layer Networks ». *Journal of Computational and Graphical Statistics* 0.0, p. 1-15 (cf. p. 97).
- Jeong, H. et al. (2000). « The large-scale organization of metabolic networks ». *Nature* 407.6804, p. 651-654 (cf. p. 25).
- Karrer, Brian et M. E. J. Newman (2011). « Stochastic blockmodels and community structure in networks ». *Physical Review E* 83.1, p. 016107 (cf. p. 27, 82, 85, 119, 120, 124, 145, 147, 148).
- Kumpula, J. M. et al. (2007). « Limited resolution in complex network community detection with Potts model approach ». *The European Physical Journal B* 56.1, p. 41-45 (cf. p. 124).
- Laarhoven, Twan van et Elena Marchiori (2014). « Axioms for Graph Clustering Quality Functions ». *Journal of Machine Learning Research* 15.6, p. 193-215 (cf. p. 119, 127, 128, 135, 139).
- Lancichinetti, Andrea et Santo Fortunato (2011). « Limits of modularity maximization in community detection ». *Physical Review E* 84.6, p. 066122 (cf. p. 123).
- Latouche, P, E Birmelé et C Ambroise (2012). « Variational Bayesian inference and complexity control for stochastic block models ». *Statistical Modelling* 12.1, p. 93-115 (cf. p. 82, 159).
- (2011). « Overlapping stochastic block models with application to the French political blogosphere ». *The Annals of Applied Statistics* 5.1, p. 309-336 (cf. p. 82, 86, 133, 157).
- Latouche, Pierre, Etienne Birmelé et Christophe Ambroise (2014). « Model selection in overlapping stochastic block models ». *Electronic Journal of Statistics* 8.1, p. 762-794 (cf. p. 82).
- Lei, Jing et Alessandro Rinaldo (2015). « Consistency of spectral clustering in stochastic block models ». *The Annals of Statistics* 43.1 (cf. p. 144).
- Li, Xiaodong, Yudong Chen et Jiaming Xu (2021). « Convex Relaxation Methods for Community Detection ». *Statistical Science* 36.1, p. 2-15 (cf. p. 29, 119).
- Liu, Allen et Ankur Moitra (2022). « Minimax Rates for Robust Community Detection ». *2022 IEEE 63rd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)*. Denver, CO, USA : IEEE, p. 823-831 (cf. p. 82).
- Ludkin, Matthew (2020). « Inference for a generalised stochastic block model with unknown number of blocks and non-conjugate edge models ». *Computational Statistics & Data Analysis* 152, p. 107051 (cf. p. 77, 82).
- Makarychev, Konstantin, Yury Makarychev et Aravindan Vijayaraghavan (2016). « Learning Communities in the Presence of Errors ». *Conference on Learning Theory*. PMLR, p. 1258-1291 (cf. p. 38, 60, 73, 82, 83, 95-97, 100, 153, 154).

- Mariadassou, Mahendra, Stéphane Robin et Corinne Vacher (2010). « Uncovering latent structure in valued graphs : A variational approach ». *The Annals of Applied Statistics* 4.2 (cf. p. 82).
- Massoulié, Laurent (2014). « Community detection thresholds and the weak Ramanujan property ». *Proceedings of the forty-sixth annual ACM symposium on Theory of computing*. New York New York : ACM, p. 694-703 (cf. p. 38, 82).
- Meunier, David (2009). « Hierarchical modularity in human brain functional networks ». *Frontiers in Neuroinformatics* 3 (cf. p. 25).
- Nepusz, Tamás et al. (2008). « Fuzzy communities and the concept of bridgeness in complex networks ». *Physical Review E* 77.1, p. 016107 (cf. p. 132, 133).
- Newman, M. E. J. (2001). « The structure of scientific collaboration networks ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 98.2, p. 404-409 (cf. p. 81).
- (2006). « Finding community structure in networks using the eigenvectors of matrices ». *Physical Review E* 74.3, p. 036104 (cf. p. 73).
- (2016). « Equivalence between modularity optimization and maximum likelihood methods for community detection ». *Physical Review E* 94.5, p. 052315 (cf. p. 62, 81, 119, 122, 130, 131, 135, 144).
- Newman, M. E. J. et Aaron Clauset (2016). « Structure and inference in annotated networks ». *Nature Communications* 7.1, p. 11863 (cf. p. 82).
- Newman, M. E. J. et M. Girvan (2004). « Finding and evaluating community structure in networks ». *Physical Review E* 69.2, p. 026113 (cf. p. 26, 51, 119, 121, 122, 148).
- Ng, Tin Lok James et Thomas Brendan Murphy (2021). « Weighted stochastic block model ». *Statistical Methods & Applications* 30.5, p. 1365-1398 (cf. p. 32, 82, 83).
- Peixoto, Tiago P. (2018). « Nonparametric weighted stochastic block models ». *Physical Review E* 97.1, p. 012306 (cf. p. 82).
- Pirclabelu, Eugen et Gerda Claeskens (2016). « Focused model selection for social networks ». *Social Networks* 46, p. 76-86 (cf. p. 159).
- Rastelli, Riccardo, Nial Friel et Adrian E. Raftery (2016). « Properties of latent variable network models ». *Network Science* 4.4, p. 407-432 (cf. p. 144).
- Reichardt, Jörg et Stefan Bornholdt (2006). « Statistical mechanics of community detection ». *Physical Review E* 74.1, p. 016110 (cf. p. 81, 122).
- Rohe, Karl, Sourav Chatterjee et Bin Yu (2011). « Spectral clustering and the high-dimensional stochastic blockmodel ». *The Annals of Statistics* 39.4 (cf. p. 28, 82).
- Rohe, Karl, Tai Qin et Haoyang Fan (2014). « The highest dimensional stochastic blockmodel with a regularized estimator ». *statistica Sinica* (cf. p. 28, 31, 59, 81, 119, 126, 150).
- Saldaña, D. Franco, Yi Yu et Yang Feng (2017). « How Many Communities Are There? ». *Journal of Computational and Graphical Statistics* 26.1, p. 171-181 (cf. p. 97).
- Santamaría, Rodrigo et Roberto Therón (2008). « Overlapping Clustered Graphs : Co-authorship Networks Visualization ». *Smart Graphics*. Sous la dir. d'Andreas Butz et al. Lecture Notes in Computer Science. Berlin, Heidelberg : Springer, p. 190-199 (cf. p. 119).
- Schweinberger, Michael (2020). « Consistent structure estimation of exponential-family random graph models with block structure ». *Bernoulli* 26.2, p. 1205-1233 (cf. p. 32, 82, 97, 144, 153).
- Schweinberger, Michael et Mark S. Handcock (2015). « Local Dependence in Random Graph Models : Characterization, Properties and Statistical Inference ». *Journal of the Royal Statistical Society Series B : Statistical Methodology* 77.3, p. 647-676 (cf. p. 144, 152, 159).
- Seshadhri, C., Tamara G. Kolda et Ali Pinar (2012). « Community structure and scale-free collections of Erdős-Rényi graphs ». *Physical Review E* 85.5, p. 056109 (cf. p. 119).
- Stephan, Ludovic et Laurent Massoulié (2019). « Robustness of Spectral Methods for Community Detection ». *Proceedings of the Thirty-Second Conference on Learning Theory*. PMLR, p. 2831-2860 (cf. p. 82).
- Traag, V. A., P. Van Dooren et Y. Nesterov (2011). « Narrow scope for resolution-limit-free community detection ». *Physical Review E* 84.1, p. 016114 (cf. p. 26, 119, 122, 127, 128).
- Tse, Chi K., Jing Liu et Francis C. M. Lau (2010). « A network perspective of the stock market ». *Journal of Empirical Finance* 17.4, p. 659-667 (cf. p. 119).
- Vu, Duy Q., David R. Hunter et Michael Schweinberger (2013). « Model-based clustering of large networks ». *The Annals of Applied Statistics* 7.2, p. 1010-1039 (cf. p. 226).
- Wang, Jiangzhou et al. (2023). « Fast Network Community Detection With Profile-Pseudo Likelihood Methods ». *Journal of the American Statistical Association* 118.542, p. 1359-1372 (cf. p. 84, 92).
- Wang, Y. X. Rachel et Peter J. Bickel (2017). « Likelihood-based model selection for stochastic block models ». *The Annals of Statistics* 45.2 (cf. p. 82, 100, 225).
- Yan, Xiaoran (2016). « Bayesian model selection of stochastic block models ». *2016 IEEE/ACM International Conference on Advances in Social Networks Analysis and Mining (ASONAM)*, p. 323-328 (cf. p. 82, 159).
- Zhang, Linfan et Arash A. Amini (2023). « Adjusted chi-square test for degree-corrected block models ». *The Annals of Statistics* 51.6 (cf. p. 82).
- Zhao, Yunpeng, Elizaveta Levina et Ji Zhu (2012). « Consistency of community detection in networks under degree-corrected stochastic block models ». *The Annals of Statistics* 40.4 (cf. p. 27, 30, 31, 51, 62, 65, 66, 78, 82, 87, 101, 119-121, 124-126, 128, 135, 137, 138, 144-151, 159, 163, 164, 166, 171).
- Žiberna, Aleš (2007). « Generalized blockmodeling of valued networks ». *Social Networks* 29.1, p. 105-126 (cf. p. 81).

