



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le *1er juillet 2016* par :

TATIANA LABOPIN-RICHARD

**Méthodes statistiques et d'apprentissage pour l'estimation de quantiles
et de superquantiles dans des modèles de codes numériques ou
stochastiques**

JURY

BERNARD BERCU	Professeur d'Université	Examineur
PEGGY CÉNAC	Maître de conférence	Examinatrice
MATHIEU COUPLET	Ingénieur de recherche	Examineur
GERSENDE FORT	Directrice de recherche	Examinatrice
FABRICE GAMBOA	Professeur d'Université	Directeur de thèse
AURÉLIEN GARIVIER	Professeur d'Université	Directeur de thèse
CÉLINE LÉVY-LEDUC	Professeur d'Université	Rapporteur
CHRISTIAN PAROISSIN	Maître de Conférence	Rapporteur

École doctorale et spécialité :

MITT : Domaine Mathématiques : Mathématiques appliquées

Unité de Recherche :

Institut de Mathématiques de Toulouse

Directeur(s) de Thèse :

Fabrice Gamboa et Aurélien Garivier

Rapporteurs :

Céline Lévy-Leduc et Christian Paroissin

Contents

List of articles	11
Notations	13
Résumé	19
Introduction générale	25
I Estimation empirique	49
Introduction	51
1 Empirical estimation of the superquantile	55
1.1 Introduction	55
1.2 Main result	55
1.2.1 Examples of asymptotic behaviors for the classical superquantile . . .	56
1.3 Proof of Theorem 1.2.1	57
1.3.1 Mathematical tools	57
1.3.2 Proof of i) of Theorem 1.2.1 : consistency of estimator (1.1)	59
1.3.3 Proof of ii) of Theorem 1.2.1 : asymptotic normality of estimator (1.1)	64
1.4 Conclusion	73
2 Bregman superquantile	75
2.1 Aim and scope	75
2.2 Definition of the Bregman superquantiles	75
2.3 Coherence of Bregman superquantile	78
2.3.1 Result	78
2.3.2 Examples and counter-examples	78
2.3.3 Remarks toward other natural properties	79
2.4 Estimation of the Bregman superquantile	80
2.4.1 Monte Carlo estimator	80
2.4.2 Asymptotics	80
2.4.3 Examples of asymptotic behaviour of the Bregman superquantile . . .	81
2.5 Numerical simulations	83
2.6 Applications to a nuclear safety exercise	85
2.7 Proofs	86
2.7.1 Proof of Proposition 2.3.1	86
2.7.2 Proof of Theorem 2.4.2	90
2.8 Conclusion	90

Conclusion	91
II Estimation séquentielle par algorithme stochastique	93
Introduction	95
3 Estimation de quantile dans les codes numériques	99
3.1 Etude du comportement asymptotique de l'algorithme (3.1)	99
3.2 Etude du comportement non-asymptotique de l'algorithme (3.1)	102
3.2.1 Quelques simulations	102
3.2.2 Etat de l'art	103
3.2.3 Le cas d'une loi à densité minorée	105
3.2.4 Pistes pour un résultat général	112
3.3 Conclusion	115
3.4 Annexe : sur la piste des inégalités de déviation	115
4 Estimation de superquantile dans les codes numériques	119
4.1 Etat de l'art sur l'étude asymptotique de l'algorithme (4.7)	120
4.2 Etude non-asymptotique de l'algorithme (4.7)	120
4.2.1 Etude du risque quadratique de l'estimateur empirique de la moyenne	120
4.2.2 Etude du risque quadratique de l'algorithme (4.7) dans un cas simple	123
4.3 Conclusion	129
4.4 Annexes	130
5 Sequential conditional quantile estimation for stochastic codes	131
5.1 Introduction	131
5.1.1 The algorithm	131
5.2 Main results	133
5.2.1 Notation and assumptions	133
5.2.2 Almost sure convergence	135
5.2.3 Rate of convergence of the mean square error	136
5.3 Numerical simulations	140
5.3.1 Dimension 1- square function	140
5.3.2 Dimension 1 - absolute value function	143
5.3.3 Dimensions 2 and 3	143
5.4 Conclusion and perspectives	145
5.5 Appendix 1 : Technical lemmas and proofs	145
5.5.1 Technical lemmas and notation	145
5.5.2 Proof of Theorem 5.2.4 : almost sure convergence	152
5.5.3 Proof of Theorem 5.2.5 : Non-asymptotic inequality on the mean square error.	155
5.5.4 Proof of Corollary 5.2.6 : Rate of convergence	157
5.5.5 Proof of Corollary 5.2.8 : choice of best parameters β and γ	161
5.6 Appendix 2 : Recap of the constants	162
5.6.1 Constants of the model	162
5.6.2 Compact support	162
5.6.3 Real constants	162
5.6.4 Integer constants	163

6	Estimation de superquantile dans les codes stochastiques	165
6.1	Introduction	165
6.2	Résultats principaux	166
6.2.1	Notations et hypothèses	166
6.2.2	Convergence presque-sûre	167
6.2.3	Inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique	168
6.3	Simulations numériques	170
6.3.1	Dimension 1- fonction carré	170
6.3.2	Dimension 2 et 3	171
6.4	Pourquoi le Corollaire 6.2.5 n'est-il pas optimal ?	173
6.4.1	Explications théoriques	173
6.4.2	Simulations numériques	175
6.4.3	Bilan	175
6.5	Conclusion	176
6.6	Preuves	178
6.6.1	Preuve de la consistance forte : Théorème 6.2.2	178
6.6.2	Preuves des théorèmes sur le risque quadratiques	180
6.6.3	Preuve de la Proposition 6.4.1 : cas indépendant	185
6.7	Annexes	186
6.7.1	Constantes réelles	186
6.7.2	Constantes de rang	187
	Conclusion	189
III	Estimation séquentielle bayésienne et planification d'expériences	191
	Introduction	193
7	Estimation of percentile in numerical black box	197
7.1	Introduction	197
7.2	Gaussian Process modelling and sequential experiments	198
7.2.1	Model definition	198
7.2.2	Percentile estimation	199
7.3	Two sequential strategies for percentile estimation	200
7.3.1	Update formula for the percentile estimator	200
7.3.2	Infill criterion based on probability of exceedance	202
7.3.3	Infill criterion based on the percentile variance	204
7.4	Numerical simulation	205
7.4.1	Two-dimensional example	205
7.4.2	Four and six-dimensional examples	207
7.5	Concluding comments	209
7.6	Appendix	209
7.6.1	Proof of Proposition 7.3.4	209
7.6.2	Proof of Proposition 7.3.5	211
7.6.3	Test functions	212
	Conclusion	215
	Conclusion générale et perspectives	219

List of Figures

2.1	Numerical convergence test for the exponential distribution.	83
2.2	Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 0.5$).	84
2.3	Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 1.5$).	84
2.4	Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 2.5$).	85
2.5	Distribution of the GASCON output variable.	86
2.6	Evolution of the relative errors (mean square error divided by the reference value) on the estimated superquantiles in function of the sample size. In black: classical superquantile; in red: geometrical superquantile; in blue: harmonic superquantile. The reference value has been calculated with 10^7 simulations.	87
3.1	Convergence en moyenne quadratique	103
4.1	Vitesse de décroissance du risque quadratique de l'estimateur du superquantile lors que le quantile n'est pas connu.	129
5.1	Relative error for $n = 5000$ in function of β and γ	142
5.2	Mean square error in function of β and γ for the square function	142
5.3	MSE in function of β and γ for absolut value function	143
5.4	Mean square error in function of β and γ	144
5.5	Mean square error in function of β and γ	144
5.6	Theoretical behaviour of the MSE in function of β and γ	161
6.1	Segment optimal pour $d=1, 5$ et 10	170
6.2	Erreur relative en fonction de β et γ - dimension 1 - fonction carré	170
6.3	MSE en fonction de β et γ - dimension 1 - fonction carré	171
6.4	Erreur relative en fonction de β et γ -dimension 1 - fonction valeur absolue	172
6.5	MSE en fonction de β et de γ -dimension 1- fonction valeur absolue	172
6.6	MSE en fonction de β et γ - dimension 2 - fonction norme	173
6.7	MSE en fonction de β et γ - dimension 3 - fonction norme	173
6.8	Zones de dominance en fonction de la dimension d	176
6.9	MSE en fonction de β et γ	177
6.10	Zones et termes dominants	183
6.11	Segment des paramètres optimaux	186
7.1	Evolution of the percentile point as a function of the value of z	202
7.2	Illustration of the J^{Var} criterion. Left: GP model (black line and grey area) and updated GP mean (colored line) depending on the value of g_{new} (circles) for $\mathbf{x}_{n+1} = 0.9$. The corresponding 90% percentiles q_{n+1} are shown with the triangles. Right: percentile values only, indexed by the corresponding percentile points.	205

7.3	Contour lines of the GP mean and experimental set at three different n values (7, 8, and 15) with the J_n^{Var} criterion. The initial observations are shown in white, the observations added by the sequential strategy in blue, and the next point to evaluate in violet. The red line shows the contour line corresponding to the quantile estimate.	206
7.4	Comparison of observation sets obtained using J_n^{prob} (left) and J_n^{Var} (right). .	206
7.5	Evolution of the percentile estimates using J_n^{prob} (left) and J_n^{Var} (right) for the 2D problem. The blue line shows the actual 85 th percentile.	207
7.6	Evolution of the percentile estimates using J_n^{prob} (dashed line, blue), J_n^{Var} (plain line, red) or random search (RS, dotted line, green) for the 4D and 6D problems and several percentile levels. The lines show the average error and the colored areas the 10% and 90% quantile errors over the runs.	208

List of Tables

2.1	Estimated values of 95%-quantile and 95%-superquantiles for 1000 simulations.	86
5.1	Expected precision for the MSE when $N = 1000$	140
5.2	Constant values	142

List of articles

Paper I

Bregman superquantiles, estimation methods and applications, T. Labopin-Richard, F. Gamboa, A. Garivier. Published in Dependence Modeling, Volume 4, Issue 1, ISSN (Online) 2300-2298, DOI: 10.1515/demo-2016-0004, March 2016.

Abstract

In this work, we extend some parameters built on a probability distribution introduced before to the case where the proximity between real numbers is measured by using a Bregman divergence. This leads to the definition of the Bregman superquantile (that we can connect with several works in economy, see for example [44] or [24]). Axioms of a coherent measure of risk discussed previously (see [82] or [7]) are studied in the case of Bregman superquantile. Furthermore, we deal with asymptotic properties of a Monte Carlo estimator of the Bregman superquantile. Several numerical tests confirm the theoretical results and an application illustrates the potential interests of the Bregman superquantile.

Paper II

Conditional quantile sequential estimation for stochastic codes, T. Labopin-Richard, F. Gamboa, A. Garivier. Submitted in Electronic Journal of Statistics

Abstract

This paper is devoted to the sequential estimation of a conditional quantile in the context of real stochastic codes with vector-valued inputs. Our algorithm is a combination of k -nearest neighbours and of a Robbins-Monro estimator. We discuss the convergence of the algorithm under some conditions on the stochastic code. We provide non-asymptotic rates of convergence of the mean square error, and we discuss the tuning of the algorithm's parameters.

Paper III

Sequential design of experiments for estimating percentiles of black-box functions, T. Labopin-Richard, V. Picheny. Submitted in Statistica Sinica.

Abstract

Estimating percentiles of black-box deterministic functions with random inputs is a challenging task when the number of function evaluations is severely restricted, which is typical for computer experiments. This article proposes two new sequential Bayesian methods for percentile estimation based on the Gaussian Process metamodel. Both rely on the Stepwise Uncertainty Reduction paradigm, hence aim at providing a sequence of function evaluations that reduces an uncertainty measure associated with the percentile estimator. The proposed strategies are tested on several numerical examples, showing that accurate estimators can be obtained using only a small number of functions evaluations.

Notations

Notations générales

\mathbb{E}	Espérance mathématique.
Var	Variance mathématique.
$\mathbb{P}(A)$	Probabilité de l'événement A .
$\mathbb{1}_A$	Indicatrice de l'événement A .
$\beta(a, b)$	Loi Beta de paramètres a et b qui sont deux réels strictement positifs.
$\mathcal{N}(0, 1)$	Loi gaussienne standard.
a.s. / p.s.	Almost surely / presque sûrement.
d	Dimension de l'espace des entrées des codes étudiés.
\mathbb{X}	Espace des entrées des codes étudiés. C'est un sous-ensemble de \mathbb{R}^d .
X	Vecteur aléatoire des entrées des codes étudiés. Il est à valeurs dans \mathbb{X} .
g	Fonction inconnue représentant le fonctionnement interne des codes. Elle va de \mathbb{X} dans \mathbb{R} pour les codes numériques et de $\mathbb{X} \times \mathbb{R}^l$ dans \mathbb{R} pour les codes stochastiques.
ϵ	Vecteur aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^l qui représente la graine aléatoire interne au code stochastique.
l	dimension de l'espace d'arrivée de la graine aléatoire ϵ .
Y	Sortie du code numérique ou stochastique.
$Y(x) = g(x, \epsilon)$	Sortie du code stochastique lorsqu'une entrée x est fixée.

α	Élément de $]0, 1[$. C'est le niveau du quantile que nous voulons estimer tout au long de cette thèse.
$q_\alpha(Y)$	Quantile de niveau α de la variable aléatoire Y . On omet l'indice α lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté.
F_Y	Fonction de répartition de Y .
F_Y^{-1}	Fonction quantile de Y .
f_Y	Fonction de densité de Y .
$Q_\alpha(Y)$	Superquantile de Y de niveau α . On omet l'indice α lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté.
Z, Z'	Vecteurs aléatoires quelconques qui interviennent dans les définitions.
(Z_1, \dots, Z_n)	Échantillon indépendant de même loi que Z .
$Z_{(i,n)}$	i ème statistique d'ordre de l'échantillon (Z_1, \dots, Z_n) de taille n .
U, V	Vecteurs aléatoires quelconques.
N	Budget alloué d'appels au code dans un contexte de code coûteux.
q_n	Un estimateur du quantile de la loi de sortie d'un code numérique.
$q_n(x)$	Un estimateur du quantile de la loi de sortie d'un code stochastique lorsqu'une entrée x a été fixée.
Q_n	Un estimateur du quantile de la loi de sortie d'un code numérique.
$Q_n(x)$	Un estimateur du superquantile de la loi de sortie d'un code stochastique lorsqu'une entrée x a été fixée.

Notations de la Partie 1

γ	Fonction strictement convexe sur \mathbb{R} à valeurs dans $\overline{\mathbb{R}}$. Lorsque γ est dérivable, on note γ' sa dérivée. Lorsque γ' est inversible, on note γ'^{-1} sa réciproque.
\mathcal{R}	Mesure de risque quelconque.
$Z = \gamma'(X)$	Dans le chapitre 2 uniquement , la variable aléatoire Z est définie par $Z = \gamma'(Y)$.
$Q_\alpha^{d\gamma}(Y)$	Superquantile de Bregman de niveau α de Y .

Notations de la Partie 2

$a_n(\theta_n)$	Risque quadratique d'un estimateur θ_n quelconque. Lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté, on ne précise pas de quel estimateur il s'agit.
γ_n	Pas de descente de gradient pour un algorithme stochastique. Il est souvent pris de la forme $\gamma_n = C_\gamma n^{-\gamma}$ avec $C_\gamma > 0$ et $\gamma \in]0, 1]$.
Γ_n	Somme partielle $\sum_{k=1}^n \gamma_n$.
$\bar{Z} := n^{-1} \sum_{k=1}^n Z_i$	Moyenne empirique de l'échantillon (Z_1, \dots, Z_n) .
k_n	Nombre de voisins que l'on considère lorsqu'on utilise la méthode des k -plus proches voisins. Il est souvent choisi de la forme $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ avec $\beta \in]0, 1]$.
$kNN_n(a)^Z$	Ensemble des k_n plus proches voisins de a dans l'échantillon (Z_1, \dots, Z_n) .
$I_{kNN_n(a)^Z}$	Ensemble des indices des éléments de $kNN_n(a)^Z$.
P_n	Probabilité conditionnelle que la nouvelle entrée soit dans les k_{n+1} -plus proches voisins de x : $P_n := \mathbb{P}(X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x) X_1, \dots, X_n)$.
$\epsilon_n = (n+1)^{-\epsilon}$	Suite réelle, $\epsilon > 0$.
A_n	Événement $\{P_n > \epsilon_n\}$.

Notations de la Partie 3

$G(\cdot)$	Processus gaussien centré dont la fonction g est une réalisation.
$c(\cdot, \cdot)$	Fonction de covariance définie positive de $G(\cdot)$.
$m_n(\cdot), k_n(\cdot, \cdot), s_n(\cdot)$	Moyenne, covariance et variance conditionnelles intervenant dans les formules de krigeage.
$(x_i)_{i=1, \dots, n}$	Suite des entrées sélectionnées pour être évaluées jusqu'à l'étape n . Chaque x_i est un élément de \mathbb{X} .
$(g_i)_{i=1, \dots, n}$	Suite des évaluations des points x_i : $g_i = g(x_i)$.
G_{n+1}	Variable aléatoire réelle suivant la loi normale de paramètres $m_n(x_{n+1})$ et $s_n(x_{n+1})$. g_{n+1} est, sous hypothèse gaussienne, une réalisation de cette variable aléatoire.
$\mathcal{A}_n := \{(x_1, g_1), \dots, (x_n, g_n)\}$	Événement des évaluations passées.
$\mathcal{A}_n = \mathcal{A}_n \cup (x_{n+1}, G_{n+1})$	Événement des évaluations passées et nouveau couple de données où G_{n+1} est toujours sous sa forme aléatoire parce que x_{n+1} n'a pas été évalué.
J_n	Critère permettant de sélectionner x_{n+1}^* parmi les points candidats x_{n+1} .
\mathbf{x}_{n+1}	Point candidat à l'évaluation de l'étape $n + 1$. C'est un élément de \mathbb{X} .
x_{n+1}^*	Point de \mathbb{X} qui est choisi pour être évalué à l'étape $n + 1$ parmi tous les candidats x_{n+1} .
$\mathbf{X}_{MC} = (x_{MC}^1, \dots, x_{MC}^L)$	Échantillon indépendant de X sur lequel seront calculés les quantiles empiriques.
x_n^q	Élément de \mathbf{X}_{MC} pour lequel $m_n(\mathbf{X}_{MC})_{(\lfloor l\alpha_j \rfloor + 1)} = m_n(x_n^q)$. On l'appelle le point quantile.
$(I_i)_{i=1, \dots, L}$	Points d'intersections entre deux droites parmi $(d_j = b_j + a_j z)_{j \in \{1, \dots, L\}}$, où $d = m_{n+1}(\mathbf{X}_{MC})$, $b = m_n(\mathbf{X}_{MC})$ et $a = k_n(\mathbf{X}_{MC}, \mathbf{x}_{n+1})$. De plus, $I_0 = -\infty$ et $I_{L+1} = +\infty$.

$$L = \frac{l(l-1)}{2}$$

$$(B_i)_{i=1, \dots, L}$$

$$x_{n+1}^q(B_i)$$

$$Z = \frac{G_{n+1} - m_n(x_{n+1})}{s_n(x_{n+1})^2}.$$

Nombre maximal de points d'intersections I_i .

Intervalles entre I_i et I_{i+1} .

Point quantile de l'étape $n + 1$ si la future observation g_{n+1} est dans l'intervalle B_i .

Dans le Chapitre 7 uniquement, la variable aléatoire Z est définie par $Z = \frac{G_{n+1} - m_n(x_{n+1})}{s_n(x_{n+1})^2}$.

Résumé

Cette thèse s'intègre dans le contexte général de l'estimation d'un quantile ou d'un superquantile de la sortie d'un code numérique ou stochastique. Suivant le niveau de complexité de calculs du code considéré, on se propose de développer trois méthodes d'estimation.

Partie 1 : Estimation séquentielle pour des codes numériques peu coûteux

Pour un code numérique et sans contrainte de coût, il est naturel d'avoir recours à une estimation séquentielle. Pour cela, on construit un échantillon de la loi de sortie en fournissant au code un échantillon de la loi d'entrée.

BESOIN. Puisque dans ce contexte, il n'y a pas de contrainte sur la taille de l'échantillon d'inférence, ce sont les comportements asymptotiques des estimateurs qui sont intéressants. La forte consistance et la normalité asymptotique de l'estimateur empirique du quantile sont des résultats connus. En revanche, le besoin de ce genre de résultats n'est pas complètement comblé pour l'estimateur du superquantile. En effet, on ne trouve que peu d'articles dans la littérature traitant du superquantile en tant que tel et non comme cas particulier d'une classe plus générale de mesures de risque. Il n'existe donc pas, à ce jour, de théorème auto-contenu présentant des conditions claires et simples à vérifier en pratique concernant la forte consistance et la normalité asymptotique de son estimateur empirique. Par ailleurs, même si le superquantile est jugé meilleure mesure de risque que le quantile parce qu'il est cohérent (et en particulier sous-additif), cette quantité n'est pas finie pour toutes les lois usuelles. Il semble donc intéressant de trouver une mesure de risque qui reste *cohérente* mais qui soit finie pour un plus grand nombre de lois, et dont l'estimation empirique soit aussi stable que celle du superquantile.

APPORT DE LA THESE. Dans le **Chapitre 1** de cette thèse, nous proposons à travers le Théorème 1.2.1 des conditions simples et faciles à vérifier en pratique pour que l'estimateur empirique du superquantile soit fortement consistant et normalement asymptotique. La preuve de ce théorème est très intuitive et auto-contenue. Elle permet de plus d'avoir accès à une forme explicite de la variance asymptotique.