Statistique

- Al Mohamad, Diaa (2018). « Towards a better understanding of the dual representation of phi divergences ». *Statistical Papers* 59.3, p. 1205-1253 (cf. p. 37, 38, 78, 88, 99).
- Ali, S. M. et S. D. Silvey (1966). « A General Class of Coefficients of Divergence of One Distribution from Another ». *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Methodological)* 28.1, p. 131-142 (cf. p. 34).
- Bach, Francis R. (2008). « Consistency of the Group Lasso and Multiple Kernel Learning ». *Journal of Machine Learning Research* 9.40, p. 1179-1225 (cf. p. 219).
- Basu, Ayanendranath, Ian R. Harris et al. (1998). « Robust and efficient estimation by minimising a density power divergence ». *Biometrika* 85.3, p. 549-559 (cf. p. 35, 60, 86, 93).
- Basu, Ayanendranath et Bruce G. Lindsay (1994). « Minimum disparity estimation for continuous models : Efficiency, distributions and robustness ». *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* 46.4, p. 683-705 (cf. p. 37, 74, 78, 88).
- Basu, Ayanendranath, Hiroyuki Shioya et Chanseok Park (2011). *Statistical Inference : The Minimum Distance Approach*. CRC Press (cf. p. 85).
- Beran, Rudolf (1977). « Minimum Hellinger Distance Estimates for Parametric Models ». *The Annals of Statistics* 5.3 (cf. p. 36, 76).
- Biernacki, C., G. Celeux et G. Govaert (2000). « Assessing a mixture model for clustering with the integrated completed likelihood ». *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 22.7, p. 719-725 (cf. p. 82, 159).
- Bouezmarni, Taoufik et Jean-Marie Rolin (2003). « Consistency of the beta kernel density function estimator ». *Canadian Journal of Statistics* 31.1, p. 89-98 (cf. p. 105).
- Broniatowski, Michel et Amor Keziou (2006). « Minimization of divergences on sets of signed measures ». *Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica* 403-442.4, p. 403-442. (Cf. p. 37, 83, 93).
- (2009). « Parametric estimation and tests through divergences and the duality technique ». *Journal of Multivariate Analysis* 100.1, p. 16-36 (cf. p. 37, 100, 225).
- Broniatowski, Michel et Wolfgang Stummer (2019). « Some Universal Insights on Divergences for Statistics, Machine Learning and Artificial Intelligence ». *Geometric Structures of Information*. Signals and Communication Technology. Cham : Springer International Publishing, p. 149-211 (cf. p. 85).
- Chakraborty, Subrata (2015). « Generating discrete analogues of continuous probability distributions-A survey of methods and constructions ». *Journal of Statistical Distributions and Applications* 2.1, p. 6.
- Chen, Song Xi (2000). « Probability Density Function Estimation Using Gamma Kernels ». *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* 52.3, p. 471-480 (cf. p. 89).
- Chérif-Abdellatif, Badr-Eddine et Pierre Alquier (2018). « Consistency of variational Bayes inference for estimation and model selection in mixtures ». *Electronic Journal of Statistics* 12.2 (cf. p. 159).
- Claeskens, Gerda et Nils Lid Hjort (2001). *Model Selection and Model Averaging*. 1^{re} éd. Cambridge University Press (cf. p. 95).
- Cressie, Noel et Timothy R.C. Read (1984). « Multinomial Goodness-Of-Fit Tests ». *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Methodological)* 46.3, p. 440-464 (cf. p. 85).
- Croux, Christophe et Catherine Dehon (2010). « Influence functions of the Spearman and Kendall correlation measures ». *Statistical Methods & Applications* 19.4, p. 497-515 (cf. p. 58).
- Csiszár, Imre (1963). « Eine informationstheoretische ungleichung und ihre anwendung auf beweis der ergodizitaet von markoffschen ketten ». *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutato Int. Koezl.* 8, p. 85-108 (cf. p. 34).
- (1967). « Information-type measures of difference of probability distributions and indirect observation ». *studia scientiarum Mathematicarum Hungarica* 2, p. 229-318 (cf. p. 74, 83, 85).
- Cutler, Adele et Olga I. Cordero-Braña (1996). « Minimum Hellinger Distance Estimation for Finite Mixture Models ». *Journal of the American Statistical Association* 91.436, p. 1716-1723 (cf. p. 92).
- Daniel, Cuthbert (1976). *Applications of Statistics to Industrial Experimentation*. 1^{re} éd. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley (cf. p. 32).
- Devroye, Luc (1983). « The Equivalence of Weak, Strong and Complete Convergence in L1 for Kernel Density Estimates ». *The Annals of Statistics* 11.3, p. 896-904 (cf. p. 102).
- Dohmen, Klaus (2002). « Bonferroni-Type Inequalities via Chordal Graphs ». *Combinatorics, Probability and Computing* 11.4, p. 349-351 (cf. p. 68, 184).
- Donoho, David L. et Richard C. Liu (1988). « The "Automatic" Robustness of Minimum Distance Functionals ». *The Annals of Statistics* 16.2 (cf. p. 73, 74, 83).
- Duchi, John C., Peter W. Glynn et Hongseok Namkoong (2021). « Statistics of Robust Optimization : A Generalized Empirical Likelihood Approach ». *Mathematics of Operations Research* 46.3, p. 946-969 (cf. p. 32).
- Duchi, John C. et Hongseok Namkoong (2021). « Learning models with uniform performance via distributionally robust optimization ». *The Annals of Statistics* 49.3, p. 1378-1406 (cf. p. 34).
- Ferraris, Cyprien (2024). « Phi Divergence and Consistent Estimation for Stochastic Block Model ». *Data Analysis and Related Applications 3 Theory and Practice – New Approaches*. T. 11 - Big Data, Artificial Intelligence and Data Analysis. ISTE (cf. p. 83, 84, 89, 100).
- Ghosh, Abhik et al. (2017). « A generalized divergence for statistical inference ». *Bernoulli* 23.4A, p. 2746-2783 (cf. p. 35).
- Hampel, Frank R. et al. (2011). *Robust Statistics The Approach Based on Influence Functions*. 1., Auflage. Wiley Series in Probability and Statistics. New York (cf. p. 32).
- Han, Fang et Han Liu (2014). « Scale-Invariant Sparse PCA on High-Dimensional Meta-Elliptical Data ». *Journal of the American Statistical Association* 109.505, p. 275-287 (cf. p. 158).

- Huber, Peter J. (1972). « The 1972 Wald Lecture Robust Statistics : A Review ». *The Annals of Mathematical Statistics* 43.4, p. 1041-1067 (cf. p. 74, 83).
- Huber, Peter J. et Elvezio Ronchetti (2009). *Robust statistics*. 2nd ed. Wiley series in probability and statistics. Hoboken, N.J : Wiley (cf. p. 33, 97, 98).
- Hunter, David (1976). « An Upper Bound for the Probability of a Union ». *Journal of Applied Probability* 13.3, p. 597-603 (cf. p. 183).
- Iliencko, Andrii (2013). « Continuous counterparts of Poisson and binomial distributions and their properties » (cf. p. 130).
- Jiménez, Raúl et Yongzhao Shao (2001). « On robustness and efficiency of minimum divergence estimators ». *Test* 10.2, p. 241-248 (cf. p. 34, 83).
- Kallenberg, Olav (2005). *Probabilistic Symmetries and Invariance Principles*. Probability and Its Applications. New York : Springer-Verlag (cf. p. 28).
- Kohler, Michael et Sophie Langer (2021). « On the rate of convergence of fully connected deep neural network regression estimates ». *The Annals of Statistics* 49.4, p. 2231-2249 (cf. p. 195, 205).
- Kuchibhotla, Arun Kumar et Ayanendranath Basu (2015). « A general set up for minimum disparity estimation ». *Statistics & Probability Letters* 96, p. 68-74 (cf. p. 37, 94).
- Lebarbier, Emilie et Tristan Mary-Huard (2004). *Le critère BIC : fondements théoriques et interprétation*. Technical Report RR-5315. INRIA, p. 17 (cf. p. 18).
- Lin, Lina, Mathias Drton et Ali Shojaie (2016). « Estimation of high-dimensional graphical models using regularized score matching ». *Electronic Journal of Statistics* 10.1, p. 806-854 (cf. p. 144).
- Lindsay, Bruce G. (1994). « Efficiency Versus Robustness : The Case for Minimum Hellinger Distance and Related Methods ». *The Annals of Statistics* 22.2 (cf. p. 33, 34, 60).
- Liu, Rong et Lijian Yang (2008). « Kernel estimation of multivariate cumulative distribution function ». *Journal of Nonparametric Statistics* 20.8, p. 661-677.
- Massart, P. (1990). « The Tight Constant in the Dvoretzky-Kiefer-Wolfowitz Inequality ». *The Annals of Probability* 18.3.
- Mattheou, K., S. Lee et A. Karagrigoriou (2009). « A model selection criterion based on the BHHJ measure of divergence ». *Journal of Statistical Planning and Inference* 139.2, p. 228-235 (cf. p. 60, 93, 94).
- McCulloch, Charles E. et Shayle R. Searle (2000). *Generalized, Linear, and Mixed Models*. 1^{re} éd. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley (cf. p. 29).
- Mohamad, Daa Al et Michel Broniatowski (2019). « A two-step proximal-point algorithm for the calculus of divergence-based estimators in finite mixture models ». *Canadian Journal of Statistics* 47.3, p. 392-408 (cf. p. 34, 92).
- Morales, D., L. Pardo et I. Vajda (1995). « Asymptotic divergence of estimates of discrete distributions ». *Journal of Statistical Planning and Inference* 48.3, p. 347-369 (cf. p. 36).
- Mossel, Elchanan, Joe Neeman et Allan Sly (2015). « Reconstruction and estimation in the planted partition model ». *Probability Theory and Related Fields* 162.3-4, p. 431-461 (cf. p. 82).
- Mourer, Alex (2022). « Sélection et importance de variables en apprentissage automatique ». Theses. Paris 1 - Panthéon-Sorbonne (cf. p. 7).
- Ozturk, Omer et Thomas P. Hettmansperger (1997). « Generalised Weighted Cramer-von Mises Distance Estimators ». *Biometrika* 84.2, p. 283-294 (cf. p. 94).
- Park, Chanseok et Ayanendranath Basu (2004). « Minimum Disparity Estimation : Asymptotic Normality and Breakdown Point Results ». *Bulletin of informatics and cybernetics* 36, p. 19-33 (cf. p. 36, 37).
- Parr, W. C. et T. De Wet (1981). « On minimum cramer-von mises-norm parameter estimation ». *Communications in Statistics - Theory and Methods* 10.12, p. 1149-1166 (cf. p. 83, 86).
- Qiao, Yu et Nobuaki Minematsu (2010). « A Study on Invariance of f-Divergence and Its Application to Speech Recognition ». *IEEE Transactions on Signal Processing* 58.7, p. 3884-3890 (cf. p. 34).
- Rejeb, Sara (2023). « Méthodes d'apprentissage statistique pour l'analyse de données de production et de performance des moteurs d'avion ». Thèse de doctorat. Paris : Sorbonne Université (cf. p. 7, 16).
- Rosenblatt, Murray (1952). « Remarks on a Multivariate Transformation ». *The Annals of Mathematical Statistics* 23.3, p. 470-472 (cf. p. 200).
- Rothman, Adam J., Elizaveta Levina et Ji Zhu (2009). « Generalized Thresholding of Large Covariance Matrices ». *Journal of the American Statistical Association* 104.485, p. 177-186 (cf. p. 158).
- Rubinov, Mikail et Olaf Sporns (2010). « Complex network measures of brain connectivity : Uses and interpretations ». *NeuroImage* 52.3, p. 1059-1069 (cf. p. 119).
- Scott, David W. (2015). *Multivariate Density Estimation : Theory, Practice, and Visualization*. John Wiley & Sons (cf. p. 179).
- Sun, Dongchu et James O Berger (2007). « Objective Bayesian analysis for the multivariate normal model ». *Bayesian Statistics* 8, p. 525-562 (cf. p. 217).
- Toma, Aida (2014). « Model Selection Criteria Using Divergences ». *Entropy* 16.5, p. 2686-2698 (cf. p. 60, 93).
- Toma, Aida et Michel Broniatowski (2011). « Dual divergence estimators and tests : Robustness results ». *Journal of Multivariate Analysis* 102.1, p. 20-36 (cf. p. 34, 37, 99).
- Van der Vaart, A. W. (1998). *Asymptotic Statistics*. Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics. Cambridge : Cambridge University Press (cf. p. 79, 101).
- Vigneau, E. et E. M. Qannari (2003). « Clustering of Variables Around Latent Components ». *Communications in Statistics - Simulation and Computation* 32.4, p. 1131-1150 (cf. p. 155).