Puisque les conditions de ce théorème ne sont pas satisfaites par certaines lois usuelles, nous introduisons dans le **Chapitre 2** une nouvelle mesure de risque nommée superquantile de Bregman (parce qu'elle est construite à l'aide de la divergence de Bregman). Cette mesure de risque est cohérente sous de faibles hypothèses, comme on peut le voir dans la Proposition 2.3.1. De plus, le Théorème 2.4.2 indique que son estimateur empirique est consistant et normalement asymptotique sous des hypothèses plus faibles que celui du superquantile. Nous appliquons nos résultats à un cas pratique fournit par l'entreprise EDF R&D.

Partie 2 : Estimation par algorithme stochastique pour des codes coûteux

Lorsque l'on considère un code coûteux, les résultats asymptotiques sont moins intéressants, parce que nous n'avons pas l'assurance d'avoir un budget d'évaluations assez important pour atteindre le régime asymptotique. Dans la deuxième partie de cette thèse, nous nous intéressons alors à des stratégies d'estimation séquentielles à un pas parce que ces dernières sont très adaptées à l'obtention d'inégalité non-asymptotiques. Ces inégalités à horizon fini permettent, quelque soit le budget d'évaluation autorisées, de prédire la précision que pourra atteindre l'estimation.

Codes numériques coûteux

BESOIN. Le quantile d'une loi inconnue peut-être estimé par un algorithme stochastique de type Robbins-Monro. On connaît maintenant bien le comportement asymptotique de ce dernier en fonction du choix de son pas de descente de gradient. En plongeant cet estimation du quantile dans l'algorithme stochastique de Robbins-Monro pour estimer une moyenne, on obtient aussi un estimateur du superquantile. Il est aussi consistant dès lors que l'on choisit bien son pas de descente de gradient. La recherche de résultats non asymptotiques pour les algorithmes de type Robbins-Monro est en plein essor mais il n'en existe pas encore qui s'appliquent à l'algorithme pour estimer le quantile. De la même manière, aucun résultat traitant du comportement non-asymptotique de l'algorithme à deux étapes permettant d'estimer le superquantile n'est disponible.

APPORT DE LA THESE. Le **Chapitre 3** de cette thèse est consacré à l'étude non-asymptotique de l'algorithme stochastique pour estimer un quantile. Le Corollaire 3.2.3 donne une inégalité à horizon fini sur le risque quadratique dans le cas où la densité est minorée sur son support. Cela permet d'identifier le pas de descente de gradient optimal. Nous proposons par ailleurs une synthèse des travaux effectués lors de cette thèse pour essayer de relâcher l'hypothèse de minoration de la densité.

Le **Chapitre 4** est consacré à l'étude non-asymptotique de l'algorithme permettant l'estimation du superquantile. Puisque que ce dernier nécessite l'estimation parallèle du quantile, nous nous plaçons pour cette étude, sous la même hypothèse que dans le Chapitre 3. La Proposition 4.2.4 donne une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique de cet algorithme lorsque l'estimation du quantile est faite avec son paramètre optimal. On notera que si l'on arrivait à relâcher les hypothèses pour établir le comportement non-asymptotique de l'algorithme pour estimer le quantile, la méthodologie développée dans ce chapitre pourrait être utilisée directement pour conclure quant au comportement de l'estimateur du superquantile.

Code stochastiques

BESOIN. Dans un contexte de code stochastique, il est exclu d'utiliser une méthode nécessitant la construction d'un échantillon d'inférence pour chaque entrée. Il faut donc construire une nouvelle stratégie d'estimation. Puisqu'en plus, dans la plupart des cas d'application, les codes stochastiques sont coûteux, il serait pertinent que cette nouvelle stratégie ait une forme propice à l'obtention de résultats non-asymptotiques.

APPORT DE LA THESE. Afin de conserver leur structure adaptée à l'obtention d'inégalités non-asymptotiques, nous avons décidé de plonger les précédents algorithmes dans

la méthode non-paramétrique des k -plus proches voisins. Cette localisation conduit à des algorithmes avec deux paramètres à régler : le pas de descente de gradient et le nombre de voisins.

Le **Chapitre 5** de cette thèse se propose ainsi d'étudier la version localisée de l'algorithme pour estimer le quantile. Le Théorème 5.2.4 donne des conditions sur les deux paramètres pour que l'estimateur produit soit fortement consistant. La suite du chapitre est consacrée à l'étude non-asymptotique. Nous proposons, à travers le Théorème 5.2.5, une inégalité à horizon fini sur le risque quadratique. L'optimisation de cette inégalité permet de trouver les paramètres les plus intéressants pour régler l'algorithme, c'est le Corollaire 5.2.8. Tous les résultats sont illustrés par des simulations numériques.

Dans le **Chapitre 6**, nous étudions l'algorithme localisé pour estimer le superquantile. Puisque cet algorithme comprend aussi une estimation du quantile, il y a quatre paramètres à régler (deux pas de descente de gradient et deux nombres de voisins). En utilisant les résultats du Chapitre 5, nous donnons dans le Théorème 6.2.2 des conditions sur ces paramètres pour que l'algorithme soit fortement consistant. Le Théorème 6.2.3 donne une inégalité à horizon fini sur le risque quadratique. Nous discutons du choix optimal des paramètres dans le Corollaire 6.2.5 et la Section 6.4.

Partie 3 : Estimation par planification d'expériences dans les codes numériques très coûteux

Lorsque les évaluations d'un code numérique sont vraiment trop coûteuses, il n'est pas pertinent d'utiliser une méthode d'estimation basée sur la construction d'un échantillon, même si la taille de cet échantillon peut être réduite. En effet, au lieu de tirer aléatoirement les entrées qui vont être évaluées, il est plus intéressant de les choisir pour sélectionner celles qui donneront le maximum d'information. Cependant, dès lors que ces points sont choisis, leur évaluation ne permet plus de former un échantillon de la loi de sortie. Il faut donc construire une toute nouvelle méthode d'estimation. Cette partie traite seulement de l'estimation du quantile dans ce contexte.

BESOIN. La recherche d'un bon plan d'expériences pour faire de l'inférence sur la sortie d'un code stochastique est un domaine qui suscite beaucoup d'intérêt. La grosse partie de la bibliographie concerne l'optimisation de la sortie du code, mais on peut trouver des travaux récents traitant de l'estimation du quantile. Il est maintenant très classique de faire l'hypothèse que la fonction du code est la réalisation d'un processus gaussien et de raisonner d'un point de vue bayésien en utilisant les formules de krigeage. Construire une méthode d'estimation dans ce contexte, c'est trouver un critère pour choisir le nouveau point à estimer et un estimateur séquentiel du quantile. Dans cette partie, nous ne nous intéresserons qu'aux critères reposant sur une fonction d'amélioration. Dans ce cadre, la méthode actuellement la plus performante pour estimer le quantile est une adaptation de la stratégie SUR, introduite pour estimer la probabilité de dépasser un seuil fixé. Cette méthode est performante lorsque la dimension des entrées est inférieure à 3. En revanche, sa complexité de calcul empêche son utilisation en dimension supérieure. Comme les codes utilisés dans les cas applicatifs ont souvent un nombre d'entrées bien supérieur à 3, il est nécessaire de trouver une méthode de planification tout aussi performante mais qui soit utilisable en dimension supérieure à 3.

APPORT DE LA THESE. Nous avons d'abord constaté que la forte complexité de calcul de la précédente méthode pouvait s'expliquer en grande partie par le choix d'un estimateur du quantile très peu manipulable. On ne peut en effet avoir accès à la valeur de cet

estimateur que par de lourdes simulations de processus gaussiens. Ainsi, dans le **Chapitre 7**, nous étudions un autre estimateur adapté au modèle gaussien. Nous montrons dans la Proposition 7.3.2 que cet estimateur est plus manipulable parce qu'il en existe une forme analytique. Nous proposons alors deux nouveaux critères basés sur cet estimateur. Les Propositions 7.3.4 et 7.3.5 donnent des formes analytiques pour ces deux critères. On peut alors remarquer que leur complexité de calcul est plus raisonnable parce qu'ils ne nécessitent aucune simulation de processus gaussien. Les simulations numériques de la fin du chapitre montrent que nos critères sont performants et qu'ils peuvent être utilisés en dimension plus grande que 3.

Introduction générale

Motivations

Dans cette thèse, nous nous attacherons à développer différents outils statistiques afin d'estimer des quantiles et des superquantiles dans des modèles de codes numériques et stochastiques.

Code numérique

Les codes ou expériences numériques, aussi appelés *computer experiments* sont, depuis les dernières décennies, un modèle fréquemment utilisé dans divers domaines scientifiques. Ils interviennent la plupart du temps pour émuler un système physique. Pour comprendre la notion de code numérique, il faut imaginer une boîte noire qui, lorsqu'on lui fournit une entrée x , retourne une sortie y après avoir effectué des calculs internes. On modélise donc naturellement de tels codes de la manière suivante. Soit $X \in \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$ un vecteur aléatoire représentant les entrées à fournir au code. Soit g une fonction de \mathbb{X} dans \mathbb{R} . La variable aléatoire réelle Y définie par

$$Y = g(X) \tag{1}$$

est la sortie du code numérique g . En fait, X représente les paramètres d'entrées auxquels nous avons accès (on peut les choisir, les faire varier, etc...) ; g est une fonction inconnue (qui représente la fonction interne du code que nous ne connaissons pas) et Y est la réponse du code (ce que nous observons). On notera que les entrées sont modélisées par une variable aléatoire pour pallier le manque de connaissance que nous avons. En effet, souvent, en pratique, les vraies valeurs de ces entrées sont indisponibles (soit parce que ce sont des grandeurs physiques que nous ne connaissons pas explicitement, soit parce que ce sont des données qu'on ne peut pas mesurer sans erreur, etc...).

Ces codes sont des outils performants pour modéliser un grand nombre de problèmes scientifiques. Ils sont en effet, l'objet idéal lorsque l'on veut inférer sur une quantité et que l'on sait quels paramètres influent sur cette dernière. On peut trouver de nombreux exemples dans la littérature. Apley et al. étudient par exemple dans [5], le bruit produit par un piston. La variable Y est donc le nombre de décibels produit par le piston. Les entrées (qui sont les paramètres qui influent sur la production de ce bruit) sont au nombre de trois. Deux d'entre elles sont facilement accessibles. La troisième en revanche, qui est le jeu sur l'alésage, n'est pas accessible (on ne peut pas la mesurer). L'auteur décide donc de mettre une loi normal sur ce paramètre d'entrée et utilise le modèle de code numérique.

De la même manière, Jala et al. veulent étudier dans [56] l'exposition aux ondes électromagnétiques d'un fœtus. Pour cela, ils utilisent une machine qui calcule un taux correspondant à la quantité d'ondes absorbées (appelé le SAR). Cette machine prend en entrée de nombreux paramètres comme la morphologie ou la posture de la mère, la position et le type d'émetteur d'ondes etc... A nouveau, il n'est pas possible de donner des valeurs exactes sur chacun de ces paramètres, c'est pourquoi les auteurs proposent d'utiliser la modélisation précédente (1) en mettant des lois uniformes (sur un support cohérent avec leurs connaissances) sur chacun des paramètres.

On peut trouver un autre exemple, appliqué cette fois à l'étude du risque d'inondation dans [6]. Arnaud et al. proposent dans ce papier, une étude du niveau de l'eau sous le modèle (1). Ce niveau peut-être expliqué par des paramètres d'entrée comme le débit et les frottements que subit l'eau, qui étant inconnus, sont modélisés par des variables aléatoires. Dans le même ordre d'idées, on peut trouver une étude du volume de stockage des égouts dans [74], une étude de la sécurité nucléaire dans [21], ...

Code stochastique

Nous venons de voir la définition d'un code numérique. Dans ce dernier, le hasard intervient seulement sur les entrées X . En effet, la fonction g , bien qu'inconnue, est complètement déterministe : si on fournit deux fois la même entrée au code numérique, il nous retournera deux fois la même réponse. Ainsi, dans les codes numériques, la modélisation est juste une manière de compenser notre manque de connaissance sur les entrées.

Dans cette partie, nous allons introduire les codes stochastiques pour lesquels il existe un deuxième niveau d'aléa. Dans ces derniers, les entrées sont toujours modélisées par des variables aléatoires mais on ajoute l'influence d'une graine aléatoire interne au code. Mathématiquement parlant, on peut modéliser un code stochastique de la manière suivante. Soit $X \in \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$ un vecteur aléatoire représentant les entrées à fournir au code. Soit $\epsilon \in \mathbb{R}^l$ un vecteur aléatoire (appelé graine aléatoire) qui est indépendant de X . Soit g une fonction de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^l$ dans \mathbb{R} . La variable aléatoire réelle Y définit par

$$Y = g(X, \epsilon) \tag{2}$$

représente la sortie du code stochastique g . Cette fois-ci, même si on fournit deux fois la même entrée au code, il peut nous retourner deux sorties différentes (qui correspondent à deux réalisations différentes de la graine ϵ).

Dans la littérature, de tels codes interviennent souvent lorsque la boîte noire doit avoir recours à des simulations Monte Carlo pour retourner sa réponse. Par exemple, Browne et al. introduisent dans [19] le simulateur VME. Ce simulateur, créé par l'entreprise EDF, permet de retourner la valeur d'un investissement (c'est-à-dire combien cet investissement va rapporter au final sachant combien il aura coûté à l'achat, en maintenance, etc...). Ce calculateur est utilisé pour créer un plan d'investissement c'est-à-dire, en simplifiant, pour dire s'il sera intéressant ou non d'investir une somme donnée dans un équipement. Ainsi, lorsque l'on présente un type d'investissement en entrée à ce calculateur, il est évident que nous ne savons pas encore, par exemple, quand et combien de fois il va tomber en panne. Le simulateur VME calcule donc la valeur de cet investissement en effectuant une boucle Monte Carlo sur tous les futurs possibles de l'objet étudié. Il s'agit bien d'un code stochastique puisque si l'on présente deux fois le même investissement au calculateur, les issues de son calcul Monte Carlo pouvant être différentes, il retournera probablement deux réponses différentes. On peut donc le modéliser par (2).

On peut trouver deux autres exemples de codes stochastiques dans [73]. Le premier concerne la sécurité nucléaire. Il modélise le comportement des composants d'un réacteur nucléaire lors d'un accident critique. Certains paramètres nécessaires à la compréhension de ce comportement sont très coûteux à calculer (même lorsque l'on considère une situation précise dont on connaît les entrées). Ainsi, les auteurs préfèrent, plutôt que de perdre du temps à les évaluer, programmer une boucle Monte Carlo à l'intérieur du calculateur, sur toutes les valeurs possibles de ces paramètres. Le second exemple concerne la chimie moléculaire. Moutoussamy et al. utilisent, toujours dans [73], un code stochastique pour calculer la masse volumique de la phase aqueuse d'un ensemble de molécules pentanes à l'équilibre. Pour chaque entrée (contenant toutes les informations sur les différentes molécules pentanes intervenant dans l'ensemble), le code applique une méthode Monte Carlo sur les différentes manières dont peut s'agencer le groupe (chaque agencement s'appelle un micro-état) et retourne la valeur de la masse volumique. Ici encore, le code est stochastique parce qu'il contient une boucle Monte Carlo. Cette boucle est ici mise en place pour pallier à un manque de connaissance (il n'est pas possible de savoir dans quel micro-état se trouve le groupe de pentanes).

Inférence dans des modèles de codes numériques et stochastiques

Lorsqu'on se place sous un modèle de code numérique ou stochastique, c'est parce qu'on souhaite faire de l'inférence sur la sortie. Évidemment, le travail n'est pas le même dans les deux cas, puisque ce sont deux objets différents. Dans un code numérique, la sortie correspondant à une entrée fixée x est un nombre réel. Ainsi, lorsqu'on parle de faire de l'inférence sur la sortie d'un code numérique, on veut dire que l'on souhaite obtenir des informations sur la loi entière de la sortie Y . Plusieurs types d'informations peuvent être recherchées sur cette sortie. On peut chercher à connaître entièrement la loi de Y , mais aussi des quantités d'intérêt plus précises, comme la moyenne, le quantile (voir [56], [6], ...), la probabilité de dépasser un certain seuil (voir [9]), ou encore le maximum (voir [18], [76], ...).

Lorsque l'on est dans le cadre d'un code stochastique, la sortie Y est aussi une variable aléatoire, mais il y a deux niveaux d'aléa : l'entrée X et la graine aléatoire ϵ . Ainsi, la sortie correspondant à une entrée x reste une variable aléatoire. Dans la suite, nous noterons

$$Y(x) = g(x, \epsilon)$$

la sortie correspondant à l'entrée x . Lorsque nous parlons de faire de l'inférence dans des codes stochastiques, nous voulons donc dire que nous cherchons à obtenir des informations sur la loi de la sortie $Y(x)$, pour une entrée x fixée. On parle alors de *cadre conditionnel*, puisqu'on travaille en quelques sortes *conditionnellement à une entrée x fixée*. A nouveau, on peut vouloir connaître toute la loi (voir [12] ou [19] pour la fonction quantile et [73] pour la densité par exemple), ou comme précédemment une quantité d'intérêt plus précise (ce qui est un objectif important de cette thèse comme on le verra plus loin). Il est cependant important de comprendre que ce travail statistique est complexe, puisque nous souhaitons certes étudier une sortie correspondant à une entrée x fixée, mais nous voulons être capable de le faire pour toute entrée $x \in \mathbb{X}$.

Vers une étude du risque

Dans cette partie, pour simplifier les notations, nous nous plaçons dans un cadre de code numérique : on souhaite inférer sur la loi de la sortie Y . Tout ce que nous écrirons pourra cependant facilement s'appliquer aux codes stochastiques en remplaçant Y par $Y(x)$ pour une entrée x quelconque.

Tout au long de cette thèse, nous considérons des codes dont la sortie est une quantité qu'il est important de savoir contrôler. Cela peut-être pour des raisons de santé (c'est le cas dans [56], où l'on calcule la quantité d'onde électromagnétiques absorbée par un fœtus), pour des raisons de sécurité (c'est le cas dans [21] où l'on traite des radiations dans le cas d'accidents des réacteurs nucléaires, ou dans [6] on l'on étudie le niveau de l'eau pour éviter les inondations), ou encore pour des raisons financières (le calcul du coût d'un investissement dans [19] est un bon exemple). Ainsi, nous allons plutôt chercher à estimer des quantités d'intérêt liées au *risque*. Pour cela, nous allons introduire la notion de mesure de risque.

Mesure de risque

Définition 0.0.1. *Une mesure de risque \mathcal{R} est une fonction définie sur l'espace des variables aléatoires et qui prend ses valeurs dans \mathbb{R} .*

A l'origine, cette notion a été créée par les financiers, pour quantifier le risque de leurs investissements. Les variables aléatoires considérées représentaient alors les portefeuilles des investisseurs. Même si cela ne fait pas partie de la définition, il paraît évident que seules les mesures de risques invariantes en loi (c'est-à-dire que la mesure de risque est constante

sur l'ensemble des variables aléatoire ayant la même loi) sont pertinentes. Il existe cependant beaucoup d'autres propriétés intéressantes concernant les mesures de risques. Nous y reviendrons dans la partie suivante.

Les mesures de risque ont bien entendu été introduites parce que leur valeur permet de prendre une décision (ce téléphone émet trop d'ondes pour être commercialisé, il faut évacuer la ville car la rivière va connaître une crue trop forte, il faut vendre l'action qui va nous coûter trop cher, ...). Il existe au moins deux mesures de risque classiques et naturelles.

- La probabilité de dépasser un seuil critique. Lorsqu'on connaît la valeur critique u de la sortie (la quantité maximale d'ondes électromagnétiques que peut absorber un fœtus sans que ce soit dangereux pour sa santé, le niveau maximum que peut atteindre une étendue d'eau pour ne pas dépasser la digue, la quantité de radiations maximale qui peut être émise à tel endroit sans avoir de conséquences grave sur l'environnement, etc...), on peut être intéressé par le calcul de la probabilité que notre code dépasse cette valeur

$$\mathcal{R}(Y) = u(Y) := \mathbb{P}(Y > u).$$

On peut alors se donner un niveau $\alpha \in]0, 1[$ (représentant l'erreur que l'on peut se permettre) et considérer que si $\mathcal{R}(Y) > \alpha$ alors le risque est trop important (et prendre une décision en conséquence).

- Le quantile. Il s'agit de la quantité duale de la précédente. Lorsqu'on sait quel pourcentage d'erreur $1 - \alpha$ avec $\alpha \in]0, 1[$ on peut se permettre, on peut calculer le nombre réel $q_\alpha(Y)$ tel que la probabilité que Y soit inférieur à $q_\alpha(Y)$ vaille au moins α . Ce nombre s'appelle le quantile et est défini de la manière suivante

$$\mathcal{R}(Y) = q_\alpha(Y) := F_Y^{-1}(\alpha)$$

où F_Y^{-1} est la fonction de répartition inverse de la loi de Y , à savoir

$$F_Y^{-1}(\alpha) := \inf\{x : F_Y(x) \geq \alpha\}.$$

Avec cette mesure de risque, on peut alors décider, connaissant la valeur critique u de notre code, que si $\mathcal{R}(Y) > u$, alors le risque est trop important (et prendre la décision qui s'impose).

Comme ces deux mesures de risques sont étroitement liées, on ne s'intéressera qu'à une seule des deux dans la suite : le quantile. Cette quantité est intéressante parce qu'il existe plusieurs manières de l'estimer, comme nous le verrons plus tard. Si ces deux mesures de risque sont assez intuitives, il en existe beaucoup d'autres. On peut alors se demander laquelle préférer aux autres et si il existe des critères permettant de caractériser une mesure de risque *intéressante*.