- Weissman, Tsachy et al. (2003). « Inequalities for the L1 deviation of the empirical distribution ». *Hewlett-Packard Labs, Tech. Rep* (cf. p. 166).
- Zhang, Huiming et Song Xi Chen (2021). « Concentration Inequalities for Statistical Inference ». *Communications in Mathematical Research* 37.1, p. 1-85 (cf. p. 102, 103, 107, 160, 161).

Indices de Capabilité

- Castagliola, Philippe (1996). « Evaluation of Non-Normal Process Capability Indices Using Burr's Distributions ». *Quality Engineering* 8.4, p. 587-593 (cf. p. 177, 179, 187).
- Chakraborty, Ashis Kumar et Moutushi Chatterjee (2021). *Handbook of Multivariate Process Capability Indices*. New York : Chapman et Hall/CRC (cf. p. 175, 178).
- Chen, Hanfeng (1994). « A multivariate process capability index over a rectangular solid tolerance zone ». *Statistica Sinica* 4.2, p. 749-758 (cf. p. 179).
- Chen, Song Xi (1999). « Beta kernel estimators for density functions ». *Computational Statistics & Data Analysis* 31.2, p. 131-145 (cf. p. 89).
- Clements, John A (1989). « Process capability calculations for non-normal distributions ». *Quality progress* 22, p. 95-100 (cf. p. 177, 178).
- Croquelois, Mathieu et al. (2022). « Process Capability Indices With Student Mixture Models Applied to Aircraft Engines GD&T ». *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 144.10, p. 101008 (cf. p. 14, 15, 52, 175, 176, 182).
- Daniels, Lorraine et al. (2004). « Using Confidence Intervals to Compare Process Capability Indices ». *Quality Engineering* 17.1, p. 23-32 (cf. p. 175).
- Diplaris, S C et M M Sfantsikopoulos (2006). « Process capability requirement under maximum material condition ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B : Journal of Engineering Manufacture* 220.10, p. 1629-1634 (cf. p. 176).
- de-Felipe, David et Ernest Benedito (2017). « A review of univariate and multivariate process capability indices ». *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 92.5-8, p. 1687-1705 (cf. p. 67).
- Ferraris, Cyprien et Mohamed Achibi (2024). « Non-Gaussian Multivariate Process Capability Based on the Copulas Method : An Application to Aircraft Engine Fan Blades ». *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 146.7, p. 071006.
- González, Isabel et Ismael Sánchez (2009). « Capability indices and nonconforming proportion in univariate and multivariate processes ». *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 44.9-10, p. 1036-1050 (cf. p. 67, 178).
- Heavlin, WD (1988). « Statistical properties of capability indices ». *Technical report* 320.
- Kane, Victor E. (1986). « Process Capability Indices ». *Journal of Quality Technology* 18.1, p. 41-52 (cf. p. 14).
- Lépine, Marc Jr. et Antoine S. Tahan (2016). « The Relationship Between Geometrical Complexity and Process Capability ». *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 138.5, p. 051009 (cf. p. 176).
- Polansky, Alan M. (2001). « A Smooth Nonparametric Approach to Multivariate Process Capability ». *Technometrics* 43.2, p. 199-211 (cf. p. 67, 179).
- Shahriari, H, NF Hubele et FP Lawrence (1995). « A multivariate process capability vector ». *Proceedings of the 4th Industrial Engineering Research Conference*. T. 1. Institute of Industrial Engineers Nashville, p. 304-309 (cf. p. 178).
- Shinde, R. L. et K. G. Khadse (2009). « Multivariate process capability using principal component analysis ». *Quality and Reliability Engineering International* 25.1, p. 69-77 (cf. p. 178).
- Taam, Winson, Perla Subbaiah et James W. Liddy (1993). « A note on multivariate capability indices ». *Journal of Applied Statistics* 20.3, p. 339-351 (cf. p. 178).
- Tahan, Antoine S. et Jason Cauvier (2012). « Capability Estimation of Geometrical Tolerance With a Material Modifier by a Hasofer–Lind Index ». *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 134.2, p. 021007 (cf. p. 176).
- Tano, Ingrid et Kerstin Vännman (2013). « A Multivariate Process Capability Index Based on the First Principal Component ». *Quality and Reliability Engineering International* 29.7, p. 987-1003 (cf. p. 178).
- Wang, F. K. et James C. Chen (1998). « Capability index using principal components analysis ». *Quality Engineering* 11.1, p. 21-27 (cf. p. 178).
- Wierda, S. J. (1994). « Multivariate statistical process control—recent results and directions for future research ». *Statistica Neerlandica* 48.2, p. 147-168 (cf. p. 178).