Le quantile n'est pas sous-additif

Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, la première propriété naturelle d'une mesure de risque est l'invariance en loi. En finance, une deuxième propriété importante est la sous-additivité.

Définition 0.0.2. Une mesure de risque \mathcal{R} est dite sous-additive si, et seulement si, pour tout couple (Z, Z') de variables aléatoires, on a

$$\mathcal{R}(Z + Z') \leq \mathcal{R}(Z) + \mathcal{R}(Z').$$

Cette propriété est cruciale en finance, dans le contexte des risques d'investissement. En effet, dans le cas où plusieurs financiers souhaitent investir dans le même placement et partager leur gain, elle assure que la stratégie la plus intéressante soit d'investir ensemble une grosse somme (plutôt que d'investir chacun une petite somme). Malheureusement le quantile ne vérifie pas cette propriété. En suivant [7], on peut facilement exhiber un contre exemple. Soient Z et Z' deux variables aléatoires indépendantes de même loi de densité

$$f(t) = 0.9 \times \mathbb{1}_{[-1,0]}(t) + 0.05 \times \mathbb{1}_{[0,2]}(t).$$

On a alors

$$q_{90\%}(Z) = q_{90\%}(Z') = 0$$

mais

$$\mathbb{P}(Z + Z' > 0) > \mathbb{P}(Z \in [0, 2]) + \mathbb{P}(Z' \in [0, 2]) = 10\%$$

donc $q_{90\%}(Z + Z') > 0$.

Les financiers ont alors souhaité construire des mesures de risques sous-additives. Rockafellar propose dans [82] de d'abord recenser des propriétés importantes pour une mesure de risque.

Mesure de risque cohérente

Rockafellar introduit dans son article [82] la notion de mesure de risque cohérente.

Définition 0.0.3. Soit une mesure de risque \mathcal{R} . Soient Z et Z' deux variables aléatoires réelles. On dit que \mathcal{R} est une mesure de risque cohérente si, et seulement si, elle satisfait les 5 axiomes suivants

- i) Invariance par les constantes :* soit $C \in \mathbb{R}$, si $Z = C$ (p.s) alors $\mathcal{R}(Z) = C$.
- ii) Homogénéité positive :* $\forall \lambda > 0$, $\mathcal{R}(\lambda Z) = \lambda \mathcal{R}(Z)$.
- iii) Sous-additivité :* $\mathcal{R}(Z + Z') \leq \mathcal{R}(Z) + \mathcal{R}(Z')$.
- iv) Croissance :* Si $Z \leq Z'$ (p.s) alors $\mathcal{R}(Z) \leq \mathcal{R}(Z')$.
- v) Fermeture :* Soit $(Z_h)_{h \in \mathbb{R}}$ une suite de variables aléatoires. Si $\mathcal{R}(Z_h) \leq 0$ et $\lim_{h \rightarrow 0} \|Z_h - Z\|_2 = 0$ alors $\mathcal{R}(Z) \leq 0$.

Au passage, nous noterons qu'il existe évidemment de multiples autres propriétés intéressantes à étudier sur les mesures de risque (convexité, croissance pour l'ordre stochastique, élicitabilité, robustesse, ...). Dans cette thèse, nous nous concentrerons plus particulièrement sur les cinq axiomes de la Définition 0.0.3. Pour plus d'informations concernant les autres propriétés étudiées dans la littérature, le lecteur pourra se rapporter à la thèse [26] ou aux articles [107], [106], [93], [69], [33], [110], ...

Il paraît alors légitime de rechercher des mesures de risques qui soient cohérentes. Il en existe maintenant de nombreuses (on peut trouver un résumé de la plupart de ces mesures de risques et de leur propriétés dans [26]). Dans cette thèse, nous allons nous intéresser à une de ces mesures de risque particulière : le superquantile.

Le superquantile

Rockafellar introduit dans [82], une nouvelle mesure de risque, appelée superquantile.

Définition 0.0.4. *Pour une variable aléatoire réelle Z , on appelle superquantile de Z de niveau $\alpha \in]0, 1[$ la quantité*

$$Q_\alpha := Q_\alpha(Z) = \mathbb{E}(Z|Z \geq q_\alpha(Z)) = \mathbb{E}(Z|Z \geq F_Z^{-1}(\alpha))$$

On notera que Q^α est toujours bien défini en tant qu'élément de $\bar{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$.

En effet, si l'espérance n'est pas fini, on peut la poser égal à $+\infty$. Nous avons effectivement

$$Q_\alpha = \frac{\mathbb{E}\left(Z \mathbb{1}_{Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)}\right)}{\mathbb{P}\left(Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)\right)} \geq F_Z^{-1}(\alpha) \frac{\mathbb{E}\left(\mathbb{1}_{Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)}\right)}{\mathbb{P}\left(Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)\right)} = F_Z^{-1}(\alpha).$$

Remarque 0.0.5. *En particulier, lorsque $F_Z\left(F_Z^{-1}(\alpha)\right) = \alpha$, la formule de Bayes donne*

$$Q_\alpha = \mathbb{E}\left(Z|Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)\right) = \mathbb{E}\left(\frac{Z \mathbb{1}_{Z \geq F_Z^{-1}(\alpha)}}{1 - \alpha}\right).$$

Dans cette thèse, nous considérerons toujours des variables aléatoires Z dont la distribution est continue (c'est-à-dire pour lesquelles F_Z est continue et donc où $F_Z\left(F_Z^{-1}(\alpha)\right) = \alpha$).

Cette quantité prend une place importante dans le monde financier. Elle est particulièrement intéressante parce que, d'abord, c'est une mesure de risque cohérente (on peut trouver la preuve de ce résultat dans [77], [75] ou [3]). Mais elle a un autre gros avantage par rapport au quantile classique. La pertinence de ce dernier est assez souvent remise en question lorsque l'on parle de mesure de risque, parce qu'il ne donne aucune information sur ce qu'il se passe dans la queue de distribution de la variable aléatoire considérée. En effet, deux variables aléatoires ayant des queues de distribution complètement différentes peuvent avoir le même quantile.

C'est le cas par exemple pour les deux variables aléatoires Z et Z' telles que Z suit une loi gaussienne standard et Z' a pour densité

$$f = 0.95 \times \mathbb{1}_{[0,64,1,64]} + 0.05 \times \mathbb{1}_{[1,64,2,64]}.$$

Le quantile à 95% de ces deux variables aléatoires vaut 1,64 alors que les queues de distributions sont très différentes.

Lorsque l'on calcule le superquantile, on fait la moyenne de la variable aléatoire au-delà de son quantile, nous avons donc accès à plus d'information sur ce qu'il se passe dans la queue de distribution.

Ce sont ces deux mesures de risque, le quantile et le superquantile, qui vont nous intéresser tout au long de cette thèse.

Le cas des codes coûteux

Faire de l'inférence statistique, c'est induire des caractéristiques d'une loi inconnue (ici le quantile ou le superquantile), à partir d'un échantillon de cette loi. En clair, il s'agit de construire un estimateur de notre paramètre d'intérêt à partir des seules données d'un échantillon de la loi. Il faut donc dans un premier temps, construire un tel échantillon d'inférence.

Comme dans notre contexte, la loi cible est la loi de sortie du code, on comprend aisément que chaque élément de l'échantillon sera issu d'un appel au code.

Dans le cas d'un code numérique, on va tirer un échantillon $(X_i)_{i=1,\dots,n}$ indépendant et distribué selon la loi de X et le fournir en entrée au code. Ce dernier retournera un échantillon $(Y_i)_{i=1,\dots,n}$ de réponses indépendantes et de même loi que Y . Dans le cas des codes stochastiques, le problème est plus compliqué. Dans l'idéal, on souhaiterait un échantillon de loi $Y(x)$ pour tout x . Cela n'est évidemment pas réaliste, d'autant qu'en pratique, les codes numériques ou stochastiques sont très coûteux. Cela signifie qu'un appel au code peut demander plusieurs jours de calculs. Ceci peut se comprendre aisément avec les cas d'applications que nous avons présenté au départ. Par exemple, dans le problème de l'absorption d'ondes électromagnétiques par un fœtus, bien qu'il s'agisse d'un code numérique, il faut plusieurs jours pour obtenir le calcul du taux dans une situation précise. En effet, puisqu'on ne peut pas faire les mesures directement sur des femmes enceintes, il faut utiliser des mannequins dont la préparation prend plusieurs heures. Il faut ensuite ajouter le temps des prises de mesures puis le temps de calculs de la machine. Cela conduit à un temps total de plusieurs jours. Dans le cas des codes stochastiques, le problème est encore plus important, puisque s'ajoute à ce qu'on vient d'expliquer, les boucles Monte Carlo, qui forcent à faire les calculs un grand nombre de fois.

Ainsi, il est inconcevable de construire, dans le cadre stochastique, un échantillon différent pour toute entrée x . Il faut donc mettre en place une méthode permettant une bonne approximation des quantiles et superquantiles pour chacune de entrées x , mais utilisant le même échantillon d'inférence. La mise en œuvre d'une telle méthode est l'une des contributions de cette thèse (voir Partie 2).

Sous l'hypothèse des codes coûteux, le problèmes des codes numériques devient aussi plus compliqué. Comme nous venons de le voir, un échantillon d'inférence de taille n nécessite n appels au code. Évidemment, plus on va faire d'appels au code, plus on aura d'informations disponibles et donc plus notre estimation sera précise. Mais le temps de calcul trop important nous empêche de construire un trop grand échantillon d'inférence. Il va donc falloir réfléchir à des méthodes qui nécessitent un échantillon de taille restreinte. Par ailleurs, si on ne peut pas observer la sortie du code sur beaucoup d'entrées, il sera peut-être judicieux de choisir *intelligemment* les points en lesquels on veut pouvoir observer la sortie (c'est le sujet de la Partie 3 de cette thèse).

Enfin, on pourra noter que les résultats théoriques souhaités dans un cadre coûteux sont complètement différents de ceux recherchés dans le cadre classique. En effet, lorsque nous pouvons faire un très grand nombre d'appels au code, nous recherchons seulement une estimateur dont le comportement asymptotique est intéressant (c'est la Partie 1 de cette thèse). Dans cette thèse, on s'intéressera principalement aux propriétés asymptotiques suivantes.

Définition 0.0.6. Soit Z une variable aléatoire à valeur dans \mathbb{R} . Soit (Z_1, \dots, Z_n) un échantillon indépendant de même loi que Z . Soit θ un paramètre d'intérêt de la loi de Z . L'estimateur $\theta_n = f(Z_1, \dots, Z_n)$ (où f est une fonction qui ne dépend pas de θ) est

- consistant si $\theta_n \xrightarrow{\mathbb{P}} \theta$.
- fortement consistant si $\theta_n \xrightarrow{p.s} \theta$.
- normalement asymptotique de vitesse v_n si il existe une variance σ^2 telle que

$$v_n(\theta_n - \theta) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

Si rien n'est précisé sur la vitesse, c'est que $v_n = \sqrt{n}$.

Lorsque le code est coûteux, il n'y a que peu d'intérêt à chercher des résultats asymptotiques puisque nous n'avons aucune garantie de pouvoir faire assez d'appels au code pour entrer dans le régime asymptotique. Ce qui nous intéresse dans ce cadre, c'est plutôt de connaître la précision que l'on peut espérer lorsque l'on peut se permettre un budget de N appels au code. A l'inverse, on peut aussi être intéressé par le budget nécessaire pour obtenir une précision fixée. Les résultats menant à ce type de conclusion sont appelés résultats non-asymptotiques. Il en existe de différentes sortes. Dans cette thèse, nous nous attacherons plutôt à montrer des inégalités non-asymptotiques sur le risque quadratique de nos estimateurs (c'est l'objet de la Partie 2 de cette thèse).

Définition 0.0.7. *Soit θ_n est un estimateur de θ . Le risque quadratique de θ_n est la quantité notée a_n*

$$a_n(\theta_n) = \mathbb{E} \left[(\theta_n - \theta)^2 \right].$$

On notera que cette quantité est très pertinente pour mettre en avant une erreur d'estimation puisqu'elle se décompose très facilement en la somme des erreurs suivantes

$$a_n(\theta_n) = [\mathbb{E}(\theta_n - \theta)]^2 + \text{Var}(\theta_n)$$

appelées erreur de biais et erreur de variance. Nous reviendrons sur ces deux types d'erreur dans la Partie 2. Nous verrons en particulier que pour minimiser le risque quadratique, il faut faire un compromis entre ces deux erreurs qui évoluent dans des sens opposés.

Définition 0.0.8. *Une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique a_n d'un estimateur θ_n de θ est une inégalité de la forme suivante. A partir du rang N_0 explicitement connu et raisonnablement petit,*

$$a_n(\theta_n) \leq v_n$$

où v_n est une suite réelle.

Il est important que N_0 ne soit pas trop grand et explicitement connu pour que l'inégalité soit bien non-asymptotique. Avec une telle information, on peut ensuite conclure, que si on dispose d'un budget de N appels au code, on peut espérer avoir un risque quadratique de v_N . De même si l'on souhaite une précision de $p\%$, il faut un budget N tel que $v_N = p\%$.

Problématique et annonce du plan

Pour résumer, dans cette thèse, nous considérons des modèles de codes numériques ou stochastiques dont les cas pratiques d'applications sont courants dans divers domaines scientifiques. Nous souhaitons faire de l'analyse de risque sur la sorties de ces codes en estimant les mesures de risque que sont le quantile et le superquantile. Nous essayerons donc, tout au long de cette thèse de répondre aux questions suivantes. Quels outils statistiques peut-on développer pour estimer les quantiles et superquantiles des sorties de codes numériques et stochastiques classiques et coûteux ? Comment peut-on gérer le problème des codes coûteux ? Y a-t-il des outils plus adaptés aux codes numériques ? Aux codes stochastiques ? Quelle est la performance de ces outils ? Comment fonctionnent-ils en pratique et quelles sont les garanties théoriques que nous pouvons obtenir ?

Cette thèse se décompose en trois parties chacune concernant une manière différente d'estimer nos quantités d'intérêt. La première partie traite de la manière la plus directe

d'estimer nos paramètres, à savoir l'estimation empirique. Cette méthode est plus adaptée au code numérique sans problème de coût de calcul. Pour répondre aux questions concernant les codes stochastiques et intégrer l'hypothèse des codes coûteux, nous étudierons dans une deuxième partie une méthode d'estimation séquentielle : les algorithmes stochastiques. Enfin, pour réduire encore les temps de calculs dans les codes numériques très coûteux, nous proposerons, dans une troisième partie, une méthode de planification.

Dans la suite de cette introduction, nous allons, pour chacune de ces trois parties, faire un état de l'art. Nous mettrons ensuite en avant les problèmes encore ouverts auxquelles nous essayerons d'apporter une réponse dans cette thèse.

Estimation empirique

Dans cette partie, nous nous plaçons dans le cadre d'un code numérique sans contrainte particulière sur le coût de calcul.

Le cas du quantile

Estimateur

On rappelle que l'on cherche à estimer le quantile de la sortie réelle Y définie par le modèle

$$Y = g(X)$$

où X est à valeurs dans $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$ est un vecteur aléatoire dont on connaît la loi et g est une fonction inconnue. Les seules informations que nous avons à notre disposition sont l'échantillon (Y_i) dont nous avons déjà parlé. La première idée naturelle pour estimer ce quantile, est de chercher l'élément de l'échantillon pour lequel il y a une proportion au plus $1 - \alpha$ des autres éléments de l'échantillon qui le majore. Cette idée peut se finaliser grâce aux statistiques d'ordre. En triant l'échantillon par ordre croissant, on le renomme de la manière suivante

$$Y_{(1)} \leq Y_{(2)} \leq \dots \leq Y_{(n)}.$$

L'estimateur précédemment mentionné est alors

$$q_n = Y_{(\lfloor n\alpha \rfloor + 1)}. \quad (3)$$

En effet, il y a bien $\frac{n - \lfloor n\alpha \rfloor}{n}$ éléments de l'échantillon qui sont supérieurs à q_n . Lorsque n tend vers l'infini, cette quantité tend bien vers le ratio $1 - \alpha$. On notera qu'il existe diverses manières de définir l'estimateur du quantile empirique. On pourra se reporter à [53] pour une étude des différentes définitions ainsi que de leurs propriétés. Dans le régime où nous étudions ces estimateurs, le choix de la version n'est pas crucial. Ainsi, dans cette thèse, nous travaillerons uniquement avec l'estimateur empirique du quantile (3) précédemment introduit.

Comportement asymptotique

Puisque nous sommes ici dans un cadre non coûteux, nous avons déjà vu que la mise en œuvre de résultats asymptotiques était suffisante (il n'y a pas de souci pour faire un grand nombre d'appels au code). Cet estimateur du quantile est certainement le plus vieux. Toutes ses propriétés statistiques sont connues. On peut trouver un résumé de ces propriétés dans [92] à partir de la page 74. En particulier, le théorème de Glivenko-Cantelli (voir [13] p

268) permet de montrer que cet estimateur est fortement consistant. On peut aussi montrer que, sous réserve d'existence d'une densité strictement positive en le quantile, l'estimateur est normalement asymptotique. Nous reviendrons plus longuement sur ces résultats dans la première partie de cette thèse.

Finalement, il existe un estimateur assez naturel du quantile dont on connaît très bien les propriétés asymptotiques. Dans la partie précédente, nous avons cependant expliqué pourquoi il était plus intéressant de considérer le superquantile, lorsque nous voulions quantifier des risques. Voyons donc comment estimer le superquantile de manière empirique.

Le cas du superquantile

Comme nous l'avons vu précédemment, le superquantile est une quantité qui est beaucoup utilisée dans le monde de la finance. Plusieurs auteurs se sont donc déjà penchés sur le problème de l'estimation empirique du superquantile (voir par exemple [59],[28] ou encore [32]). Dans tous les cas, l'estimateur proposé est aussi intuitif que celui du quantile. Lorsque l'on souhaite estimer une moyenne, il est naturel d'utiliser la moyenne empirique.

Définition 0.0.9. *Soit Z une variable aléatoire. Soit $(Z_i)_{i=1,\dots,n}$ un échantillon indépendant de même loi que Z . L'estimateur empirique de la moyenne est*

$$\bar{Z}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_i.$$

Évidemment, nous connaissons très bien le comportement asymptotique de cet estimateur, grâce à la loi des grands nombres et au théorème de la limite centrale.

Ici, on souhaite estimer la moyenne de la loi de Y là où Y est supérieur à son quantile (qui s'estime, comme on vient de le dire, par $Y_{(\lfloor n\alpha \rfloor + 1)}$). Il est donc naturel d'estimer le super quantile par la quantité (renormalisée par $1 - \alpha$ venant de la formule de Bayes, voir Remarque 0.0.5).

$$Q_n = \frac{1}{(1 - \alpha)n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n Y_{(i)}.$$

Concernant le comportement asymptotique de cet estimateur, c'est plus compliqué. En effet, suivant les domaines précis de la finance, les auteurs ne le définissent pas forcément de la même manière (il y a notre définition qui vient de Rockafellar ; mais le superquantile est aussi un élément particulier d'ensembles de mesures (comme les mesures de distorsions dont nous reparlerons dans la Partie 1)). Finalement, il n'est pas aisé de trouver, dans la littérature, un théorème clair et direct sur le comportement asymptotique d'un estimateur empirique du superquantile. Les hypothèses sont par exemple souvent trop fortes parce qu'elles s'appliquent à une classe plus générale d'estimateurs. Parfois encore, les résultats obtenus sont très théoriques et ne présentent pas de variances asymptotiques explicites, ou donnent des hypothèses très compliquées à vérifier en pratique. Enfin, il arrive que les preuves fassent appels à des théorèmes très puissants, pas forcément nécessaires pour le cas simple du superquantile, qui cachent les raisons mathématiques et intuitives des résultats.

Ainsi, dans la première partie de cette thèse (chapitre 1), nous nous proposons de démontrer de manière directe et auto-contenue les propriétés sur le comportement asymptotique de notre estimateur. Lorsque nous aurons mis en avant les hypothèses minimales à la consistance et à la normalité asymptotique de notre estimateur, nous pourrons constater qu'elles sont facilement vérifiables et qu'elles s'appliquent à une grande partie des distributions. Cependant, nous verrons aussi qu'on peut trouver des lois usuelles pour lesquelles le théorème ne

s'appliquent pas, ou seulement partiellement. Pire encore, il existe des lois pour lesquelles le superquantile n'est pas fini. Après avoir analysé le problème, nous proposerons alors une nouvelle mesure de risque qui sera définie pour plus de distributions et dont l'estimation empirique sera statistiquement plus performante. Nous appellerons cette mesure, construite grâce au superquantile et à la divergence de Bregman (que l'on définira dans la Partie 1) le superquantile de Bregman. La suite de la première partie (chapitre 2) sera donc consacrée à l'étude de l'estimation empirique du superquantile de Bregman. Nous terminerons cette première partie par la présentation d'un cas applicatif industriel fourni par EDF.

Estimation empirique dans le cas des codes stochastiques et des codes coûteux

Lorsque l'on se place dans le cadre d'un code stochastique, nous rappelons que nous souhaitons estimer le quantile ou le superquantile, à une entrée x fixée de la loi de $Y(x) = g(x, \epsilon)$. Dans un premier temps, on peut donc penser à utiliser directement ce qui précède : on fournit un grand nombre de fois l'entrée fixée x à notre code. Il nous retourne alors à chaque fois une observation différente (puisque c'est un code stochastique) qui donne un échantillon $(Y(x)_i)_{i=1, \dots, n}$ indépendant de même loi que $Y(x)$. Tous les résultats précédents s'appliquent donc facilement.