Copules

- Aas, Kjersti et al. (2009). « Pair-copula constructions of multiple dependence ». *Insurance : Mathematics and Economics* 44.2, p. 182-198 (cf. p. 200, 201).
- Bedford, Tim et Roger M. Cooke (2002). « Vines : A New Graphical Model for Dependent Random Variables ». *The Annals of Statistics* 30.4, p. 1031-1068 (cf. p. 45, 46, 175, 181, 182, 196, 206).
- Brechmann, E. C., C. Czado et K. Aas (2012). « Truncated regular vines in high dimensions with application to financial data ». *Canadian Journal of Statistics* 40.1, p. 68-85 (cf. p. 46).
- Breymann, W., A. Dias et P. Embrechts (2003). « Dependence structures for multivariate high-frequency data in finance ». *Quantitative Finance* 3.1, p. 1-14 (cf. p. 203).
- Chang, Bo, Shenyi Pan et Harry Joe (2019). « Vine copula structure learning via Monte Carlo tree search ». *The 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. PMLR, p. 353-361 (cf. p. 49, 200).

- Chang, Yale et al. (2016). « A Robust-Equitable Copula Dependence Measure for Feature Selection ». T. 51. Proceedings of Machine Learning Research. Cadiz, Spain : PMLR, p. 84-92 (cf. p. 35).
- Czado, Claudia (2010). « Pair-Copula Constructions of Multivariate Copulas ». *Copula Theory and Its Applications*. Sous la dir. de Piotr Jaworski et al. Lecture Notes in Statistics. Berlin, Heidelberg : Springer, p. 93-109 (cf. p. 47).
- Czado, Claudia, Stephan Jeske et Mathias Hofmann (2013). « Selection strategies for regular vine copulae ». *Journal de la société française de statistique* 154.1, p. 174-191 (cf. p. 46).
- Dißmann, J. et al. (2013). « Selecting and estimating regular vine copulae and application to financial returns ». *Computational Statistics & Data Analysis* 59, p. 52-69 (cf. p. 48, 49, 183, 195, 200).
- Dong, Hongbo, Wei Li et Haijun Li (2017). *Faster estimation of high-dimensional vine copulas with automatic differentiation*. Rapp. tech. Working paper (cf. p. 195).
- Fan, Xinyao, Harry Joe et Yongjin Park (2023). « Vine dependence graphs with latent variables as summaries for gene expression data » (cf. p. 81, 152).
- Fatahi, Amir Afshin, Pershang Dokouhaki et Babak Farhang Moghaddam (2011). « A bivariate control chart based on copula function ». *2011 IEEE International Conference on Quality and Reliability*, p. 292-296 (cf. p. 39).
- Geenens, Gery, Arthur Charpentier et Davy Paindaveine (2017). « Probit transformation for nonparametric kernel estimation of the copula density ». *Bernoulli* 23.3 (cf. p. 18, 185).
- Genest, Christian, Jean-Francois Quessy et Bruno Remillard (2006). « Goodness-of-fit Procedures for Copula Models Based on the Probability Integral Transformation ». *Scandinavian Journal of Statistics* 33.2, p. 337-366 (cf. p. 195, 203).
- Genest, Christian, Bruno Rémillard et David Beaudoin (2009). « Goodness-of-fit tests for copulas : A review and a power study ». *Insurance : Mathematics and Economics* 44.2, p. 199-213 (cf. p. 187, 203).
- Georges, Pierre et al. (2001). « Multivariate Survival Modelling : A Unified Approach with Copulas » (cf. p. 40, 198).
- Hobæk Haff, Ingrid, Kjersti Aas et Arnoldo Frigessi (2010). « On the simplified pair-copula construction — Simply useful or too simplistic ? » *Journal of Multivariate Analysis* 101.5, p. 1296-1310 (cf. p. 48, 179, 182).
- Hobæk Haff, Ingrid, Kjersti Aas, Arnoldo Frigessi et Virginia Lacal (2016). « Structure learning in Bayesian Networks using regular vines ». *Computational Statistics & Data Analysis* 101, p. 186-208 (cf. p. 184).
- Jiang, C. et al. (2015). « A Vine-Copula-Based Reliability Analysis Method for Structures With Multidimensional Correlation ». *Journal of Mechanical Design* 137.061405 (cf. p. 38, 198).
- Joe, Harry (2014). *Dependence Modeling with Copulas*. CRC Press (cf. p. 18, 42, 181, 190, 192, 206, 221).
- (2018). « Parsimonious graphical dependence models constructed from vines : Parsimonious graphical models ». *Canadian Journal of Statistics* 46.4, p. 532-555.
- Jun Yan (2007). « Enjoy the Joy of Copulas : With a Package copula ». *Journal of Statistical Software* 21.4, p. 1-21 (cf. p. 185).
- Junker, Robert R., Florian Griessenberger et Wolfgang Trutschnig (2021). « Estimating scale-invariant directed dependence of bivariate distributions ». *Computational Statistics & Data Analysis* 153, p. 107058 (cf. p. 41, 53).
- Khaled, Mohamad A. et Robert Kohn (2023). « On approximating copulas by finite mixtures » (cf. p. 68, 207).
- Kim, Daeyoung et al. (2013). « Mixture of D-vine copulas for modeling dependence ». *Computational Statistics & Data Analysis* 64, p. 1-19 (cf. p. 207).
- Kovacs, Edith et Tamas Szantai (2012). « Vine copulas as a mean for the construction of high dimensional probability distribution associated to a Markov Network ». *arXiv :1105.1697 [cs, math, stat]* (cf. p. 68).
- Kraus, Daniel et Claudia Czado (2017). « Growing simplified vine copula trees : improving Dißmann's algorithm ». *arXiv :1703.05203 [stat]* (cf. p. 48, 207, 226).
- Kurowicka, Dorota et Harry Joe (2010). *Dependence Modeling : Vine Copula Handbook*. WORLD SCIENTIFIC (cf. p. 38).
- Kurz, Malte S. et Fabian Spanhel (2022). « Testing the simplifying assumption in high-dimensional vine copulas ». *Electronic Journal of Statistics* 16.2, p. 5226-5276 (cf. p. 187).
- Min, Aleksey et Claudia Czado (2011). « Bayesian model selection for D-vine pair-copula constructions ». *The Canadian Journal of Statistics / La Revue Canadienne de Statistique* 39.2, p. 239-258 (cf. p. 46, 47).
- Morales Nápoles, Oswaldo (2010). « Bayesian belief nets and vines in aviation safety and other applications. » Thèse de doct. Delft : Delft Technical University (cf. p. 196).
- Mroz, Thomas, Sebastian Fuchs et Wolfgang Trutschnig (2021). « How simplifying and flexible is the simplifying assumption in pair-copula constructions – analytic answers in dimension three and a glimpse beyond ». *Electronic Journal of Statistics* 15.1, p. 1951-1992 (cf. p. 50, 68, 195-198, 200, 226).
- Müller, Dominik et Claudia Czado (2018). « Representing Sparse Gaussian DAGs as Sparse R-Vines Allowing for Non-Gaussian Dependence ». *Journal of Computational and Graphical Statistics* 27.2, p. 334-344 (cf. p. 49, 226).
- (2019a). « Dependence modelling in ultra high dimensions with vine copulas and the Graphical Lasso ». *Computational Statistics & Data Analysis* 137, p. 211-232 (cf. p. 49, 53).
- (2019b). « Selection of sparse vine copulas in high dimensions with the Lasso ». *Statistics and Computing* 29.2, p. 269-287 (cf. p. 49).
- Nagler, Thomas et Claudia Czado (2016). « Evading the curse of dimensionality in nonparametric density estimation with simplified vine copulas ». *Journal of Multivariate Analysis* 151, p. 69-89 (cf. p. 49, 50, 196).
- Nagler, Thomas et Thibault Vatter (2023). *rvinecopulib : High Performance Algorithms for Vine Copula Modeling* (cf. p. 185).
- Okhrin, Ostap et Alexander Ristig (2023). « Penalized estimation of hierarchical Archimedean copula ». *Journal of Multivariate Analysis*, p. 105274 (cf. p. 207).
- Patton, Andrew J. (2004). « On the Out-of-Sample Importance of Skewness and Asymmetric Dependence for Asset Allocation ». *Journal of Financial Econometrics* 2.1, p. 130-168 (cf. p. 39, 191, 194).

- Perreault, Samuel, Thierry Duchesne et Johanna G. Nešlehová (2019). « Detection of block-exchangeable structure in large-scale correlation matrices ». *Journal of Multivariate Analysis* 169, p. 400-422 (cf. p. 144).
- Pircalabelu, Eugen, Gerda Claeskens et Irène Gijbels (2017). « Copula directed acyclic graphs ». *Statistics and Computing* 27.1, p. 55-78 (cf. p. 49, 226).
- Schepsmeier, Ulf (2015). « Efficient information based goodness-of-fit tests for vine copula models with fixed margins : A comprehensive review ». *Journal of Multivariate Analysis. High-Dimensional Dependence and Copulas* 138, p. 34-52 (cf. p. 68, 187, 195, 200-203).
- Sklar, A. (1959). « Fonctions de Répartition à n Dimensions et Leurs Marges ». *Publications de l'Institut Statistique de l'Université de Paris*, p. 229-231 (cf. p. 39, 52, 180).
- Spanhel, Fabian et Malte S. Kurz (2019). « Simplified vine copula models : Approximations based on the simplifying assumption ». *Electronic Journal of Statistics* 13.1, p. 1254-1291 (cf. p. 48, 50, 200).
- Stöber, Jakob, Harry Joe et Claudia Czado (2013). « Simplified pair copula constructions—Limitations and extensions ». *Journal of Multivariate Analysis* 119, p. 101-118 (cf. p. 48, 50, 175, 182).
- Sun, Yi, Alfredo Cuesta-Infante et Kalyan Veeramachaneni (2019). « Learning Vine Copula Models for Synthetic Data Generation ». *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence* 33.01, p. 5049-5057 (cf. p. 49, 200).
- Székely, Gábor J., Maria L. Rizzo et Nail K. Bakirov (2007). « Measuring and testing dependence by correlation of distances ». *The Annals of Statistics* 35.6, p. 2769-2794 (cf. p. 41).
- Verdier, Ghislain (2013). « Application of copulas to multivariate control charts ». *Journal of Statistical Planning and Inference* 143.12, p. 2151-2159 (cf. p. 68, 199).
- Weiß, Gregor (2011). « Copula parameter estimation by maximum-likelihood and minimum-distance estimators : a simulation study ». *Computational Statistics* 26.1, p. 31-54 (cf. p. 68, 196, 200).
- Yang, Qingyu et al. (2017). « A Copula-Based Trend-Renewal Process Model for Analysis of Repairable Systems With Multitype Failures ». *IEEE Transactions on Reliability* 66.3, p. 590-602 (cf. p. 185).
- Zhu, Kailun et Dorota Kurowicka (2022). « Regular vines with strongly chordal pattern of (conditional) independence ». *Computational Statistics & Data Analysis* 172, p. 107461 (cf. p. 49).