Évidemment, la plupart du temps, le problème n'est pas aussi simple. En effet, nous souhaitons obtenir un estimateur qui nous donne une bonne estimation d'un quantile et du superquantile conditionnel à une entrée fixée mais ceci pour toutes les entrées x de l'ensemble \mathbb{X} . La méthode précédente nous force à construire un échantillon différent pour chaque entrée x et nous fait appliquer une méthode indépendante pour chacune de ces entrées. Ce n'est donc pas une méthode satisfaisante. Nous voudrions plutôt trouver une méthode d'estimation que nous pourrions appliquer pour toutes les entrées x , en ayant à disposition un seul échantillon commun. L'estimation empirique n'est pas un bon outil pour traiter des codes stochastiques.

Le problème est le même pour les codes numériques coûteux, pour lesquels on ne peut pas se permettre de construire un échantillon trop grand.

Pour pallier à ce problème, nous avons déjà vu que nous souhaitons utiliser des estimateurs pour lesquels on peut écrire des inégalités non-asymptotiques. Pour écrire des telles inégalités, il est beaucoup plus facile de travailler avec des estimateurs séquentiels à un pas. C'est à dire des estimateurs dont la valeur à l'étape $n + 1$ est reliée à la valeur à l'étape n par une relation du type (pour les codes numériques)

$$\theta_{n+1} = f_n(\theta_n, X_{n+1}, Y_{n+1}).$$

En clair, on peut mettre à jour θ_n en θ_{n+1} en ayant accès seulement à l'information disponible jusqu'à l'étape n (c'est à dire à $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$) et à la nouvelle observation (X_{n+1}, Y_{n+1}) .

Il est possible d'écrire l'estimateur empirique du quantile de manière séquentielle (il suffit de regarder où s'ordonne la nouvelle observation). Cependant, il existe une classe d'estimateurs pour lesquels la littérature montre qu'il est plus simple d'écrire des inégalités non-asymptotiques. Il s'agit des algorithmes stochastiques que nous allons étudier dans la deuxième partie de cette thèse.

Estimation séquentielle par algorithme stochastique

Algorithmes de type Robbins-Monro

Lorsque l'on souhaite approcher le zéro d'une fonction déterministe $h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, on peut penser à appliquer un algorithme du gradient. Cependant, ce dernier fait intervenir le gradient de la fonction h que l'on doit évaluer en plusieurs points. Pour les cas où ces informations ne sont pas disponibles (par exemple lorsque la fonction h dépend de la fonction de répartition d'une loi inconnue), Robbins et Monro introduisent dans [80] les algorithmes stochastiques. Leur forme est la suivante.

$$\begin{cases} \theta_0 \in \mathbb{R}^d \\ \theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} H(\theta_n, Z_{n+1}) \end{cases} \quad (4)$$

où (θ_n) est une suite de \mathbb{R}^d , (γ_n) est une suite déterministe de pas et (Z_n) un échantillon i.i.d permettant de relier la fonction H à la fonction h par la formule

$$\mathbb{E}(H(\theta_n, Z_{n+1}) | \mathcal{F}_n) = h(\theta_n),$$

où $\mathcal{F}_n := \sigma(Z_1, \dots, Z_n)$ est la tribu du passé.

De nombreux algorithmes entrent dans la catégorie précédente. Ainsi, beaucoup d'auteurs ont étudiés leur comportement sous diverses hypothèses. D'un point de vue asymptotique, Robbins et Monro ont montré dans [80], sous certaines hypothèses sur h , la convergence en moyenne quadratique. La convergence presque-sûre a été prouvée de différentes manières ou sous différentes hypothèses par Blum dans [14] et Schreck and al. dans [91]. Fabian, Ruppert et ensuite Sacks ont étudié la vitesse asymptotique de convergence respectivement dans [41], [87] et [88]. Dans [108], Woodroffe travaille sur les probabilités de déviations.

Voyons comment l'estimation du quantile s'insère dans ce type d'algorithmes.

Estimation du quantile par algorithme stochastique dans le cadre des codes numériques

Le quantile dans les codes numériques est un exemple classique de cible possible pour ce type d'algorithmes stochastiques. En effet, le quantile de niveau α ($0 < \alpha < 1$) de $Y = g(X)$ est le zéro de la fonction $h(t) = F_Y(t) - \alpha$ où F_Y est la fonction de répartition de la loi de Y . Ainsi, si l'on souhaite appliquer un algorithme de descente de gradient usuel pour cette fonction déterministe, on va devoir évaluer les fonctions de densité (si elle existe) et de répartition de Y en différents points du support de \mathbb{X} . C'est problématique, puisque nous ne connaissons pas la loi de Y (sinon on aurait directement accès à son quantile). On va donc utiliser un algorithme stochastique. Ayant à disposition un échantillon indépendant (Y_i) de même loi que Y , on considère l'algorithme stochastique

$$\begin{cases} q_0 \in \mathbb{R} \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \end{cases} \quad (5)$$

où $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1]$. Ce paramètre s'appelle le pas de la descente de gradient de l'algorithme. Il est alors clair que le point essentiel à l'étude de cet algorithme sera le réglage de ce paramètre.

Cet algorithme est classique. Il s'insère dans un cadre d'algorithmes de Robbins-Monro avec des hypothèses usuelles (la fonction H est ici relativement simple). Son comportement asymptotique est maintenant bien connu. Robbins et Monro ont d'abord montré que cet

algorithme est fortement consistant dès lors que $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1]$. De plus, le Théorème 13 de [11] affirme que l'algorithme est normalement asymptotique dès lors que $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1[$. La vitesse est alors en $\sqrt{\gamma_n}$. Le cas $\gamma = 1$, est un peu à part. Mais, sous certaines hypothèses sur lesquelles nous reviendrons par la suite en Partie 2, la normalité asymptotique est aussi vraie avec vitesse \sqrt{n} (comme on peut le voir dans le Théorème 2.2.12 de [40]).

Ces résultats sont très intéressants parce qu'ils montrent que le meilleur pas à choisir pour faire tourner l'algorithme est probablement le pas $\gamma_n = n^{-1}$ (c'est bien celui qui donne la meilleure vitesse). Cette remarque est au cœur des travaux actuels sur l'étude non-asymptotique des algorithmes stochastiques. En effet, le challenge dans ce domaine reste de montrer que cette vitesse optimale peut être atteinte dans les différents modèles considérés. Nous y reviendrons plus en détails dans la Partie 2 de cette thèse.

On notera que d'autres résultats sont disponibles sur cet algorithme. Woodroofe étudie par exemple dans [108] des grandes déviations et Gaposkin et al. prouvent dans [46] une loi du logarithme itéré.

Comme expliqué précédemment, ce sont plutôt des résultats non-asymptotiques qui nous intéressent dans notre contexte de codes numériques dont l'évaluation coûte relativement cher. La recherche de ce genre de résultats est un sujet de recherche actuel qui a suscité beaucoup d'intérêt dernièrement. Cependant il n'y a pas encore peu de résultats généraux dans la littérature ; les hypothèses étant encore relativement fortes (et nous le verrons plus tard, elles ne s'appliquent pas à notre cas du quantile). Moulines et al. propose dans [72] des inégalités non-asymptotiques sur le risque quadratique dans le cadre d'hypothèses de forte convexité. Ils montrent que la vitesse optimale en n^{-1} est atteinte lorsque l'on prend des pas $\gamma_n = n^{-1}$. Enfin, Cardot et al. et Godichon dans [22] et [51], donnent des bornes de concentrations pour l'estimation de la médiane, mais dans un cadre hilbertien. Dans ce papier, il est seulement question de pas $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1[$. Le cas où $\gamma = 1$ est plus difficile à traiter pour des raisons techniques sur lesquelles nous reviendrons.

Dans le chapitre 3 de la deuxième partie de cette thèse, nous nous proposons d'expliquer pourquoi l'algorithme pour estimer le quantile n'entre pas dans le cadre des articles précédemment cités. Nous expliquerons les points bloquants pour adapter les preuves. Nous proposerons alors un résultat de borne non-asymptotique dans le cas d'une loi à support borné et présenterons les difficultés nous empêchant de généraliser ce résultat. Nous discuterons aussi de l'influence du choix des pas sur les vitesses obtenues, en constatant que le cas $\gamma_n = n^{-1}$ qui semble être le plus intéressant est aussi le plus compliqué à traiter.

Estimation du superquantile par algorithme stochastique dans les modèles de codes numériques

On se pose ensuite la question de l'estimation du superquantile dans les codes numériques. Dans toute la deuxième partie de cette thèse, nous omettrons la constante $(1 - \alpha)^{-1}$ de la Remarque 0.0.5. Ainsi, nous cherchons à estimer la quantité $\mathbb{E}(Z \mathbb{1}_{Z > F_Z^{-1}(\alpha)})$ que nous appelons toujours superquantile. Pour obtenir une estimation du *vrai* superquantile, il suffit de multiplier les estimateurs étudiés par $(1 - \alpha)$. Deux choses principales sont à remarquer dans ce but. D'abord, le superquantile dépend complètement du quantile, puisqu'il s'agit de la moyenne de Y au delà de son quantile. Lorsque nous sommes face à une loi inconnue Y , nous ne connaissons ni son quantile ni son superquantile. Ainsi, il va nous falloir estimer le quantile dans un premier temps, pour pouvoir estimer le superquantile dans un second temps. La seconde remarque importante, c'est que le superquantile n'est rien d'autre qu'une moyenne (celle de la loi tronquée au dessus du quantile). Or, il existe un algorithme stochastique

permettant d'estimer la moyenne d'une loi. Cet algorithme très simple est juste une réécriture récursive de la moyenne empirique : pour estimer la moyenne de la loi de Z lorsqu'on a à disposition un échantillon indépendant de même loi que Z noté $(Z_i)_i$, on utilise l'estimateur de la moyenne empirique \overline{Z}_n . Cet estimateur peut se mettre sous la forme itérative suivante

$$\overline{Z}_{n+1} = \overline{Z}_n + \frac{1}{n+1} (Z_{n+1} - \overline{Z}_n).$$

Évidemment cet algorithme stochastique se comporte très bien de manière asymptotique, par la loi des grands nombres et le théorème de la limite centrale.

En utilisant ces deux remarques, Bardou et al. ont l'idée dans [8], d'introduire le double algorithme suivant permettant d'estimer pas à pas, à la fois le quantile et le superquantile.

$$\begin{cases} (q_0, Q_0) \in \mathbb{R}^2 \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \\ Q_{n+1} = Q_n + \frac{1}{n+1} (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n). \end{cases}$$

où q_n est donc un estimateur du quantile, $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1]$ (la première partie de l'algorithme est l'algorithme de notre partie précédente) et Q_n est un estimateur du superquantile. De manière plus générale, ils proposent aussi l'étude de cet algorithme

$$\begin{cases} (q_0, Q_0) \in \mathbb{R}^2 \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1}^q (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \\ Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \end{cases} \quad (6)$$

où $\gamma_n^Q = n^{-\gamma^Q}$ avec $\gamma^Q \in]0, 1]$ est une suite de pas plus générale. Les auteurs traitent du comportement asymptotique de cet algorithme. Ils montrent que ce double algorithme est presque-sûrement convergent pour γ^Q et γ^q dans $]\frac{1}{2}, 1]$. De plus, ils proposent un théorème de la limite centrale bi-dimensionnel (avec vitesse \sqrt{n}) dans le cas où $\gamma_n^q = \gamma_n^Q = n^{-1}$ pour la version moyennée de leur algorithme (c'est-à-dire qu'à chaque étape, ils prennent non pas q_n ou Q_n mais la moyenne de tous les q_i et de tous les Q_i jusqu'à l'étape n). Cette idée de moyennisation n'est pas nouvelle. Elle a été introduit par Polyak et al. dans [78] dans le but d'accélérer la vitesse de convergence de l'algorithme classique. Nous ne développerons pas ce sujet dans cette thèse. L'étude du double algorithme classique, et pour des choix différents de γ_n^q et γ_n^Q n'a pas été traité pour des difficultés techniques.

Dans le chapitre 4 de notre deuxième partie, nous reviendrons sur l'algorithme (6) pour en étudier des bornes non-asymptotiques. Nous discuterons sur le choix de γ_n^Q et γ_n^q et sur la pertinence de les choisir égaux ou différents.

Estimation du quantile par algorithme stochastique dans le cadre des codes stochastiques

Nous nous intéressons maintenant au problème de l'estimation de quantile dans le cadre des codes stochastiques. Tout comme nous l'avons expliqué dans la partie concernant l'estimation empirique, il est exclu de construire, pour chaque entrée x fixée, un échantillons $(Y(x)_i)_{i=1, \dots, n}$ puis d'appliquer l'algorithme stochastique du quantile précédemment détaillé. En effet, nous souhaitons plutôt construire ici une méthode qui fonctionnerait de la manière suivante. On construirait d'abord un échantillon Y_i en fournissant au code des entrées X_i (où les $(X_i)_{i=1, \dots, n}$ sont un échantillon indépendant de la même loi que X). Ensuite,

on appliquerait un algorithme qui dépendrait de chaque x fixé, mais qui, dans tous les cas, n'utiliserait que les informations résumées dans l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$. Le problème est donc difficile, parce qu'il faut trouver un algorithme permettant, pour un x fixé, d'estimer le quantile conditionnel de la loi de sortie correspondant à l'entrée x , mais cela en utilisant des observations Y_i dont la plupart (si ce n'est toutes) provienne d'une loi qui n'est pas celle dont on veut estimer le quantile.

Intuitivement, on se dit qu'il va falloir ne considérer, dans l'algorithme concernant l'entrée x , seulement les observations de notre échantillon qui seront des réalisations d'une loi proche de celle que l'on cible. Une manière naturelle de le faire est de considérer, pour l'algorithme concernant x , seulement les observations Y_i issues d'une entrées *proche* x et de se restreindre aux codes stochastiques ayant des propriétés de continuité (qui traduiront le fait que les lois de sorties correspondant à deux entrées différentes mais proches, ne seront pas trop différentes). Nous allons pour cela utiliser la méthodes des k plus proches voisins.

Définition 0.0.10. *Soit Z une variable aléatoire à valeur dans \mathbb{R}^d que l'on munit de la norme euclidienne. Soit $\mathbf{Z} := (Z_1, \dots, Z_n)$ un échantillon indépendant de même loi que Z . Soit a un élément du support de Z . Pour une suite d'entiers naturels (k_n) , on note $kNN_n^Z(a)$ l'ensemble des k_n plus proches voisins de a parmi l'échantillon \mathbf{Z} . Il s'agit de l'ensemble des k_n éléments de l'échantillon \mathbf{Z} les plus proches de a au sens de la norme euclidienne. En d'autres termes, si $i \in \{1, \dots, n\}$, on a*

$$Z_i \in kNN_n^Z(a) \iff \|Z_i - a\| \leq \|Z - a\|_{(k_n, n)},$$

où $\|Z - a\|_{(k_n, n)}$ désigne la k_n -ème statistique d'ordre de l'échantillon $\|\mathbf{Z} - a\|$ de taille n . On note alors $I_{kNN_n^Z(a)}^Z$ l'ensemble des indices des éléments de \mathbf{Z} appartenant $kNN_n^Z(a)$.

$$I_{kNN_n^Z(a)}^Z = \{i \in \llbracket 1, n \rrbracket / Z_i \in kNN_n^Z(a)\}.$$

L'idée de mélanger des arguments classiques d'estimation avec la théorie des k plus proches voisins pour faire de l'estimation conditionnelle est assez courante. Elle est apparue dans un premier temps pour l'estimation de la moyenne dans le cadre de la régression. Stone construit en effet dans [97] et [98] un estimateur de la moyenne de la sortie $Y(x)$ basée sur les k_n plus proches voisins. Le but dans ces papiers est donc d'estimer $\mathbb{E}(Y(x))$. Son idée consiste à considérer la moyenne empirique mais seulement basée sur les sorties issues des k_n entrées les plus proches de x . Mathématiquement, il propose d'estimer cette moyenne par l'estimateur

$$m_n = \frac{1}{k_n} \sum_{i \in I_{kNN_n^X(x)}} Y_i.$$

Le travail principal de l'étude de cet estimateur réside alors en le choix du nombre de voisins k_n . L'auteur donne des conditions sur k_n pour que l'estimateur soit consistant.

Toutes ces idées sont plus tard utilisées dans un cadre très proches du notre. Bhattacharya et al. introduisent dans [12] un estimateur non séquentiel pour la fonction de quantile, dans un contexte où les entrées sont réelles ($d = 1$ chez nous). L'estimateur proposé est

$$q_n := \inf \left\{ z : \widehat{G}_{k_n, n}(z) \geq \frac{\lfloor k_n \alpha \rfloor}{k_n} \right\}$$

avec

$$\widehat{G}_{k,n}(z) = \frac{1}{k_n} \sum_{i \in I_{k_n NN_n^X(x)}} \mathbb{1}_{Y_i \leq z}$$

En fait, cet estimateur est l'inverse généralisée de la fonction de répartition empirique, calculée sur les k_n réponses correspondant aux k_n plus proches voisins de x . Les auteurs choisissent de plus un nombre de voisins de la forme $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ avec $\beta \in]0, 1]$. Ils étudient alors comment bien choisir β pour obtenir un bon compromis entre l'erreur de biais et celle de variance et obtenir un estimateur consistant et normalement asymptotique.

L'algorithme que nous proposons dans cette thèse comme solution au problème de l'estimation de quantile dans le cadre de codes stochastiques repose donc sur la théorie des algorithmes stochastiques et sur la méthode des k plus proches voisins précédemment développées. Il s'écrit de la manière suivante

$$\begin{cases} q_0(x) \in \mathbb{R} \\ q_{n+1}(x) = q_n(x) - \gamma_{n+1} H(q_n(x), Y_{n+1}) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in k_n NN_n^X(x)} \end{cases} \quad (7)$$

avec

- (γ_n) la suite déterministe des pas de descente de gradient choisie de la forme $\gamma_n = n^{-\gamma}$ et $\gamma \in]0, 1]$.
- (k_n) la suite du nombre de voisins choisie de la forme $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ avec $\beta \in]0, 1]$.
- La fonction H , (inspirée du cas classique) est

$$H(q_n(x), Y_{n+1}) = \mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha.$$

En fait, au temps $n + 1$, nous allons utiliser une variation de l'algorithme stochastique classique en effectuant une mise à jour seulement lorsque la nouvelle entrée tombera dans un voisinage de x . On constate alors qu'il y a maintenant deux paramètres à régler : le nombre de voisins k_n et le pas de la descente de gradient. Le chapitre 5 de la deuxième partie de cette thèse sera dédiée à l'étude de cet algorithme. En particulier, nous donnerons des conditions sur β et γ pour qu'il soit convergent. Nous écrirons aussi une inégalité non-asymptotique sur son risque quadratique, qui nous permettra d'exhiber les meilleurs paramètres (ceux qui donnent la meilleure vitesse). Tous ces résultats seront illustrés par des simulations numériques.

Estimation du superquantile dans le cadre des codes stochastiques

Dans le dernier chapitre de la deuxième partie de cette thèse (chapitre 6), on cherche à estimer un superquantile dans un modèle de code stochastique. Pour cela, on se propose de faire, comme dans le cadre des codes numériques, un double algorithme. Mais puisque nous sommes dans un cadre conditionnel, nous utiliserons encore la méthode des k plus proches voisins. L'algorithme étudié sera, cette fois

$$\begin{cases} (q_0, Q_0) \in \mathbb{R}^2 \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1}^q (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in k_n^q NN_n^X(x)} \\ Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in k_n^Q NN_n^X(x)} \end{cases} \quad (8)$$

avec

- $\gamma_n^q = n^{-\gamma^q}$ est le pas de la descente de gradient pour l'algorithme permettant d'estimer le quantile et $\gamma_n^Q = n^{-\gamma^Q}$ est le pas de la descente de gradient concernant le superquantile. Nous considérons toujours γ^q et γ^Q comme éléments de $]0, 1]$.
- Les nombres de voisins sont $k_n^q = \lfloor n^{\beta^q} \rfloor$ pour le quantile et $k_n^Q = \lfloor n^{\beta^Q} \rfloor$. Nous considérons toujours β^q et β^Q comme éléments de $]0, 1]$.

Cette fois-ci, il y a quatre paramètres à régler. Nous montrerons, pour cet algorithme, à nouveaux des inégalités non asymptotiques sur le risque quadratique et discuterons de la manière de régler les paramètres.

Réduire le temps de calcul

Dans cette partie, nous avons présenté une estimation séquentielle pour nos quantités d'intérêt parce que cette dernière était plus propice à l'obtention de résultats non-asymptotiques. Cette méthode d'estimation semble plus adaptée au problème des codes coûteux parce qu'elle permet de raisonner étape par étape et de prédire la précision qu'on peut espérer sur notre estimation en connaissant notre budget. Elle permet en plus de réduire énormément la taille de l'échantillon nécessaire à l'estimation dans le cadre stochastique. Cependant, dans cette méthode, on va fournir plusieurs entrées au code, pour se construire un échantillon d'observation. Dans l'état actuel des choses, nous n'avons aucun pouvoir sur le choix des ces entrées (nous tirons seulement un échantillon indépendant suivant la loi X des entrées). Pourtant, il semble naturel de considérer que si on a un budget restreint, il est intéressant de pouvoir nous-même décider des points que l'on veut évaluer. Dans la partie suivante de cette thèse, nous nous proposons donc de trouver un moyen de sélectionner les points *intéressants* à évaluer.

Estimation séquentiel bayésienne

Dans la troisième partie de cette thèse, nous souhaitons trouver un moyen de choisir *intelligemment* les points que nous fournirons au code. C'est-à-dire qu'à chaque étape, on voudrait sélectionner le point dont l'évaluation fournira l'information la plus utile pour l'estimation du quantile. Cette idée semble tout à fait naturelle et a été couramment étudiée dans la littérature des codes numériques. Nous allons voir qu'il est usuel, dans ce contexte, de raisonner d'un point de vue bayésien. Cette partie ne concernera que l'estimation du quantile dans les codes numériques.