Optimisation et Algorithmique

- Arjovsky, Martin, Soumith Chintala et Léon Bottou (2017). « Wasserstein Generative Adversarial Networks ». *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 214-223 (cf. p. 204).
- Arthur, David et Sergei Vassilvitskii (2007). « k-means++ : the advantages of careful seeding ». *ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms* (cf. p. 82).
- Asadi, Kavosh et Michael L. Littman (2017). « An Alternative Softmax Operator for Reinforcement Learning ». *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 243-252 (cf. p. 203).
- Baydin, Atilim Gunes et al. (2018). « Automatic Differentiation in Machine Learning : a Survey ». *Journal of Machine Learning Research* 18.153, p. 1-43 (cf. p. 200).
- Bond-Taylor, Sam et al. (2022). « Deep Generative Modelling : A Comparative Review of VAEs, GANs, Normalizing Flows, Energy-Based and Autoregressive Models ». *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 44.11, p. 7327-7347 (cf. p. 207).
- Breiman, Leo et al. (2017). *Classification And Regression Trees*. 1^{re} éd. Routledge (cf. p. 25).
- Bubeck, Sébastien (2015). « Convex Optimization : Algorithms and Complexity ». *Foundations and Trends® in Machine Learning* 8.3-4, p. 231-357 (cf. p. 108, 142, 143).
- Campigotto, Romain, Patricia Conde Céspedes et Jean-Loup Guillaume (2014). « A Generalized and Adaptive Method for Community Detection ». *arXiv :1406.2518 [physics, stat]* (cf. p. 27).
- Creswell, Antonia et al. (2018). « Generative Adversarial Networks : An Overview ». *IEEE Signal Processing Magazine* 35.1, p. 53-65 (cf. p. 204).
- Duchi, John et al. (2008). « Efficient projections onto the l_1 -ball for learning in high dimensions ». *Proceedings of the 25th international conference on Machine learning - ICML '08*. Helsinki, Finland : ACM Press, p. 272-279 (cf. p. 91).
- Goodfellow, Ian, Yoshua Bengio et Aaron Courville (2016). *Deep Learning*. MIT Press (cf. p. 197).
- Goodfellow, Ian, Jean Pouget-Abadie et al. (2014). « Generative Adversarial Nets ». *Advances in Neural Information Processing Systems*. T. 27. Curran Associates, Inc. (cf. p. 196, 203, 204).
- Granville, V., M. Krivanek et J.-P. Rasson (1994). « Simulated annealing : a proof of convergence ». *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 16.6, p. 652-656.
- Hartigan, J. A. et M. A. Wong (1979). « Algorithm AS 136 : A K-Means Clustering Algorithm ». *Applied Statistics* 28.1, p. 100 (cf. p. 82, 119, 144).
- He, Fengxiang, Tongliang Liu et Dacheng Tao (2020). « Why ResNet Works ? Residuals Generalize ». *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 31.12, p. 5349-5362 (cf. p. 206).
- Hecht-nielsen, ROBERT (1992). « III.3 - Theory of the Backpropagation Neural Network ». *Neural Networks for Perception*. Sous la dir. d'Harry Wechsler. Academic Press, p. 65-93 (cf. p. 200).
- Hopfield, J J (1982). « Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. » *Proceedings of the National Academy of Sciences* 79.8, p. 2554-2558 (cf. p. 25).
- Khamaru, Koulik et Martin Wainwright (2018). « Convergence guarantees for a class of non-convex and non-smooth optimization problems ». Sous la dir. de Jennifer Dy et Andreas Krause. T. 80. Proceedings of Machine Learning Research. PMLR, p. 2601-2610 (cf. p. 65, 135).

- Kingma, Diederik P. et Max Welling (2019). « An Introduction to Variational Autoencoders ». *Foundations and Trends® in Machine Learning* 12.4, p. 307-392 (cf. p. 195).
- Kobyzev, Ivan, Simon J.D. Prince et Marcus A. Brubaker (2021). « Normalizing Flows : An Introduction and Review of Current Methods ». *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 43.11, p. 3964-3979 (cf. p. 204).
- Kovalyov, Mikhail Y. et Erwin Pesch (2010). « A generic approach to proving NP-hardness of partition type problems ». *Discrete Applied Mathematics* 158.17, p. 1908-1912 (cf. p. 59, 91, 144).
- Lachapelle, Sébastien et al. (2020). « Gradient-Based Neural DAG Learning » (cf. p. 226).
- Li, Yujia, Kevin Swersky et Rich Zemel (2015). « Generative Moment Matching Networks ». *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 1718-1727 (cf. p. 207).
- Lyu, Jiancheng et al. (2020). « AutoShuffleNet : Learning Permutation Matrices via an Exact Lipschitz Continuous Penalty in Deep Convolutional Neural Networks ». *Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. Virtual Event CA USA : ACM, p. 608-616 (cf. p. 219).
- Nowozin, Sebastian, Botond Cseke et Ryota Tomioka (2016). « f-GAN : Training Generative Neural Samplers using Variational Divergence Minimization ». *Advances in Neural Information Processing Systems*. T. 29. Curran Associates, Inc. (cf. p. 204).
- Owsinski, Jan W. et Sławomir Zadrozny (1986). « Clustering for ordinal data : a linear programming formulation ». *Control and Cybernetics* 15 (cf. p. 26, 127).
- Paszke, Adam et al. (2019). « PyTorch : An Imperative Style, High-Performance Deep Learning Library ». *Advances in Neural Information Processing Systems* 32. Curran Associates, Inc., p. 8024-8035 (cf. p. 203).
- R Core Team (2021). *R : A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria.
- Stephens, Matthew (2000). « Dealing with Label Switching in Mixture Models ». *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Statistical Methodology)* 62.4, p. 795-809 (cf. p. 27).
- Wu, Zhengtian, Hamid Reza Karimi et Chuangyin Dang (2019). « An approximation algorithm for graph partitioning via deterministic annealing neural network ». *Neural Networks* 117, p. 191-200 (cf. p. 134).
- Yin, Penghang, Ernie Esser et Jack Xin (2014). « Ratio and difference of ℓ_1 and ℓ_2 norms and sparse representation with coherent dictionaries ». *Communications in Information and Systems* 14.2, p. 87-109 (cf. p. 51, 219).
- You, Jiaxuan et al. (2020). « Graph Structure of Neural Networks ». *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 10881-10891 (cf. p. 197, 203).
- Yu, Yue et al. (2019). « DAG-GNN : DAG Structure Learning with Graph Neural Networks ». *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 7154-7163 (cf. p. 226).
- Zhang, Yizhe et al. (2017). « Adversarial Feature Matching for Text Generation ». *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning*. PMLR, p. 4006-4015 (cf. p. 207).