Nous souhaitons toujours construire une stratégie séquentielle à un pas, mais qui intègre maintenant une étape de choix de la nouvelle entrée x_n à fournir au code. Ce choix, pourrait par exemple être d'aller prendre un point dans une zone où peu de points ont déjà été évalués (dans le but d'explorer d'avantage et de réduire notre méconnaissance sur g), ou dans une zone où l'on sait que le quantile a de fortes chances de se trouver (dans le but d'exploiter plus nos précédents essais). Puisque cette nouvelle entrée x_n est *choisie* par une stratégie, ce n'est plus une réalisation de la loi de X . Ainsi, nous la noterons avec un caractère minuscule. Il en est de même pour la réponse du code lorsqu'on lui fournit x_n comme entrée, ce n'est plus une réalisation de Y mais une évaluation de g que l'on notera donc $g_n := g(x_n)$. A l'étape $n + 1$ d'une telle stratégie, l'information disponible est donc résumée par l'événement des évaluations précédentes que l'on note $\mathcal{A}_n = \{(x_1, g_1), \dots, (x_n, g_n)\}$ et l'estimateur du quantile courant q_n . Grâce à ces seules informations, nous souhaitons trouver une stratégie pour sélectionner le point x_{n+1} dans \mathbb{X} qui sera le plus utile à évaluer à cet instant.

Une modélisation utile à la compréhension de ce genre de stratégie est la modélisation gaussienne.

Modélisation par processus gaussien

Que ce soit pour estimer, la moyenne, le quantile ou même pour optimiser la sortie d'un code numérique coûteux, il est maintenant classique d'utiliser la modélisation gaussienne, c'est à dire de supposer que la fonction g est la réalisation d'un processus gaussien G centré bien choisi. Dans la suite, nous noterons $c(\cdot, \cdot)$ la fonction de covariance de ce processus. Dans cette thèse, nous utiliserons toujours une fonction de covariance fixée et qui sera définie positive. Le choix d'une telle fonction est discutée par exemple dans [96].

Remarque 0.0.11. *L'hypothèse de modélisation par processus gaussien peut paraître forte dans le cas général. Il s'agit bien entendu d'une hypothèse de modélisation, mais on constate qu'en pratique, elle fonctionne plutôt bien. Cependant, pour avoir une hypothèse plus réaliste, certains auteurs (voir par exemple [96] et leurs références) choisissent une fonction de covariance cohérente avec leur données (par exemple en l'estimant par maximum de vraisemblance).*

Cette modélisation est parfaitement adaptée au type de méthode séquentielle à un pas précédemment décrite, grâce à la théorie du Krigeage. En effet, sous ce modèle et lorsque nous sommes au début de l'étape $n + 1$ (c'est-à-dire lorsqu'on a déjà fait n observations résumées par $\mathcal{A}_n = \{(x_1, g_1), (x_2, g_2), \dots, (x_n, g_n)\}$) on connaît complètement la distribution de $G|\mathcal{A}_n$ qui reste gaussienne.

Proposition 0.0.12. *Sous le modèle précédent,*

$$\mathcal{L}(G|\mathcal{A}_n) = GP(m_n(\cdot), k_n(\cdot, \cdot))$$

avec $\forall x \in \mathbb{X}$,

$$m_n(x) = \mathbb{E}(G(x)|\mathcal{A}_n) = c_n(x)^T C_n^{-1} \mathbf{g}_n$$

$$k_n(x, x') = \text{Cov}(G(x), G(x')|\mathcal{A}_n) = c(x, x') - c_n(x)^T C_n^{-1} c_n(x')$$

où nous notons $c_n(x) = [c(x_1, x), \dots, c(x_n, x)]^T$, et $C_n = [c(x_i, x_j)]_{1 \leq i, j \leq n}$ et $\mathbf{g}_n = [g_1, \dots, g_n]$. Dans la suite, on notera aussi $s_n^2(x) = k_n(x, x)$.

Remarque 0.0.13. *La matrice C_n est inversible puisque nous considérons une fonction de covariance c définie positive.*

La preuve de ces formules est disponible dans le chapitre 3 de [31]. Il s'agit ici d'un krigeage simple (le processus gaussien est centré et de fonction de covariance connue). L'idée centrale de la preuve à retenir est que $m_n(x)$ est, à l'étape n , l'estimateur linéaire sans biais de $G(x)$ ayant la plus faible variance (souvent appelé BLUP pour Best Linear Unbiased Predictor).

Type de stratégie recherchée et problématique

Pour les raisons précédemment expliquées, nous cherchons une stratégie de la forme suivante

- Pour un budget initial N_0 on construit un échantillon d'initialisation $(x_0^i, g_0^i)_{i=1 \dots N_0}$. On calcule l'estimateur initial de notre quantile noté q_0 .

- A chaque étape $n + 1 \geq N_0 + 1$ et jusqu'à atteindre le budget N d'évaluation autorisées, nous avons à disposition les observations $\mathcal{A}_n = ((x_1, g_1), \dots, (x_n, g_n))$ et l'estimateur courant q_n . En utilisant seulement ces informations, on sélectionne le nouveau point à évaluer x_{n+1}^* . On évalue x_{n+1}^* et on met à jour les observations \mathcal{A}_{n+1} et l'estimateur q_{n+1} .
- q_N est l'estimateur final du quantile.

Pour mettre en place ce genre de stratégie, il y a donc deux choses à faire. D'abord, il faut trouver un bon estimateur du quantile dans ce contexte d'estimation bayésienne. Un tel estimateur sera jugé bon si il est statistiquement bien posé et si sa mise à jour n'est pas trop coûteuse. Ensuite, il faut proposer une méthode pour sélectionner le nouveau point à évaluer. Cette méthode doit aussi avoir un temps de calcul raisonnable. Évidemment, les deux problèmes sont liés (il paraît logique de faire dépendre la méthode de l'estimateur courant à l'étape n puisqu'il représente une grosse partie de nos connaissances à cette étape-ci).

En parcourant la littérature, on se rend vite compte qu'une telle méthode, pour être performante, doit respecter un certain compromis entre exploration (il faut aller chercher des points où on ne connaît pas bien la fonction) et exploitation (il faut aller chercher des points là où le quantile a le plus de chance de se trouver). Ceci se comprend encore plus facilement lorsque la quantité d'intérêt n'est pas le quantile mais, par exemple, le minimum de la fonction g . Dans ce cadre, il est clair que, si on privilégie l'exploration, on va faire des évaluations inutiles. Par exemple, si on sait que la fonction est assez régulière et qu'on a observé un point très haut à un endroit, même si notre incertitude sur la fonction est grande dans une zone proche de cet endroit, il n'est pas judicieux d'y aller y rejouer des points. Mais à l'inverse, il est important de garder une certaine portion du budget pour explorer. En effet, si on ne le fait pas, on peut avoir vite l'impression d'avoir trouvé la zone du minimum et rater le vrai minimum global, parce qu'on se trouve sur un minimum local. Le réglage de ce compromis et donc un enjeu primordial dans cette étude.

On peut noter que Oakley avait déjà remarqué que ce compromis était important dans [74]. Dans ce papier, il ne propose pas une méthode séquentiel à un pas pour choisir les points un par un mais une méthode en deux étapes. Il préconise en effet de choisir la première moitié des points de manière à d'abord réduire l'incertitude sur la fonction g : on calcule la variance conditionnelle s_n grâce aux formules de krigeage pour tout point x et on choisit ceux qui ont la variance la plus haute. La moitié des points est donc choisie par *exploration pure*. Une fois ces premiers points évalués, Oakley propose de mettre à jour le modèle c'est-à-dire d'évaluer la loi a posteriori de G . Grâce à cette information, il peut alors choisir la seconde moitié du design par *exploitation*. En effet, les formules de krigeage permettent de construire un intervalle de confiance sur le quantile de la loi a posteriori. Cet intervalle de confiance est une zone où le quantile a de *bonnes chances de se trouver*. Oakley propose alors de choisir le reste des points à évaluer comme ceux qui minimisent la variance, parmi les points qui sont dans cette zone de confiance. Cette stratégie est très intéressante parce qu'elle est à la base de tous les travaux concernant le quantile dont nous allons parler par la suite. En effet, elle utilise les notions de compromis entre exploration et exploitation et de réduction d'incertitude (par la réduction de la variance) qui seront centrales dans la troisième partie de cette thèse. L'objectif principal de cette dernière partie est en fait d'affiner cette stratégie en proposant une méthode à un pas.

Dans la littérature, on trouve deux grands types de travaux concernant la modélisation des codes numériques par processus gaussiens. La bibliographie la plus riche concerne

l'optimisation de la fonction g . La seconde est le problème dual de ce qui nous intéresse dans cette thèse, à savoir l'estimation de la probabilité de défaillance. Commençons par faire un état de l'art des techniques d'optimisation qui sont celles qui ont directement inspiré les autres travaux.

Optimisation en modèle de Processus Gaussien

Dans cette partie, le problème est l'estimation de la quantité

$$g^* = \max_{x \in \mathbb{X}} g(x).$$

Comme nous l'avons vu, il a deux types de problèmes à résoudre. Il faut d'abord trouver un estimateur récursif, puis mettre en place une méthode pour sélectionner, à chaque étape, le nouveau point à évaluer. Pour l'optimisation, le choix d'un bon estimateur est simple et très instinctif, on choisit

$$M_n := \max(g_1, g_2, \dots, g_n).$$

Le gros avantage de cet estimateur, est qu'il se met très facilement à jour (il suffit de le comparer à la nouvelle observation). Nous verrons plus tard que pour le problème de l'estimation du quantile, il n'existe pas d'équivalent aussi simple, et que c'est le cœur de la difficulté.

Concernant la mise en place de méthode de sélection du nouveau point, l'idée est toujours la même, on essaie de minimiser, ou de maximiser un *critère*. On cherche donc le point x_{n+1}^* à évaluer à l'étape $n + 1$, qui sera celui qui, parmi tous les points x_{n+1} rend un certain critère J_n minimal.

$$x_{n+1}^* = \operatorname{argmin}_{x_{n+1} \in \mathbb{X}} J_n(x_{n+1}) \tag{9}$$

Il est important de constater que la fonction J est indexée par n , puisqu'au début de l'étape $n + 1$, nous n'avons à disposition seulement l'information contenue dans M_n et \mathcal{A}_n . Le problème consiste donc à trouver une fonction J intéressante. On trouve deux types d'approches dans la littérature : les fonctions construites sur les *bornes de confiance* et les fonctions construites à partir de *fonctions d'amélioration*.

La première catégorie est directement liée à la littérature concernant les problèmes de bandits. L'idée de base apparaît dans l'article [34] de Cox et al. lorsqu'ils présentent l'algorithme SDO. Voulant maximiser la fonction g , ils construisent un intervalle de confiance sur g en tout point x (grâce aux formules de Krigeage de la Proposition 0.0.12) et décident d'évaluer le point dont la borne de confiance supérieure sera la plus grande. On a alors un excellent exemple de compromis entre exploitation et exploration : on va chercher un point où l'on connaît mal la fonction puisqu'on va chercher une grande borne supérieure de confiance, mais aussi là où le maximum a des chances de se trouver puisque si la borne supérieure de confiance est haute, c'est probablement que la valeur de $g(x)$ est haute aussi. De nombreux auteurs se penchent alors sur le niveau de confiance des intervalles (doivent-ils dépendre de n ? de quelles manières ? etc...). Une réponse partielle à ces questions est donnée par l'algorithme GP-UCB introduit par Srinivas et al. dans [95]. Cet algorithme donne naissance à de nombreux travaux traitant des garanties théoriques. En problèmes de bandits, il est question de trouver des bornes sur le *regret* R_N défini par

$$R_N = \sum_{k=1}^N (g^* - M_n).$$

On peut trouver ce genre de bornes par exemple dans [94], [36] et leurs références. Dans cette thèse, nous ne parlerons pas plus de ce genre de méthodes. Nous nous intéresserons plutôt aux critères construits à partir de *fonctions d'amélioration*.

Dans le cadre de l'optimisation, le première critère reposant sur une fonction d'amélioration est proposé par Kushner dans [67]. L'auteur propose de choisir le point qui maximise la probabilité d'amélioration, c'est-à-dire de prendre

$$J_n(x_{n+1}) = \mathbb{P}(g(x_{n+1}) \geq M_n) = \Phi\left(\frac{m_n(x_{n+1}) - M_n}{s_n(x_{n+1})}\right)$$

où l'on note Φ la fonction de répartition de la loi normale standard.

En fait, on va chercher le point qui a la plus grande probabilité d'avoir une évaluation plus grande que celle de l'estimateur courant et donc le point qui va, lors de la mise à jour de notre estimateur, l'améliorer car le rendre plus proche de la cible. Cette méthode est par la suite assez controversée. En effet, elle va avoir tendance à privilégier les points qui auront une grosse probabilité d'être légèrement supérieurs à la cible par rapport aux points qui seront vraiment plus grands que la cible mais avec une probabilité plus faible. Pour régler partiellement ce problème, les auteurs proposent de modifier l'algorithme en introduisant un paramètre $\xi \geq 0$. Il s'agit alors de prendre

$$J_n(x_{n+1}) = \mathbb{P}(g(x_{n+1}) \geq M_n + \xi).$$

Évidemment il faut savoir comment calibrer ce paramètre ξ . Cette question est discutée par exemple dans [100] ou [61]. Malgré tout, cette méthode a l'inconvénient d'être très sensible au choix de la cible, et de se tromper lorsque plusieurs maxima existent. Pour cette raison, les auteurs ont proposé une seconde idée de critère. Cette fois, il s'agit de prendre le minimum de la fonction d'amélioration

$$J_n(x_{n+1}) =: EI_n(x_{n+1}) = \mathbb{E}\left((G(x) - M_n)^+ | \mathcal{A}_n\right).$$

Cette méthode s'appelle l'*expected improvment*. Il s'agit en fait la même idée que précédemment mais en résonnant en espérance plutôt qu'en probabilité (pour éviter les problèmes expliqués).

Une fois qu'un critère statistiquement bien posé a été trouvé, la grande difficulté est de lui donner une forme analytique implémentable et calculable en un temps raisonnable. C'est possible pour le cas de l'*expected improvment* et c'est ce qui en fait sa popularité. Il est par exemple montré dans [62] que

$$EI(x) = \begin{cases} [M_n - m_n(x)] \Phi(Z) + s_n(x)\phi(Z) & \text{si } s_n(x) > 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

où ϕ est la densité de la loi normale standard. On notera d'ailleurs que cette dépendance en ϕ et Φ est classique, comme on le verra dans le Partie 3 de cette thèse. Cette forme peut être implémentée facilement et est d'une complexité assez faible. Par ailleurs, Ginsbourger et al. [49] ou Garnett et al. [47] se sont aussi intéressés à ce critère appliqué à des stratégies à pas multiples.

Pour les critères basés sur des fonctions d'amélioration, il est difficile d'obtenir des garanties théoriques. Les résultats obtenus sont rares et très récents. Vazquez et al. montrent par exemple dans [102], qu'en utilisant le critère d'*expected improvment*, on obtient une suite de points d'évaluations $(x_i)_i$ dense dans \mathbb{X} . Plus récemment, Bull donne dans [20] la vitesse

asymptotique de cette stratégie sous des conditions raisonnables. La rareté des résultats montre bien que nous sommes ici confrontés à un problème ardu. Nous verrons dans la suite que le cas de l'estimateur du quantile est encore plus compliqué.

Probabilité de défaillance en modèle de Processus Gaussien

La littérature sur ce thème est moins dense que celle concernant l'optimisation, mais on y trouve les mêmes idées et le même type de raisonnement. Il faut d'abord choisir un estimateur pour notre quantité d'intérêt. Ensuite, il faut trouver un critère de sélection pour le point suivant. Pour cela, comme dans la partie précédente, on va chercher à maximiser ou minimiser une fonction J_n soit par borne de confiance, soit par fonction d'amélioration.

Choix de l'estimateur

Dans la littérature (voir [9]), il existe deux estimateurs de la probabilité de défaillance

$$u(g) = \mathbb{P}(g(X) > u)$$

où u est un seuil fixé. Le premier estimateur est construit à partir de l'idée suivante. Comme $u(g) = \mathbb{E}(\mathbb{1}_{g(X) > u})$, on estime $u(g)$ par la quantité

$$u_n = \int_{\mathbb{X}} \eta_n dP_{\mathbb{X}}$$

où $\eta_n : \mathbb{X} \mapsto \{0, 1\}$ est une fonction visant à approcher l'indicatrice $\mathbb{1}_{G(X)|\mathcal{A}_n > u}$. La recherche de cette fonction η_n se fait par minimisation du risque quadratique de \hat{u}_n et donne $\eta_n = \mathbb{1}_{m_n(X) > u}$ où m_n est la moyenne a posteriori définie dans la Proposition 0.0.12. Ainsi, un premier estimateur de $u(g)$ est

$$u_n := u(m_n).$$

On notera que cet estimateur est intuitif. En effet, m_n est à l'étape n la meilleure approximation de G . Il semble donc cohérent d'estimer la probabilité de défaillance de g par celle de m_n . Le second estimateur est celui qui minimise la moyenne quadratique parmi tous les estimateur \mathcal{A}_n mesurable. Il s'agit de

$$u_n = \mathbb{E}(u(G)|\mathcal{A}_n) = \mathbb{E}\left(\int_{\mathbb{X}} \mathbb{1}_{G > u} dP_X\right) = \int_{\mathbb{X}} p_n dP_X$$

où $p_n(x) = \Phi\left(\frac{m_n(x) - u}{s_n(x)}\right)$. On notera que les deux estimateurs présentés ont une forme analytique (si on connaît les paramètres de la loi a posteriori, on peut les calculer sans souci) et sont donc très manipulables. Cela est dû, pour le second, à une possible permutation entre espérance et intégrale. Dans la troisième partie de cette thèse, nous verrons comment utiliser ces idées pour construire des estimateurs du quantile. Nous verrons alors que les estimateurs n'ont pas toujours de formes analytiques et que cela entraîne de nombreux problèmes.

Choix du design

Comme nous l'avons expliqué dans la partie précédente, ce sont les méthodes utilisant des *fonctions d'amélioration* qui nous intéressent dans cette thèse. En particulier, nous allons étudier la méthode SUR, introduite par Bect et al. dans [9] dans le cadre de la probabilité de défaillance, qui est actuellement la plus performante. La méthode SUR (Stepwise Uncertainty

Reduction) est une stratégie myope, qui va choisir à chaque étape, la nouvelle donnée à évaluer comme si c'était la dernière. Ainsi, à chaque étape n , elle va sélectionner le point qui, si on l'évalue, donnera la plus petite erreur d'estimation (ou incertitude) à l'étape $n + 1$. Cette incertitude est mesurée dans [9] grâce au risque quadratique. Le critère proposé est donc, pour un estimateur courant u_n ,

$$x_{n+1}^* = \operatorname{argmin}_{x_{n+1} \in \mathbb{X}} \mathbb{E}_n \left((u_{n+1} - u(G))^2 \mid X_{n+1} = x_{n+1} \right).$$

Ce critère est difficile à manipuler parce que pour le calculer en un x_{n+1} , on doit avoir accès à u_{n+1} qui dépend de $y_{n+1} = g(x_{n+1})$ que nous ne connaissons pas (on ne peut pas évaluer un point pour tester s'il est intéressant ou non de l'évaluer !). Toute la difficulté de la stratégie SUR est donc de trouver une forme analytique ou implémentable avec une complexité raisonnable du critère J_n . Dans [9], Bect et al. montrent qu'il est très difficile d'obtenir une telle forme analytique pour ce critère avec l'un ou l'autre des estimateurs précédemment étudiés. Ils proposent plutôt différentes majorations de ce critère par des fonctions implémentables. On notera en revanche que la complexité de ces fonctions est encore trop élevée pour permettre d'utiliser cette méthode lorsque la dimension des entrées augmente.

Le problème qui nous intéresse dans cette thèse est le dual de celui de l'estimation de la probabilité de défaillance à seuil fixé. Il semble alors naturel d'essayer d'utiliser les résultats que nous venons de présenter pour les adapter. Dans la troisième partie de cette thèse, nous discuterons de l'adaptation de la stratégie SUR au cas du quantile qui a été faite dans les articles [56] et [6]. Nous verrons alors que le problème de trouver un critère statistiquement bien posé et ayant une forme implémentable avec une complexité de calcul raisonnable est encore un problème ouvert dans ce contexte. Dans le Chapitre 7, nous proposerons alors deux nouvelles stratégies performantes avec une complexité réduite. Nous mettrons enfin en pratique nos deux stratégies sur des exemples numériques.

Part I

Estimation empirique

Introduction

Dans cette partie, nous souhaitons estimer le quantile et le superquantile de la loi de sortie $Y = g(X)$ d'un code numérique non coûteux (le temps nécessaire au code pour fournir une réponse est négligeable). Ce problème est donc complètement équivalent au problème de l'estimation d'une quantité d'intérêt d'une loi inconnue Y dont on peut avoir un échantillon aussi grand que l'on veut.

Soit Y une variable aléatoire réelle, de fonction de répartition F_Y continue. Nous souhaitons estimer deux paramètres d'intérêts de cette loi : son quantile noté q_α et son superquantile Q_α . On rappelle que le quantile est le seuil maximal que peut atteindre Y lorsqu'on ne prend pas en compte une portion $1 - \alpha$ des cas qui sont jugés négligeables. Le superquantile représente la moyenne de Y là où cette variable aléatoire est supérieure à son quantile. Mathématiquement, sous notre hypothèse de continuité, on a :

$$q_\alpha = F_Y^{-1}(\alpha) \text{ et } Q_\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \mathbb{E} \left(Y \mathbb{1}_Y \geq F_Y^{-1}(\alpha) \right).$$

Puisque nous pouvons construire un échantillon indépendant $(Y_i)_{i=1, \dots, n}$ distribué comme Y aussi grand qu'on le souhaite, l'idée la plus simple pour résoudre notre problème d'estimation est de considérer les estimateurs empiriques. En effet, faire de l'inférence empirique sur le paramètre d'une loi inconnue, c'est simplement calculer ce paramètre sur un échantillon de cette loi. Cette méthode semble donc bien adaptée à notre situation.

Calculer le quantile sur l'échantillon (Y_i) , c'est par définition, trouver l'élément de cet échantillon ayant une proportion $1 - \alpha$ d'éléments qui lui sont supérieurs. Pour cela, on classe notre échantillon par ordre croissant de la manière suivante

$$Y_{(1)} \leq Y_{(2)} \leq \dots \leq Y_{(n)}.$$

L'élément qui est inférieur à une proportion $1 - \alpha$ des autres est alors

$$q_n = Y_{(\lfloor n\alpha \rfloor + 1)}. \tag{10}$$

Pour calculer le superquantile sur l'échantillon, on va faire la moyenne des données qui sont supérieures au quantile. Dans un premier temps, on pense donc à l'estimateur

$$Q_n = \frac{1}{1 - \alpha} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \mathbb{1}_{Y_i > q_\alpha(Y)}.$$

Le problème c'est que nous ne connaissons pas le quantile. Nous proposons de le remplacer dans la formule précédente, par sa version empirique. Finalement, l'estimateur empirique du superquantile que nous allons étudier est

$$Q_n = \frac{1}{1-\alpha} \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n Y_{(i)}. \quad (11)$$

Puisque nous sommes dans un cadre de codes non coûteux, nous avons vu que nous recherchons des résultats asymptotiques sur ces deux estimateurs.

Concernant le quantile, l'estimateur (10) est désormais très classique. On peut trouver un résumé de ces propriétés dans [92] à partir de la page 74. En particulier, nous sommes ici intéressés par la consistance et la normalité asymptotique. Ces deux propriétés sont vraies, comme le montre le théorème suivant

Théorème 0.0.14. *Pour un niveau $\alpha \in]0, 1[$, et une variable aléatoire réelle Y , l'estimateur du quantile empirique q_n définit par (10) est*

i) *fortement consistant, c'est-à-dire que*

$$q_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p.s.} q_\alpha(Y).$$

ii) *normalement asymptotique, dès lors que Z est à densité f_Y et que $f_Y(q_\alpha(Y)) > 0$, c'est-à-dire que*

$$\sqrt{n} (q_n - q_\alpha(Y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N} \left(0, \frac{\alpha(1-\alpha)}{f(q_\alpha(Y))^2} \right).$$

Concernant le comportement asymptotique de l'estimateur (11) du superquantile, c'est plus compliqué. En fait, même si beaucoup de financiers utilisent cette notion dans la littérature concernant les mesures de risque, on trouve rarement des résultats la concernant directement. En effet, la plupart du temps, le superquantile n'est qu'un exemple particulier d'une classe plus générale de mesures de risque. Par exemple, c'est une mesure de risque de distorsion particulière. Ces mesures sont très courantes dans la littérature financière (voir par exemple [2], [107], [58], [59], [60], [104], [105], [106] ou encore [109]).

Définition 0.0.15. *Une mesure de distorsion est une mesure de risque \mathcal{R} qui peut s'écrire pour toute variable aléatoire Z ,*

$$\mathcal{R}(Z) =: \rho_f(Z) = - \int_{\mathbb{R}} x df(F_Z(x)),$$

où f , appelée fonction de distorsion, est une fonction sur $[0, 1]$ à valeurs dans $[0, 1]$. f est supposée croissante et telle que $f(0) = 0$ et $f(1) = 1$.

Il apparaît alors que pour le cas particulier $f(x) = \alpha \left(\frac{x}{\alpha} \wedge 1 \right)$, nous obtenons

$$\rho_f(Z) = \alpha Q_{1-\alpha}(-Z).$$

Il a par exemple été montré par Wang et al. dans [106] qu'une mesure de distorsion est une mesure de risque cohérente si, et seulement si, la fonction de distorsion f est concave (ce qui est bien le cas dans notre cas particulier du superquantile).

Ainsi, même si on peut trouver dans la littérature, des résultats sur le comportement asymptotique de l'estimateur empirique du superquantile, ces résultats sont souvent très généraux. Par conséquent, les hypothèses sont souvent très fortes ou difficiles à vérifier en pratique. De plus, les résultats sont souvent très théoriques. Ils ne font, par exemple, pas apparaître de variance asymptotique explicite ou utilisent de gros théorèmes puissants qui cachent ce qu'il se passe intuitivement, dans le cas simple du superquantile.

Dans le Chapitre 1 de cette thèse, nous souhaitons donc étudier le comportement asymptotique de l'estimateur empirique du quantile, sous des hypothèses simples, minimales et facilement vérifiables. Nous exhiberons de plus une variance asymptotique explicite et simple. A la fin de ce chapitre, nous étudierons quelques exemples concernant l'estimation du superquantile. Nous verrons alors qu'on peut trouver des lois usuelles pour lesquelles le théorème ne s'applique pas (pas parce que les hypothèses sont trop fortes, mais parce que le résultat est faux dans ce cas là). Dans le Chapitre 2, nous introduirons alors une nouvelle mesure de risque, appelée superquantile de Bregman. Nous verrons que cette mesure de risque est cohérente sous des hypothèses raisonnables. De plus, nous montrerons que son estimateur empirique se comporte statistiquement mieux que celui du superquantile classique. Pour terminer ce chapitre, nous présenterons un cas d'application fourni par l'entreprise EDF.

Chapter 1

Empirical estimation of the superquantile

The results of this chapter are derived from the paper "Bregman superquantile. Estimation method and applications" of T. Labopin-Richard, F. Gamboa, A. Garivier and B. Iooss, published in the journal *Dependence Modeling*.

1.1 Introduction

In this chapter, we aim to study the asymptotic behaviour of the empirical estimator of the superquantile of an unknown law Y (which is in fact the output of a numerical code g). The superquantile of level α of the random variable Y is denoted Q_α . It is defined (because we are in the continuous law case) by the quantity

$$Q_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \mathbb{E}(Y \mathbb{1}_{Y > q_\alpha})$$

where q_α is the quantile of level α of Y . We have already seen that this quantity is always defined as an element of \mathbb{R} . Nevertheless, in this chapter, we only deal with random variables Y such that $Y \mathbb{1}_{Y \geq 0}$ is integrable. Indeed, there is no interest to estimate a superquantile which is infinite.

With the previous notations, if we wish to estimate the classical superquantile Q_α we may use the following empirical estimator, using (Y_1, \dots, Y_n) an independent sample distributed like Y

$$Q_n := \frac{1}{(1-\alpha)n} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n Y_{(i)} \quad (1.1)$$

Our goal is to study the asymptotic behaviour of the previous estimator (1.1).

1.2 Main result

For the next proposition we need the two following assumptions.

H1) The quantile function F_Y^{-1} is of class \mathcal{C}^1 on $]0, 1[$ and its derivative, denoting l , satisfies $l = O((1-t)^{-2+\epsilon_t})$ for an $\epsilon_t > 0$ when t goes to 1^- .

H2) The quantile function is \mathcal{C}^2 on $]0, 1[$ and its second derivative that we denote L satisfies $L = O\left((1-t)^{-\frac{5}{2}+\epsilon_L}\right)$ for an $\epsilon_L > 0$ when t goes to 1^- .

The asymptotic behaviour of the empirical estimator (1.1) is resumed by the following theorem.

Théorème 1.2.1. *Let $\frac{1}{2} < \alpha < 1$, and Y be a real-valued random variable. Let (Y_1, \dots, Y_n) be an independent sample with the same distribution as Y .*

i) Under **H1**, the empirical estimator (1.1) is consistent in probability

$$Q_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}} Q_\alpha.$$

ii) Under **H2**, the empirical estimator (1.1) is asymptotically Gaussian

$$\sqrt{n}(Q_n - Q_\alpha) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \frac{\sigma^2}{(1-\alpha)^2}\right),$$

where

$$\sigma^2 := \int_\alpha^1 \int_\alpha^1 \frac{(\min(x, y) - xy)}{f_Y(F_Y^{-1}(x))f_Y(F_Y^{-1}(y))}$$

and F_Y and f_Y are the cumulative distribution function and distribution function of Y . In the sequel, we omit the index Y when there is no ambiguity.

Remarque 1.2.2. *Assumption **H1** implies that Y is absolutely continuous with density f_Y which is continuous and positive. It also implies that $l(t) = o((1-t)^{-2})$ around 1. Assumption **H2** implies that f_Y is also of class \mathcal{C}^1 . It also implies that $L(t) = o((1-t)^{-\frac{5}{2}})$.*

1.2.1 Examples of asymptotic behaviors for the classical superquantile

Our assumptions are easy to check in practice. Let us discuss some examples of the asymptotic behaviour of the estimator of the superquantile (1.1) by using the exponential distribution of parameter 1 and the Pareto distribution.

Exponential distribution

In this case, we have on \mathbb{R}_*^+ $f(t) = \exp(-t)$, $F(t) = 1 - \exp(-x)$. Then $F^{-1}(t) = -\ln(1-t)$ and $Q_\alpha = 1 - \ln(1-\alpha)$.

- Consistency :

$l(t) = (1-t)^{-1} = O\left((1-t)^{-2+\frac{1}{2}}\right)$ (when $t \mapsto 1^-$) so that the estimator (1.1) is consistent.

- Asymptotic normality :

$L(t) = (1-t)^{-2} = O\left((1-t)^{-\frac{5}{2}+\frac{1}{3}}\right)$ (when $t \mapsto 1^-$). So the estimator (1.1) is asymptotically Gaussian.

Pareto distribution

Here, we consider the Pareto distribution of parameter $a > 0$: on \mathbb{R}_*^+ ,

$F(t) = 1 - x^{-a}$, $f(t) = ax^{-a-1}$, and $F^{-1}(t) = (1-t)^{-\frac{1}{a}}$. Let us notice that the superquantile is finite if, and only if $a > 1$ and in this case, $Q_\alpha = (1-\alpha)^{-\frac{1}{a-1}}$.

- Consistency :

$l(t) = (a(1-t)^{-1-\frac{1}{a}})$ thus, $l(t) = O((1-t)^{-2+\epsilon_l})$ (when $t \mapsto 1^-$) as soon as $a > 1$ and then as soon as the superquantile is finite (for example for $\epsilon_l = \frac{1-\frac{1}{a}}{2}$). The consistency for estimator (1.1) is true.

- Asymptotic normality :

$L(t) = C(a)(1-x)^{-\frac{1}{a}-2}$ thus, as soon as $a > 2$, $L(t) = O((1-t)^{-\frac{5}{2}+\epsilon_L})$ (for example $\epsilon_L = \frac{\frac{1}{2}-\frac{1}{a}}{2}$), when $t \mapsto 1^-$. The estimator (1.1) is asymptotically Gaussian if $a > 2$.

We then have shown, through these examples, that the estimator (1.1) has good properties when it is computed on not too heavy tail-distribution (like the exponential distribution). Nevertheless, its asymptotic normality can be defective when it is computed on heavy tail-distribution random variable.

1.3 Proof of Theorem 1.2.1

1.3.1 Mathematical tools

We first give some technical or classical results that we will use in the forthcoming proofs.

Ordered statistics and Beta function

Let us recall some results on ordered statistics (see [35]). First of all, let $(U_i)_{i=1\dots n}$ be an independent sample from the uniform distribution on $[0, 1]$. Then,

$$U_{(n)} \xrightarrow{a.s.} 1. \quad (1.2)$$

and

$$n(1 - U_{(n)}) \xrightarrow{\mathcal{L}} W \quad (1.3)$$

where W has an exponential distribution of parameter 1.

Let now $(E_i)_{i=1\dots n+1}$ be an independent sample from the standard exponential distribution. It is well known that

$$U_{(i)} := \sum_{j=1}^i E_j \left(\sum_{j=1}^{n+1} E_j \right)^{-1} \quad (1.4)$$

has the same distribution as the i^{th} ordered statistics of an i.i.d sample of size n uniformly distributed on $[0, 1]$, that is Beta distribution of parameters i and $n-i+1$ denoted $\beta(i, n-i+1)$.

It is also known that when $(Y_i)_{1 \leq i \leq n}$ is a sample of cumulative distribution F_Y , this equality in law holds

$$Y_{(i)} \stackrel{\mathcal{L}}{=} F_Y^{-1}(U_{(i)}). \quad (1.5)$$

Recall that $\beta(a, b)$ distribution has the following density

$$f_{\beta(a,b)}(x) = \frac{x^{a-1}(1-x)^{b-1}}{B(a,b)} \mathbb{1}_{x \in [0,1]}, \quad a, b > 0$$

where

$$B(a, b) = \int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{b-1} dt = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}. \quad (1.6)$$

A classical property of the Beta function is

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^+, \quad B(x+1, y) = \frac{x}{x+y} B(x, y). \quad (1.7)$$

Generalizing the definition of the factorials, we set for $n \in \mathbb{N}^*$

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)! := \left(n - \frac{1}{2}\right) \left(n - 1 - \frac{1}{2}\right) \dots \left(\frac{1}{2}\right),$$

we have for $i \in \mathbb{N}^*, n \geq i + 2$

$$B\left(i, n - i - \frac{5}{2} + 1\right) = \frac{(i-1)! \left(n - i - 2 - \frac{1}{2}\right)!}{\left(n - 2 - \frac{1}{2}\right)!}, \quad (1.8)$$

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)! = \frac{(2n)!}{(2^n)2^n!}. \quad (1.9)$$

Indeed, Equation (1.8) comes directly from the Definition (1.6) and to see Equation (1.9), we fix $k = \frac{1}{2}$ and notice that

$$2^n(n-k)! = (2n-1)(2n-3)\dots 3 \times 1 = \frac{(2n)!}{2n(2n-2)\dots 6 \times 4 \times 2} = \frac{(2n)!}{2^n n!}.$$

Moreover, the cumulative distribution function of the Beta distribution is the regularized incomplete Beta function $I_x(a, b)$. This function satisfies, when a and b are positive integers

$$I_x(a, b) = \mathbb{P}(\beta(a+b-1, x) \geq a)$$

and then, Bernstein inequality for Bernoulli distribution (see for example Theorem 8.2 of [38]) gives

$$I_x(\alpha, \beta) \leq \exp\left(-\frac{3}{8}(a+b-1)x\right) \quad (1.10)$$

as soon as $\frac{a}{n} \geq 2x$.

Technical lemma

Lemma 1.3.1. *Let $\delta > 1$ and $\beta \in]0, 1[$. Then $n^{-1} \sum_{i=\lfloor n\beta \rfloor}^{n-1} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{-\delta} = \mathcal{O}(\sqrt{n})$ if and only if $\delta \leq \frac{3}{2}$.*

Proof. Let $\delta > 1$. We have to characterize the δ for which

$n^{-\frac{3}{2}} \sum_{i=\lfloor n\beta \rfloor}^{n-1} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{-\delta}$ is bounded when n goes to infinity. Let us make the index

change $j := n + 1 - i$. Those sums become

$$n^{-\frac{3}{2}} \sum_{j=2}^{n+1-\lfloor n\beta \rfloor} \left(1 - \frac{n+1-j}{n+1}\right)^{-\delta} = \frac{n^{-\frac{3}{2}}}{(n+1)^{-\delta}} \sum_{j=2}^{n+1-\lfloor n\beta \rfloor} \frac{1}{j^\delta} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} n^{\delta-\frac{3}{2}} (\zeta(\delta) - 1),$$

where ζ denote the Zeta function. Then, if $\delta > \frac{3}{2}$, $\zeta(\delta)$ is finite and the behaviour of the sum is the same as the one of $n^{-\frac{3}{2}+\delta}$ which diverges to $+\infty$. On the contrary, if $1 < \delta \leq \frac{3}{2}$, $\zeta(\delta)$ is still finite but $n^{-\frac{3}{2}+\delta}$ is bounded and so does the sum. \square

A corollary of Lindenberg-Feller theorem

To prove the asymptotic normality, we use a central limit theorem which is a corollary of the Lindeberg-Feller theorem (see lemma 1 in [27]).

Proposition 1.3.2. *Let (E_1, \dots, E_n) be an independent sample of exponential variables of parameter 1 and $(\alpha_{j,n})_{j \leq n, n \geq 2}$ be a triangle array of real numbers.*

If $M_n = n^{-1} \sum_{j=1}^n \alpha_{j,n}(E_j - 1)$ and $\sigma_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \alpha_{j,n}^2$, then

$$\frac{\sqrt{n}M_n}{\sigma_n} \Longrightarrow \mathcal{N}(0, 1)$$

if and only if $\max_{1 \leq j \leq n} |\alpha_{j,n}| = o(n^{\frac{1}{2}} \sigma_n)$.

If furthermore σ_n converges in probability to σ then by Slutsky's lemma

$$\sqrt{n}M_n \Longrightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2).$$

1.3.2 Proof of i) of Theorem 1.2.1 : consistency of the plug-in estimator (1.1)

Proof. We aim to show consistency of the estimator (1.1). Let us first notice that

$$Q_\alpha = \frac{\mathbb{E}\left(Y \mathbb{1}_{Y \geq F_Y^{-1}(x)(\alpha)}\right)}{1 - \alpha} = \frac{\int_{\mathbb{R}} x \mathbb{1}_{Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)} f_Y(x) dx}{1 - \alpha} = \frac{\int_{\alpha}^1 F_Y^{-1}(y) dy}{1 - \alpha}.$$

Thus, we need to show that

$$\frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n Y_{(i)} - \int_{\alpha}^1 F_Y^{-1}(y) dy \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} 0 \text{ a.s.}$$

In the sequel we omit the index Y in F_Y^{-1} because there is no ambiguity. Let us introduce the two following quantities and show their convergence to 0 in probability.

$$A_n = \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n Y_{(i)} - \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right),$$

and

$$B_n = \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) - \int_{\alpha}^1 F^{-1}(y) dy.$$

Let us first deal with A_n .

We know by (1.5) that $y_{(i)} \sim F_y^{-1}(U_{(i)})$ where $U_{(i)}$ is distributed like the i^{th} ordered statistic of a uniform sample. Thus, defining $U_{(i)}$ with distribution $\beta(i, n+1-i)$, it holds that,

$$A_n = \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n \left(F^{-1}(U_{(i)}) - F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) \right).$$

We now need to split the sum in two parts. First, let us deal with the last term in the sum (which gives actually the biggest contribution). By the mean value theorem, there exists $w_n \in \left[U_{(n)}, \frac{n}{n+1} \right]$ (where we use non-oriented interval) such that

$$\frac{1}{n} \left(F^{-1}(U_{(n)}) - F^{-1}\left(\frac{n}{n+1}\right) \right) = \frac{1}{n} \left(U_{(n)} - \frac{n}{n+1} \right) l(w_n).$$

Since (1.2) holds, and thanks to assumption **H1**, there exists a constant C_1 such that for n big enough

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{n} \left(F^{-1}(U_{(n)}) - F^{-1}\left(\frac{n}{n+1}\right) \right) \right| &\leq \frac{C_1}{n} \frac{1}{(1-w_n)^{2-\epsilon_l}} \left| U_{(n)} - \frac{n}{n+1} \right| \\ &\leq \frac{1}{n} \frac{C_1}{\left(1 - \frac{n}{n+1}\right)^{2-\epsilon_l}} \left| U_{(n)} - \frac{n}{n+1} \right| + \frac{1}{n} \frac{C_1}{(1-U_{(n)})^{2-\epsilon_l}} \left| U_{(n)} - \frac{n}{n+1} \right| \\ &\leq \frac{C_1}{n} (n+1)^{2-\epsilon_l} |U_{(n)} - 1| + \frac{C_1}{n} (n+1)^{2-\epsilon_l} \left| \frac{n}{n+1} - 1 \right| \\ &\quad + \frac{C_1}{n} \frac{1}{(1-U_{(n)})^{2-\epsilon_l}} |U_{(n)} - 1| + \frac{C_1}{n} \frac{1}{(1-U_{(n)})^{2-\epsilon_l}} \left| \frac{n}{n+1} - 1 \right| \\ &\leq C_1 W_n \frac{(n+1)^{2-\epsilon_l}}{n^2} + C_1 \frac{(n+1)^{2-\epsilon_l}}{n(n+1)} + \frac{C_1}{W_n^{1-\epsilon_l} n^{\epsilon_l}} + \frac{C_1}{W_n^{2-\epsilon_l}} \frac{n^{1-\epsilon_l}}{n+1} \end{aligned} \tag{1.11}$$

where $W_n = n(1 - U_{(n)})$. Thanks to (1.3) and the Slutsky lemma, we have shown the convergence in probability to 0 of this term. Terms for $i = n-1$ and $i = n-2$ can be treated exactly in the same way.