Autres

- Benson, Austin R. et al. (2018). « Simplicial closure and higher-order link prediction ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 115.48 (cf. p. 77).
- Capiez-Lernout, E. et al. (2005). « Blade Manufacturing Tolerances Definition for a Mistuned Industrial Bladed Disk ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 127.3, p. 621-628 (cf. p. 177).
- Creamer, Germán G. et al. (2022). « Discovering Organizational Hierarchy through a Corporate Ranking Algorithm : The Enron Case ». *Complexity* 2022. Sous la dir. de Ning Cai, p. 1-18 (cf. p. 77).
- Del Negro, Marco et al. (2005). « A Latent Factor Model with Global, Country, and Industry Shocks for International Stock Returns ». *IMF Working Papers* 05.52, p. 1.
- Donat, R. et al. (2008). « Specific graphical models for analyzing the reliability ». *2008 16th Mediterranean Conference on Control and Automation*, p. 621-626 (cf. p. 25).
- ISO (2013). *Statistical methods in process management Capability and performance. Part 6 : Process capability statistics for characteristics following a multivariate normal distribution*. Standard. International Organization for Standardization (cf. p. 175).
- (2021a). *Statistical methods in process management Capability and performance. Part 7 : Capability of measurement processes*. Standard. International Organization for Standardization.
- (2021b). *Geometrical product specifications (GPS) – Geometrical tolerancing – Maximum material requirement (MMR), least material requirement (LMR) and reciprocity requirement (RPR)*. Standard. International Organization for Standardization (cf. p. 9, 67, 176).
- Laloux, Laurent et al. (1999). « Noise Dressing of Financial Correlation Matrices ». *Physical Review Letters* 83.7, p. 1467-1470 (cf. p. 81, 152).
- Mesnier, Nicolas (2018). « Spécification géométrique des produits (GPS) ». Cours (cf. p. 8, 9, 239).
- Page, Lawrence (1998). « The pagerank citation ranking : Bringing order to the web. Technical report ». *Stanford Digital Library Technologies Project, 1998* (cf. p. 25).
- Sharma, G. V. S. S. et P. Srinivasa Rao (2014). « A DMAIC approach for process capability improvement an engine crankshaft manufacturing process ». *Journal of Industrial Engineering International* 10.2, p. 65.
- Tarkkonen, L. et K. Vehkalahti (2005). « Measurement errors in multivariate measurement scales ». *Journal of Multivariate Analysis* 96.1, p. 172-189.
- Wong, Kam Cheong (2011). « Using an Ishikawa diagram as a tool to assist memory and retrieval of relevant medical cases from the medical literature ». *Journal of Medical Case Reports* 5.1, p. 120.

Troisième partie

Annexes

Copyright

This thesis is under Copyright : ©Cyprien Ferraris 2024.

For any request or comment you can send an email at cyprien.ferraris@gmail.com.

The pictures 1.2 and 1.5 are under creative common licence     from Wikipedia.

The picture 1.3 is under creative common licence     from (Mesnier, 2018).

Acronymes et notations

SAE : Safran Aircraft Engines
CFG : Condition Fonctionnelle Géométrique
SBM : *Stochastic Block Model*
DCSBM : *Degree Corrected Stochastic Block Model*
ELBO : *Evidence Lower Bound*
BE : Bureau d'Etudes
BM : Bureau des Méthodes
VCI : Virole de Carter Intermédiaire (*intermediate casing* en anglais)
MSP : Maîtrise Statistique des Procédés (*SPC : Statistical Process Control* en anglais)
Ppm : Pièces (non conformes) par million
CAH : Classification Ascendante Hiérarchique (*HAC : Hierarchical Ascendant Clustering* en anglais)
DAG : Graphe Acyclique Dirigé (*Directed Acyclic Graph*)
MLE : *Maximum Likelihood Estimator*
KL : Kullbach-Leibler (divergence); KL_B pour Bernoulli
HD : Hellinger Distance
i.i.d : indépendant et identiquement distribué
RAF : *Residual Adjustment Function*
MMT : Machine à Mesurer Tridimensionnelle (*CMM* en anglais)
 $E[X]$, $V(X)$: espérance et variance d'une variable aléatoire X
 $\Delta = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^K \mid \sum_{i=1}^K x_i = 1 \right\}$ le simplexe de probabilité.
 $BO(\cdot)$: *Boltzmann Operator*

Estimation de la structure de dépendance en grande dimension via des modèles de graphes aléatoires : applications au suivi et à l'optimisation des contrôles en production

Résumé

L'usinage des pièces de moteurs d'avion nécessite des procédés de fabrication complexes. En effet, ces pièces doivent être conformes vis-à-vis de nombreuses spécifications. Pour s'en assurer, elles sont contrôlées une fois la fabrication terminée. Cette étape de contrôle est coûteuse, mais permet de récolter de nombreuses données dites de production.

L'objectif de cette thèse est d'exploiter ces données de production. D'une part, nous cherchons à mieux comprendre les procédés de fabrication et, d'autre part, à exploiter les dépendances au sens statistique entre les mesures afin d'optimiser le contrôle des pièces.

Pour cela, cette thèse propose différentes méthodes d'analyse de données pour modéliser et estimer la structure de dépendance des données de production. Ces analyses permettront alors de comprendre quels sont les facteurs à faire évoluer pour améliorer la production.

La première partie de la thèse est consacrée à l'étude de méthodes de classification pour des graphes aléatoires par blocs. Nous justifions l'application de cette catégorie de méthodes sur des matrices de corrélation pour mieux comprendre les liens entre les caractéristiques mesurées. Nous comparons aussi différentes méthodes de la littérature avec les nouvelles méthodes présentées. Ces dernières reposent sur l'utilisation de divergences à la place de la vraisemblance.

La seconde partie de la thèse est dédiée à l'utilisation de copules arborescentes afin d'estimer la probabilité de produire une pièce conformément à ses exigences. Nous développons une méthode innovante, utilisant les réseaux de neurones, pour estimer les paramètres des copules.

La troisième partie de cette thèse se fonde sur les deux précédentes pour proposer une méthode d'optimisation des contrôles effectués lors de la production.

Les différents résultats théoriques de cette thèse sont illustrés sur des pièces de moteurs d'avion, en particulier sur l'aube fan.

Mots clés : maîtrise statistique des procédés, modèle à blocs stochastiques, estimation robuste, copule, indice de capacité.

Abstract

The machining of aircraft engine parts requires complex manufacturing processes. Indeed, these parts must comply with numerous specifications. To ensure this, they are inspected once the manufacturing is completed. This inspection stage is costly but allows for the collection of numerous production data.

The objective of this thesis is to exploit these production data. On the one hand, we seek to better understand the manufacturing processes and, on the other hand, to exploit the dependencies, in a statistical sense, between the measurements in order to optimize part inspection.

To achieve this, this thesis proposes various data analysis methods to model and estimate the dependency structure of production data. These analyses will then help understand which factors need to be modified to improve production.

The first part of the thesis is dedicated to the study of classification methods for random block graphs. We justify the application of this category of methods to correlation matrices to better understand the links between the measured characteristics. We also compare different methods from the literature with the new methods presented. The latter are based on the use of divergences instead of likelihood.

The second part of the thesis is dedicated to the use of Vine Copulas to estimate the probability of producing a part in accordance with its requirements. We develop an innovative method using neural networks to estimate the Copula parameters.

The third part of this thesis builds on the previous two to propose a method for optimizing inspections carried out during production.

The various theoretical results of this thesis are illustrated on aircraft engine parts, particularly on the fan blade.

Keywords: statistical process control, stochastic block model, robust estimation, copula, capability index.