Let us now deal with the remaining sum (for i from $\lfloor n\alpha \rfloor$ to $n-3$) that we still denote A_n . By the mean value theorem, we will upper-bound A_n by a quantity depending on l . Since we know the behaviour of l on every compact set and in the neighbourhood of 1, we begin by showing that when n becomes big enough, $U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)}$ is far away from 0. Let $\frac{\alpha}{2} \geq \epsilon > 0$ be a positive real number. We have,

$$A_n = A_n \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} < \epsilon} + A_n \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon}.$$

Then, for $\eta' > 0$, thanks to (1.10) of recallings and because for n big enough $\frac{\lfloor n\alpha \rfloor}{n} \geq \frac{\alpha}{2} \geq \epsilon$, we get

$$\mathbb{P}(A_n \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} < \epsilon} > \eta') \leq \mathbb{P}(U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} < \epsilon) \leq \exp\left(-\frac{3n\epsilon}{8}\right). \tag{1.12}$$

Then, it is enough to show the convergence to 0 in probability of $A'_n := A_n \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon}$. Let us show its converges to 0 in L^1 .

By the mean value theorem, we know that there exists $w_i \in]U_{(i)}, \frac{i}{n+1}[$ (we do not know if $U_{(i)}$ is smaller or bigger than $\frac{i}{n+1}$ but in the sequel we still denote the segment between $U_{(i)}$ and $\frac{i}{n+1}$ in this way) such that

$$\mathbb{E}(|A'_n|) \leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n-3\alpha \rfloor}^n \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| l(w_i) \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon} \right].$$

But, for all $i \in \{\lfloor n\alpha \rfloor, \dots, n-3\}$, we get $U_{(i)} \geq U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon$. Moreover, for n big enough, we get, $\frac{i}{n+1} \geq \frac{\lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \geq \frac{\alpha}{2} \geq \epsilon$. Then,

$$\forall i \in \{\lfloor n\alpha \rfloor, \dots, n-3\}, w_i \in [\epsilon, 1[.$$

Then, according to **H1** and Remark 1.2.2 (here since we do not deal with biggest terms in the sum we only need a weaker assumption than **H1**), we get

- for any arbitrary $\eta > 0$, there exists $\xi_\eta > 0$ such that

$$\forall t \in]1 - \xi_\eta, 1[, l(t) \leq \frac{\eta}{(1-t)^2}$$

- because l is continuous, there exists a constant C such that

$$\forall t \in [\epsilon, 1 - \xi_\eta], l(t) \leq C.$$

Let us then look at the sum on two different events.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(|A'_n|) &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| l(w_i) \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon} \mathbb{1}_{w_i > 1 - \xi_\eta} \right] \\ &+ \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| l(w_i) \mathbb{1}_{U_{(\lfloor n\alpha \rfloor)} \geq \epsilon} \mathbb{1}_{w_i \leq 1 - \xi_\eta} \right] \\ &:= T_n^1 + T_n^2 \end{aligned}$$

But,

$$\begin{aligned} T_n^1 &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| l(w_i) \mathbb{1}_{\epsilon \leq w_i \leq 1 - \xi_\eta} \right] \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| C \right] \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} C \sqrt{\text{Var}(U_{(i)})} \\ &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} C \sqrt{\frac{i(n-i+1)}{(n+1)^2(n+2)}} \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} C \sqrt{\frac{i}{n} \left(1 - \frac{i}{n}\right)} = \mathcal{O} \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \right). \end{aligned}$$

thanks to convergence of Riemann's sum of the continuous function $x \mapsto \sqrt{x(1-x)}$ on $[\alpha, 1]$. Then, this terms goes to 0. Let us conclude by dealing with the last term.

$$\begin{aligned}
 T_n^2 &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| l(w_i) \mathbb{1}_{w_i > 1-\xi_\eta} \right] \\
 &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| \frac{\eta}{(1-w_i)^2} \right] \\
 &\leq \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| \max \left(\frac{\eta}{(1-U_{(i)})^2}, \frac{\eta}{(1-\frac{i}{n+1})^2} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

But, by the Cauchy-Schwartz inequality,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \mathbb{E} \left[\left| U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right| \frac{\eta}{(1-U_{(i)})^2} \right] \leq \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\text{Var}(U_{(i)}) \mathbb{E} \left(\frac{1}{(1-U_{(i)})^4} \right)}$$

Since $i < n-2$, all the terms of the sum can be expressed using Beta functions and then the expectation is finite (and this is for this reason that we can not include biggest terms $i = n$, $i = n-1$ and $i = n-2$ in this reasoning). Indeed,

$$\begin{aligned}
 \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\text{Var}(U_{(i)}) \mathbb{E} \left(\frac{1}{(1-U_{(i)})^4} \right)} &\leq \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\frac{i(n-i+1)}{(n+1)^2(n+2)}} \sqrt{\frac{B(i, n+1-i)}{\int_0^1 x^{i-1}(1-x)^{n+1-i-4} dx}} \\
 &= \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\frac{i(n-i+1)}{(n+1)^2(n+2)}} \sqrt{\frac{B(i, n+1-i-3)}{B(i, n+1-i)}} \\
 &= \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{(n+1)^2(n+2)} \frac{i(n-i+1)}{(n-i)(n-1-i)(n-2-i)}}
 \end{aligned}$$

where we used recallings on Beta function. The final term has the same behaviour when n goes to $+\infty$ that

$$\eta \frac{1}{n^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \frac{1}{\left(1 - \frac{i}{n}\right)^{\frac{3}{2}}} := \eta \times V_n$$

Since Lemma 1.3.1 implies that V_n is bounded independently of η and because η is arbitrary small, we have shown the converge to 0. Then the term in $U_{(i)}$ on the maximum of Equation (1.13) converges to 0. The second term can be computed in the same way

$$\frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \sqrt{\text{Var}(U_{(i)}) \mathbb{E} \left(\frac{1}{(1-\frac{i}{n+1})^4} \right)} \sim \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\eta}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-3} \frac{1}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{3}{2}}}.$$

which also converges to 0 thanks to Lemma 1.3.1. Finally, A'_n converges to 0 in L^1 and so in probability. So is A_n .

Let us now study the term

$$B_n = \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n F^{-1} \left(\frac{i}{n+1} \right) - \int_\alpha^1 F^{-1}(y) dy.$$

We will show that this term converges to 0 thanks to a generalized Riemann sum convergence due to the monotonicity of F^{-1} .

Remarque 1.3.3. *To begin with, for $\epsilon > 0$ it is easy to show that*

$$B_n^\epsilon = \frac{1}{n} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor} F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) - \int_{\alpha}^{1-\epsilon} F^{-1}(y) dy$$

converges to 0. Indeed, it is the convergence of the Riemann sum for the continuous function F^{-1} .

Let us fix $\epsilon > 0$. According to the previous remark, we split the forthcoming sum in two parts.

$$B_n = \frac{1}{n+1} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor} F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) + \frac{1}{n+1} \sum_{i=\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor+1}^{n-1} F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) := S_n^1 + S_n^2.$$

Since the quantile function is non-decreasing on $[\alpha, 1]$, we have :

$$\begin{aligned} & \int_{\frac{\lfloor n\alpha \rfloor}{n+1}}^{\frac{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor}{n+1}} F^{-1}(t) dt + \int_{\frac{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor}{n+1}}^{\frac{n-1}{n+1}} F^{-1}(t) dt := C_n^1 + C_n^2 \\ & \leq \frac{1}{n+1} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor} F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) + \frac{1}{n+1} \sum_{i=\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor+1}^{n-1} F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) := S_n^1 + S_n^2 \\ & \leq \int_{\frac{\lfloor n\alpha \rfloor}{n+1}}^{\frac{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor}{n+1}} F^{-1}(t) dt + \int_{\frac{\lfloor n(1-\epsilon) \rfloor}{n+1}}^{\frac{n}{n+1}} F^{-1}(t) dt := D_n^1 + D_n^2. \end{aligned}$$

Then, we have :

$$(C_n^1 - S_n^1) + (C_n^2 - D_n^2) \leq (S_n^2 - D_n^2) \leq (D_n^1 - S_n^1)$$

If we show that $C_n^2 - D_n^2$ converge to 0, we can conclude using comparison theorem, because the convergence of $D_n^1 - S_n^1$ and $C_n^1 - S_n^1$ to 0 is true thanks to the Remark 1.3.3. Let us then show this convergence

As in the neighbourhood of 1, $l(t) = o((1-t)^{-2})$ (Remark 1.2.2), we also have $F^{-1}(t) = o((1-t)^{-1})$.

Then, for $\epsilon > 0$, there exists N such that for $n \geq N$:

$$C_n^2 - D_n^2 = - \int_{\frac{n-1}{n+1}}^{\frac{n}{n+1}} F^{-1}(t) dt \leq \epsilon \int_{\frac{n-1}{n+1}}^{\frac{n}{n+1}} \frac{1}{1-t} dt = \epsilon \ln(2).$$

Finally, $S_n^2 - D_n^2$ converges to 0 a.s. So that, the same holds for B_n .

We have shown that $A_n + B_n$ converge to 0 in probability. So under our hypothesis, the superquantile is consistent in probability.

Remarque 1.3.4. *Using the same arguments, we can show that under stronger hypothesis on the quantile function $F^{-1}(t) = o\left(\frac{1}{(1-t)^{\frac{1}{2}}}\right)$ (that is the case in ii) of Proposition 1.2.1), we have*

$$- \int_{\frac{n-1}{n+1}}^{\frac{n}{n+1}} F^{-1}(t) dt \leq \epsilon \int_{\frac{n-1}{n+1}}^{\frac{n}{n+1}} \frac{1}{(1-t)^{\frac{1}{2}}} dt = \epsilon - 2(1-\sqrt{2}) \frac{1}{\sqrt{n}}.$$

Then

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^n F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) - \int_{\alpha}^1 F^{-1}(y) dy \right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

We will use this result in the next part. □

1.3.3 Proof of ii) of Theorem 1.2.1 : asymptotic normality of the plug-in estimator (1.1)

Let us prove the asymptotic normality of the estimator of the superquantile. To begin with, we can make some technical remarks.

Remarque 1.3.5. *The assumption on L implies that there exists $\epsilon_l > 0$ and $\epsilon_{F^{-1}} > 0$ such that $l(t) = O\left((1-t)^{-\frac{3}{2}+\epsilon_l}\right)$, and $F^{-1}(t) = O\left((1-t)^{-\frac{1}{2}+\epsilon_{F^{-1}}}\right)$. It also implies that in the neighbourhood of 1, $L(t) = o\left((1-t)^{-\frac{5}{2}}\right)$.*

Proof. The proof stands in three steps. First we reformulate and simplify the problem and apply the Taylor Lagrange formula. Then, we show that the second order term converges to 0 in probability. In the third step, we identify the limit of the first order term.

Step 1 : Taylor-Lagrange formula

Let us first omit $(1-\alpha)^{-1}$. We have to study the convergence in distribution of

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^n Y_{(i)} - \int_{\alpha}^1 F^{-1}(y) dy \right).$$

We have already noticed (Remarks 1.3.4 and 1.3.5) that

$$\sqrt{n} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^n F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) - \int_{\alpha}^1 F^{-1}(y) dy \right] \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0.$$

Thus, Slutsky's lemma, allows us to study only the convergence in law of

$$\sqrt{n} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^n Y_{(i)} - \frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^n F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) \right].$$

The quantile function F^{-1} is two times differentiable so that we may apply the first order Taylor-Lagrange formula. Using the same argument as in the proof of i), we introduce $U_{(i)}$ a random variable distributed as a $\beta(i, n+1-i)$. Considering an equality in law we then have

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n \left[Y_{(i)} - F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right) \right] \right) &\stackrel{\mathcal{L}}{=} \sqrt{n} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n \left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right) \frac{1}{f\left(F^{-1}\left(\frac{i}{n+1}\right)\right)} \right] \\ &+ \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n \left[\int_{\frac{i}{n+1}}^{U_{(i)}} \frac{f'(F^{-1}(t))}{[f(F^{-1}(t))]^3} (U_{(i)} - t) dt \right]. \end{aligned}$$

Let us call $\sqrt{n}M_n$ the first-order term and R_n the second-order one.

Step 2 : The second-order term converges to 0 in probability

Let us show that R_n converges to 0 in probability. We will use the same decomposition as for A_n . First, we deal with the last term : $i = n$. Still using (1.2) and **H1** we have the existence of a constant C_2 such that for n big enough,

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{\frac{n}{n+1}}^{U(n)} L(t) (U(n) - t) dt \right| &\leq \frac{1}{\sqrt{n}} \max \left(\frac{C_2}{(1 - U(n))^{\frac{5}{2} - \epsilon_L}}, \frac{C_2}{\left(1 - \frac{n}{n+1}\right)^{\frac{5}{2} - \epsilon_L}} \right) \frac{\left(U(n) - \frac{n}{n+1}\right)^2}{2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\left(U(n) - \frac{n}{n+1}\right)^2}{2} \frac{C_2}{(1 - U(n))^{\frac{5}{2} - \epsilon_L}} + \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\left(U(n) - \frac{n}{n+1}\right)^2}{2} \frac{C_2}{\left(1 - \frac{n}{n+1}\right)^{\frac{5}{2} - \epsilon_L}} \end{aligned}$$

which converges to 0 in probability exactly as in (1.11) thanks to (1.3) and Slutsky lemma. This is the same idea for the term $i = n - 1$.

Let us now deal with the remaining sum (for i from $\lfloor n\alpha \rfloor$ to $n - 2$) that we still denote R_n . We use same kind of reasoning that for A_n . First, we still have for $\frac{\alpha}{2} \geq \epsilon > 0$,

$$R_n = R_n \mathbb{1}_{U(\lfloor n\alpha \rfloor) < \epsilon} + R_n \mathbb{1}_{U(\lfloor n\alpha \rfloor) \geq \epsilon}$$

The first term converges in probability to 0 using the same argument as in (1.12). Let us then deal with the second term that we denote R'_n and show its convergence in L^1 . Since **H2** gives also informations on a neighbourhood of 1 and on every compact set, we will use the same kind of argument as before (and so Remark 1.2.2). For $\eta > 0$, there exists, thanks to **H2**, a real number ξ_η such that

- $\forall t \in]1 - \xi_\eta, 1[, |L(t)| \leq \frac{\eta}{(1-t)^{\frac{5}{2}}}$.
- On $[\epsilon, 1 - \xi_\eta]$ which is a compact set, the function L is bounded by a constant C_3 .

Moreover, since $U(\lfloor n\alpha \rfloor) \geq \epsilon$, we have already seen that

$$]U_{(i), \frac{i}{n+1}}[\subset [\epsilon, 1[, \quad (i = \lfloor n\alpha \rfloor, \lfloor n\alpha \rfloor + 1, \dots, n).$$

Finally, we get, by denoting $m_i = \min\left(U_{(i), \frac{i}{n+1}}\right)$ and $M_i = \max\left(U_{(i), \frac{i}{n+1}}\right)$, ($i = \lfloor n\alpha \rfloor, \lfloor n\alpha \rfloor + 1, \dots, n$),

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}(|R'_n|) &\leq \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \mathbb{E} \left(\left| \int_{U_{(i)}}^{\frac{i}{n+1}} (U_{(i)} - t) L(t) dt \right| \right) \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \mathbb{E} \left(\int_{m_i}^{1-\xi_\eta} |U_{(i)} - t| |L(t)| dt \right) + \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \mathbb{E} \left(\int_{1-\xi_\eta}^{M_i} |U_{(i)} - t| |L(t)| dt \right) \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} C_3 \mathbb{E} \left(\frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \mathbb{E} \left(\max \left(\frac{\eta}{(1-U_{(i)})^{\frac{5}{2}}}, \frac{\eta}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{5}{2}}} \right) \frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{2} \right) \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{C_3}{2(n+2)} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \frac{i}{n+1} \left(1 - \frac{i}{n+1} + \frac{1}{n+1} \right) := S_n^1 \\
 &\quad + \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n \mathbb{E} \left(\frac{\eta}{(1-U_{(i)})^{\frac{5}{2}}} \frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{2} \right) := S_n^2 \\
 &\quad + \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \mathbb{E} \left(\frac{\eta}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{5}{2}}} \frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{2} \right) := S_n^3.
 \end{aligned}$$

S_n^1 converges to 0 as the Riemann sum of the continuous function $x \mapsto x(1-x)$ multiplied by $n^{-\frac{1}{2}}$. We have also

$$S_n^3 = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \frac{\eta}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{5}{2}}} \frac{i(n+1-i)}{(n+2)(n+1)^2}$$

which has the same behaviour when n goes to $+\infty$ that

$$\eta \frac{1}{\sqrt{n^{\frac{3}{2}}}} \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^{n-2} \frac{1}{\left(1 - \frac{i}{n}\right)^{\frac{3}{2}}} := \eta V_n$$

which goes to 0 because thanks to Lemma 1.3.1, V_n is bounded independently of η and because η is arbitrary small. Finally, to study the converges to 0 of S_n^2 , we have to compute

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E} \left(\frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{\left(U_{(i)} - 1 \right)^{\frac{5}{2}}} \right) &= \frac{1}{B(i, n+1-i)} \int_0^1 x^{i-1} (1-x)^{n-i-\frac{5}{2}} \left(x - \frac{i}{n+1} \right)^2 dx \\
 &= \frac{1}{B(i, n+1-i)} \left(\int_0^1 x^{i+1} (1-x)^{n-i-\frac{5}{2}} dx - 2 \frac{i}{n+1} \int_0^1 x^i (1-x)^{n-i-\frac{5}{2}} dx \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{i}{n+1} \right)^2 \int_0^1 x^{i-1} (1-x)^{n-i-\frac{5}{2}} dx \right).
 \end{aligned}$$

Let us call this last quantity I_n^i . For $i < n-1$,

$$I_n^i = \frac{1}{B(i, n+1-i)} \left[B\left(i+2, n-i-\frac{5}{2}+1\right) - 2\frac{i}{n+1} B\left(i+1, n-i-\frac{5}{2}+1\right) + \left(\frac{i}{n+1}\right)^2 B\left(i, n-i-\frac{5}{2}+1\right) \right].$$

So that using (1.7) we obtain

$$I_n^i = \frac{B\left(i, n-i-\frac{5}{2}+1\right)}{B(i, n+1-i)} \left[\frac{i(i+1)}{\left(n-\frac{5}{2}+2\right)\left(n-\frac{5}{2}+1\right)} - 2\frac{i^2}{\left(n-\frac{5}{2}+1\right)(n+1)} \frac{i(i+1)}{\left(n-\frac{5}{2}+2\right)\left(n-\frac{5}{2}+1\right)} + \left(\frac{i}{n+1}\right)^2 \frac{i(i+1)}{\left(n-\frac{5}{2}+2\right)\left(n-\frac{5}{2}+1\right)} \right].$$

Let E_n^i be such that $I_n^i = \frac{B(i, n-i-\frac{5}{2}+1)}{B(i, n+1-i)} E_n^i$. Expanding E_n^i gives when n goes to infinity

$$E_n^i \sim \frac{1}{n} \frac{i}{n+1} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right).$$

Let us study the term $\frac{B(i, n-i-\frac{5}{2}+1)}{B(i, n+1-i)}$. Using (1.6) and (1.9), we obtain

$$\begin{aligned} \frac{B\left(i, n-i-\frac{5}{2}+1\right)}{B(i, n+1-i)} &= \frac{n!}{\left(n-2-\frac{1}{2}\right)!} \frac{\left(n-i-2-\frac{1}{2}\right)!}{(n-i)!} \\ &= \frac{n(n-1)}{(n-i-1)(n-i)} \frac{(2(n-i-2))!((n-2)!)^2 2^{2i}}{((n-i-2)!)^2 (2(n-2))!} \end{aligned}$$

Since each i can be written as $i = \lfloor n\beta \rfloor$ with $\beta < 1$, $n-i$ goes to infinity when n goes to infinity and we can apply the Stirling formula:

$$\frac{(2(n-i-2))!}{((n-i-2)!)^2} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\sqrt{2(n-i-2)2\pi} \left(\frac{2(n-i-2)}{e}\right)^{2(n-i-2)}}{2\pi(n-i-2) \left(\frac{n-i-2}{e}\right)^{n-i-2}} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{2^{2(n-i-2)}}{\sqrt{\pi(n-i-2)}}.$$

Likewise,

$$\frac{(2(n-2))!}{((n-2)!)^2} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{2^{2(n-2)}}{\sqrt{\pi(n-2)}}.$$

Then, when n goes to infinity

$$\frac{B\left(i, n-i-\frac{5}{2}+1\right)}{B(i, n+1-i)} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{5}{2}}}.$$

Hence, we obtain

$$I_i^n = \frac{B\left(i, n - i - \frac{5}{2} + 1\right)}{B(i, n + 1 - i)} E_i^n \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{n} \frac{\frac{i}{n+1}}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{3}{2}}}.$$

Finally,

$$I_i^n \leq \frac{2}{n} \frac{\frac{i}{n+1}}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{3}{2}}}.$$

and

$$\begin{aligned} \frac{\eta}{\sqrt{n}} \sum_{i=[n\alpha]}^{n-2} \mathbb{E} \left(\left| L(U_{(i)}) \right| \frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{2} \right) &\leq \frac{\eta}{2\sqrt{n}} \sum_{i=[n\alpha]}^{n-2} \mathbb{E} \left(\frac{\left(U_{(i)} - \frac{i}{n+1} \right)^2}{\left(U_{(i)} - 1 \right)^{\frac{5}{2}}} \right) \\ &\leq \frac{\eta}{\sqrt{n}} \frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]}^{n-2} \frac{\frac{i}{n+1}}{\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^{\frac{3}{2}}} \\ &\sim \eta \frac{1}{n^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=[n\alpha]}^{n-2} \frac{1}{\left(1 - \frac{i}{n}\right)^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned}$$

Finally, R'_n converges in L^1 to 0 and so in probability. Hence, R_n converges to 0 in probability.

Step 3 : Identification of the limit

Our goal is to find the limit of $\sqrt{n}M_n$. Let us reorganize the expression of M_n to have a more classical form (sum of independent random variables) and to allow the use of the Proposition 1.3.2.

Denoting by

$$\bar{Y} = \frac{\sum_{j=1}^{n+1} Y_j}{n+1},$$

we have thanks to (1.4)

$$\begin{aligned} M_n &= \frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n \left(\frac{\sum_{j=1}^i Y_j}{\frac{n+1}{\sum_{k=1}^{n+1} Y_k}} - \frac{i}{n+1} \right) l\left(\frac{i}{n+1}\right) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{Y_j}{\frac{n+1}{\sum_{k=1}^{n+1} Y_k}} - \frac{1}{n+1} \right) \sum_{i=\sup([n\alpha]+1, j)}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right] \\ &= \frac{n+1}{n+1} \frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{[n\alpha]+1} \left((Y_j - \bar{Y}) \sum_{i=[n\alpha]+1}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right) + \sum_{j=[n\alpha]+2}^n \left((Y_j - \bar{Y}) \sum_{i=j}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right) \right]. \end{aligned}$$

where we have permuted the two sums. The law of large numbers gives that \bar{Y} converges a.s to 1 when n goes to infinity. Then, thanks to Slutsky's lemma, we only need to study

$$\frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{\lfloor n\alpha \rfloor + 1} \left((Y_j - \bar{Y}) \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right) + \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^n \left((Y_j - \bar{Y}) \sum_{i=j}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right) \right].$$

We set $\forall j \leq n$, $G_j^n := \sum_{i=j}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right)$, $G_{n+1}^n := 0$, $H^n := \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^n G_j^n$. Then

$$\begin{aligned} M_n &= \frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{\lfloor n\alpha \rfloor + 1} \left(\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n+1} \right) Y_j + \sum_{\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(G_j^n - \frac{H^n}{n+1} + G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n \frac{-1 - \lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) Y_j \right] \\ &= \frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{\lfloor n\alpha \rfloor + 1} \left(\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n+1} \right) (Y_j - 1) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(G_j^n - \frac{H^n}{n+1} + G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n \frac{-1 - \lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) (Y_j - 1) \right], \end{aligned}$$

because

$$\begin{aligned} &\frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{\lfloor n\alpha \rfloor + 1} \left(\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n+1} \right) + \sum_{\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(G_j^n - \frac{H^n}{n+1} + G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n \frac{-1 - \lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) \right] \\ &= \frac{1}{n(n+1)} \left[\left(\frac{G_{\lfloor n\alpha \rfloor}^n (n - \lfloor n\alpha \rfloor) - H^n}{n+1} \right) (\lfloor n\alpha \rfloor + 1) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{G_{\lfloor n\alpha \rfloor}^n (-1 - \lfloor n\alpha \rfloor)}{n+1} (n - \lfloor n\alpha \rfloor) - \frac{H^n}{n+1} (n - \lfloor n\alpha \rfloor) + H^n \right) \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

Finally, we obtain

$$\begin{aligned} M_n &= \frac{1}{n(n+1)} \left[\sum_{j=1}^{\lfloor n\alpha \rfloor + 1} \left(\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n+1} \right) (Y_j - 1) + \sum_{\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(G_j^n - \frac{H^n}{n+1} + G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n \frac{-1 - \lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) (Y_j - 1) \right] \\ &= \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_{j,n} (Y_j - 1), \end{aligned}$$

where

$$\alpha_{j,n} = \left(\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n(n+1)} \right), \quad \forall j \leq \lfloor n\alpha \rfloor + 1$$

and

$$\alpha_{j,n} = \left(\frac{G_j^n (n+1) - H^n - G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n (1 + \lfloor n\alpha \rfloor)}{n(n+1)} \right), \quad \forall j \geq \lfloor n\alpha \rfloor + 2.$$

Let us check the assumptions of the Proposition 1.3.2. To begin with, let us show that σ_n^2 converges. We have

$$\begin{aligned}\sigma_n^2 &= \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} \alpha_{j,n}^2 \\ &= \frac{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}{n+1} \left[\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n(n+1)} \right]^2 \\ &\quad + \frac{1}{n+1} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\frac{G_j^n(n+1)}{n(n+1)} \right)^2 + 2 \frac{1}{n+1} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \frac{G_j^n(n+1)(-H^n - G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n(1 + \lfloor n\alpha \rfloor))}{n^2(n+1)^2} \\ &\quad + \frac{1}{n+1} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\frac{-H^n - G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n(1 + \lfloor n\alpha \rfloor)}{n(n+1)} \right)^2.\end{aligned}$$

Let us work with the two terms which depend on G_j^n . The first term can be expanded as

$$\begin{aligned}\frac{1}{n+1} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\frac{G_j^n(n+1)}{n(n+1)} \right)^2 &= \frac{1}{n^2(n+1)} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} (G_j^n)^2 \\ &= \frac{1}{n^2(n+1)} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\sum_{i=j}^n l\left(\frac{i}{n+1}\right) \right)^2 \\ &= \frac{1}{n(n+1)} \sum_{i_1=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \sum_{i_2=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\frac{-1 + (i_1 \wedge i_2) - \lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) l\left(\frac{i_1}{n+1}\right) l\left(\frac{i_2}{n+1}\right).\end{aligned}$$

The second term may be rewritten as

$$2 \frac{1}{n+1} \sum_{j=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \frac{G_j^n(n+1)(-H^n - G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n(1 + \lfloor n\alpha \rfloor))}{n^2(n+1)^2} = -2 \frac{(H^n)^2}{n^2(n+1)^2} - 2 \frac{(1 + \lfloor n\alpha \rfloor)}{(n+1)^2 n^2} H^n G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n.$$

Finally,

$$\begin{aligned}\sigma_n^2 &= \frac{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}{n+1} \left[\frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor) G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n(n+1)} \right]^2 \\ &\quad + \frac{1}{n(n+1)} \sum_{i_1=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \sum_{i_2=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \left(\frac{-1}{n+1} + \frac{\min(i_1, i_2)}{n+1} - \frac{\lfloor n\alpha \rfloor}{n+1} \right) l\left(\frac{i_1}{n+1}\right) l\left(\frac{i_2}{n+1}\right) \\ &\quad - 2 \frac{(H^n)^2}{n^2(n+1)^2} - 2 \frac{(1 + \lfloor n\alpha \rfloor)}{(n+1)^3 n^2} H^n G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n + \frac{n - \lfloor n\alpha \rfloor - 1}{n+1} \left(\frac{H^n + G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n(1 + \lfloor n\alpha \rfloor)}{n(n+1)} \right)^2.\end{aligned}$$

Let us first notice that, if we denote

$$K^n = \sum_{i_1=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \sum_{i_2=\lfloor n\alpha \rfloor + 2}^{n+1} \frac{\min(i_1, i_2)}{n+1} l\left(\frac{i_1}{n+1}\right) l\left(\frac{i_2}{n+1}\right)$$

and

$$T^n = \sum_{i=\lfloor n\alpha \rfloor}^n \frac{i}{n} l\left(\frac{i}{n+1}\right)$$

then

$$H^n = nT^n - (\lfloor n\alpha \rfloor + 1)G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n.$$

So that

$$\begin{aligned} \sigma_n^2 &\underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \alpha \frac{(G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - T^n)^2}{n^2} + \frac{K^n - \alpha(G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n)^2}{n^2} - \frac{-2(T^n - \alpha G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n)^2}{n^2} \\ &\quad - 2 \frac{\alpha(G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n T^n - \alpha(G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n)^2)}{n^2} + \frac{(1-\alpha)(T^n)^2}{n^2} \\ &\underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{K^n - (T^n)^2}{n^2}. \end{aligned}$$

Let us show that this last quantity converges to $\sigma^2 = \int_{\alpha}^1 \int_{\alpha}^1 \frac{\min(x,y) - xy}{f(F^{-1}(x))f(F^{-1}(y))} < \infty$. Indeed it is a generalized Riemann sum. First, we show that the function

$$g : (x, y) \mapsto \frac{\min(x, y) - xy}{f(F^{-1}(x))f(F^{-1}(y))}$$

is integrable on $]\alpha, 1[\times]\alpha, 1[$. Indeed, around 1,

$$g(x, y) = O\left(\frac{\min(x, y) - xy}{(1-x)^{\frac{3}{2}-\epsilon_l}(1-y)^{\frac{3}{2}-\epsilon_l}}\right)$$

which is integrable on this domain because for β close to 1

$$\int_{\alpha}^{\beta} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\min(x, y) - xy}{(1-x)^{\frac{3}{2}-\epsilon_l}(1-y)^{\frac{3}{2}-\epsilon_l}} dx dy \sim C(\alpha)\beta(1-\beta)^{2\epsilon_l}.$$

and $\epsilon_l > 0$ (here again we see that we really need this $\epsilon_L > 0$).

As we have already seen, the results on Riemann's sum in dimension 2, give by the continuity of the function $(x, y) \mapsto \frac{\min(x,y) - xy}{f(F^{-1}(x))f(F^{-1}(y))}$ that for all $\alpha < \beta < 1$:

$$\sigma_{n,\beta}^2 := \frac{1}{n^2} \sum_{i_1=\lfloor n\alpha \rfloor}^{\lfloor n\beta \rfloor} \sum_{i_2=\lfloor n\alpha \rfloor}^{\lfloor n\beta \rfloor} \frac{\frac{\min(i_1, i_2)}{n} - \frac{i_1 i_2}{n^2}}{f\left(F^{-1}\left(\frac{i_1}{n+1}\right)\right) f\left(F^{-1}\left(\frac{i_2}{n+1}\right)\right)} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\alpha}^{\beta} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\min(x, y) - xy}{f(F^{-1}(x))f(F^{-1}(y))} dx dy.$$

We have to study the remaining part of the sum to conclude. Let us fix β close to 1 and deal with

$$r_{n,\beta}^2 := \frac{1}{n^2} \sum_{i_1=\lfloor n\beta \rfloor}^n \sum_{i_2=\lfloor n\beta \rfloor}^n \frac{\frac{\min(i_1, i_2)}{n} - \frac{i_1 i_2}{n^2}}{f\left(F^{-1}\left(\frac{i_1}{n+1}\right)\right) f\left(F^{-1}\left(\frac{i_2}{n+1}\right)\right)}.$$

First of all, let us notice that

$$r_{n,\beta}^2 = \int_{\beta}^1 \int_{\beta}^1 g\left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n}, \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}\right) dx dy.$$

We want to show that

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} r_{n,\beta}^2 = \int_{\beta}^1 \int_{\beta}^1 g(x, y) dx dy.$$

Let us first show that, using Lebesgue theorem, we can permute the limit in n and the double integral, in this way

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} r_{n,\beta}^2 = \int_{\beta}^1 \int_{\beta}^1 \lim_{n \rightarrow +\infty} g\left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n}, \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}\right).$$

1) Let (x, y) be fixed in $[\beta, 1[\times [\beta, 1[$ and n . Then

$$g\left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n}, \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}\right) \rightarrow g(x, y)$$

by continuity. And g is integrable on $[\beta, 1[\times [\beta, 1[$ as we saw before.

2) Let (x, y) be fixed in $[\beta, 1[\times [\beta, 1[$ and n . Let us denote $x_n = \frac{\lfloor nx \rfloor}{n}$ and $y_n = \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}$. By hypothesis

$$g\left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n}, \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}\right) \leq C \frac{\min(x_n, y_n) - x_n y_n}{(1 - x_n)^{\frac{3}{2} - \epsilon_l} (1 - y_n)^{\frac{3}{2} - \epsilon_l}}.$$

By separating the two cases and using monotony we obtain that

$$g\left(\frac{\lfloor nx \rfloor}{n}, \frac{\lfloor ny \rfloor}{n}\right) \leq Ch(x, y)$$

where

$$h : (x, y) \mapsto \frac{\min(x, y)}{(1 - \min(x, y))^{\frac{3}{2} - \epsilon_l} (1 - \max(x, y))^{\frac{3}{2} - \epsilon_l - 1}}$$

is integrable on $[\beta, 1[\times [\beta, 1[$.

Then, the Lebesgue theorem allows us to permute integration and limit so that, we have shown that $\sigma_n^2 \rightarrow \sigma^2$ and the first assumption of Proposition 1.3.2 holds.

Let us now deal with the second assumption of Proposition 1.3.2 about the maximum of the $\alpha_{i,n}$.

For $j \leq \lfloor n\alpha \rfloor + 1$, we have

$$\alpha_{j,n} = \frac{(n - \lfloor n\alpha \rfloor + 1)G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - H^n}{n(n+1)}.$$

Using the previous computations, for n large enough we have

$$\frac{(\alpha_{j,n})^2}{n\sigma_n^2} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(G_{\lfloor n\alpha \rfloor + 1}^n - \frac{T^n}{n})^2}{K_n - \frac{T_n^2}{n^2}} \frac{1}{n},$$

But the convergence

$$\frac{\left(K^n - \left(\frac{T^n}{n}\right)\right)^2}{n^4} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\alpha}^1 \int_{\alpha}^1 (\min(x, y) - xy)l(x)l(y)dxdy$$

implies the convergence

$$\frac{(G_{[n\alpha]+1}^n - \frac{T^n}{n})^2}{n^4} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \int_{\alpha}^1 (1-x)l(x)dx.$$

Indeed

$$\int_{\alpha}^1 \int_{\alpha}^1 (\min(x, y) - xy)l(x)l(y)dxdy = \int_{\alpha}^1 \int_{\alpha}^1 (y(1-x))l(x)l(y)dxdy + \int_{\alpha}^1 xl(x) \int_x^1 (1-y)l(y)dydx.$$

So that,

$$\frac{(\alpha_{j,n})^2}{n\sigma_n^2} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{C}{n} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

when n goes to infinity. If $j \geq [n\alpha] + 2$ the same property holds as

$$\alpha_{j,n} = \frac{(n+1)G_j^n - H^n - G_{[n\alpha]}^n([n\alpha] + 1)}{n(n+1)} \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(n+1)G_{j^n} - T^n}{n^2}.$$

Hence, we may apply Proposition 1.3.2 and conclude that

$$\sqrt{n}M_n \implies \mathcal{N}(O, \sigma^2).$$

where $\sigma^2 = \int_{\alpha}^1 \int_{\alpha}^1 (\min(x, y) - xy)l(x)l(y)dxdy$. Finally, just multiply by $(1-\alpha)^{-1}$ to get the final result.

Step 4 : Conclusion

The Slutsky lemma allows to conclude using the results of steps 1 and 3. □

1.4 Conclusion

The superquantile was introduced because the usual quantile was not subadditive and does not give enough information on what was happening in the tail-distribution. This quantity is interesting because it satisfies the axioms of a coherent measure of risk. In this chapter, we studied the asymptotic behaviour of the empirical estimator of the superquantile. We showed that, under simple assumptions (easy to check in practice), this estimator is consistent and asymptotically Gaussian. Nevertheless, we exhibit a simple example - the Pareto distribution - for which the theorem does not apply. This problem occurs because the tail distribution of the Pareto law is too heavy.

To overcome this problem, we introduce in the next chapter, a new measure of risk, called the Bregman superquantile.

Chapter 2

Bregman superquantile

The results of this chapter are derived from the paper "Bregman superquantile. Estimation method and applications" of T. Labopin-Richard, F. Gamboa, A. Garivier and B. Iooss, published in the journal *Dependence Modeling*.

2.1 Aim and scope

The aim of this chapter is to define and to study properties and estimation procedures for Bregman extension of the superquantile defined in [85] or in [104] (see also [84], [83] and references therein). In Section 2 we introduce the Bregman superquantile. Further in Section 3, we study axioms of a coherent measure of risk for this quantity. In Section 4, we seek to estimate this Bregman superquantile, we introduce a plug-in estimator and study its convergence and its asymptotic normality. Some numerical simulations are shown in Section 5, to compare performance of empirical estimators of the classical and the Bregman superquantile. An application on real data of radiological exposure is given in Section 6. All the proofs are postponed to Section 7.

2.2 Definition of the Bregman superquantiles

In this section the aim is to build a general measure of risk that satisfies some of the regularity axioms stated in Definition 0.0.3. We also would like that this quantity is finite for more distributions than the classical superquantile and have a more regular empirical estimator. This new measure of risk will be built by using a dissimilarity measure between real numbers, the Bregman divergence (see [16]).

Let us first recall the definition of the Bregman mean of a probability measure μ (see [10]) and define the measure of risk that we will study. To begin with, we recall the definition of the Bregman divergence that will be used to build the Bregman mean. Let γ be a strictly convex function, $\overline{\mathbb{R}}$ -valued on \mathbb{R} . As usual we set

$$\text{dom}_\gamma := \{x \in \mathbb{R} : \gamma(x) < +\infty\}.$$

For sake of simplicity we assume that dom_γ is a non empty open set and that γ is a closed proper differentiable function on the interior of dom_γ (see [81]). From now we always consider function γ satisfying this assumption. The Bregman divergence d_γ associated to γ (see [16]) is a function defined on $\text{dom}_\gamma \times \text{dom}_\gamma$ by

$$d_\gamma(x, x') := \gamma(x) - \gamma(x') - \gamma'(x')(x - x') \quad , \quad (x, x' \in \text{dom}_\gamma).$$

The Bregman divergence is not a distance as it is not symmetric. Nevertheless, as it is non negative and vanishes, if and only if, the two arguments are equal, it quantifies the proximity of points in dom_γ . Let us recall some classical examples of such a divergence.

- Euclidean. $\gamma(x) = x^2$ on \mathbb{R} , we obviously obtain, for $x, x' \in \mathbb{R}$,

$$d_\gamma(x, x') = (x - x')^2.$$

- Geometric. $\gamma(x) = x \ln(x) - x + 1$ on \mathbb{R}_+^* we obtain, for $x, x' \in \mathbb{R}_+^*$,

$$d_\gamma(x, x') = x \ln \frac{x}{x'} + x' - x.$$

- Harmonic. $\gamma(x) = -\ln(x) + x - 1$ on \mathbb{R}_+^* we obtain, for $x, x' \in \mathbb{R}_+^*$,

$$d_\gamma(x, x') = -\ln \frac{x}{x'} + \frac{x}{x'} - 1.$$

Let μ be a probability measure whose support is included in dom_γ and that does not weight the boundary of dom_γ . Assume further that γ' is integrable with respect to μ . Following [10], we first define the Bregman mean as the unique point b in the support of μ satisfying

$$\int d_\gamma(b, x) \mu(dx) = \min_{m \in \text{dom}_\gamma} \int d_\gamma(m, x) \mu(dx). \quad (2.1)$$

In fact, we replace the L^2 minimization in the definition of the mathematical classical expectation by the minimization of the Bregman divergence. Existence and uniqueness come from the convexity properties of d_γ with respect to its first argument. By differentiating it is easy to see that

$$b = \gamma'^{-1} \left[\int \gamma'(x) \mu(dx) \right].$$

Hence, coming back to our three previous examples, we obtain the classical mean in the first example (Euclidean case), the geometric mean ($\exp \int \ln(x) \mu(dx)$), in the second one and the harmonic mean ($[\int x^{-1} \mu(dx)]^{-1}$), in the third one. Notice that, as the Bregman divergence is not symmetric, we have to pay attention to the definition of the Bregman mean. Indeed, we have

$$\int d_\gamma(x, \mathbb{E}(X)) \mu(dx) = \min_{m \in \text{dom}_\gamma} \int d_\gamma(x, m) \mu(dx).$$

We turn now to the definition of our new measure of risk.

Définition 2.2.1. *Let $\alpha \in]0, 1[$, the Bregman superquantile $Q_\alpha^{d_\gamma}$ of the random variable Y is defined by*

$$Q_\alpha^{d_\gamma}(Y) := \gamma'^{-1} \left(\mathbb{E}(\gamma'(Y) | Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)) \right) = \gamma'^{-1} \left[\mathbb{E} \left(\frac{\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)}}{1 - \alpha} \right) \right]$$

where the second equality holds because F_Y is continuous. In words $Q_\alpha^{d_\gamma}(Y)$ satisfies (2.1) taking for μ the distribution of Y conditionally to

$Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)$. We now denote $Q_\alpha^{d_\gamma}$ the Bregman superquantile of the random variable Y when there is no ambiguity and $Q_\alpha^{d_\gamma}(Y)$ if we need to distinguish Bregman superquantile of different distributions.

For the same reasons as before, the Bregman superquantile is always well-defined as an element of $\bar{\mathbb{R}}$. Moreover, we can already see an advantage of the Bregman superquantile over the classical superquantile. Indeed, some real random variables are not integrable (and so the superquantile is equal to $+\infty$), but thanks to a choice of a very regular function γ , the Bregman superquantile can be finite. For example, let us introduce Y from the one side Cauchy distribution, that is having density function

$$f(x) = \frac{2}{\pi(1+x^2)} \mathbb{1}_{x \geq 0}.$$

Since Y is not integrable, its classical superquantile is equal to $+\infty$. Nevertheless, considering the Bregman superquantile associated to the strictly convex function

$$\gamma(x) = x \ln(x) - x + 1, \text{ we have}$$

$$\mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)} \right) < +\infty$$

because the function $x \mapsto \frac{\ln(x)}{1+x^2}$ is integrable on $[0, +\infty[$.

Interpretation of the Bregman superquantile : As a matter of fact we have

$$Q_\alpha^{d\gamma}(Y) = \gamma'^{-1} \left(Q_\alpha(\gamma'(Y)) \right). \quad (2.2)$$

Indeed, denoting $Z = \gamma'(Y)$, as $\gamma' \left(F_Y^{-1}(\alpha) \right) = F_Z^{-1}(\alpha)$, so that

$$\mathbb{E} \left(\gamma'(Y) | Y > F_Y^{-1}(\alpha) \right) = \mathbb{E} \left(Z | Z > F_Z^{-1}(\alpha) \right).$$

Thus, the Bregman superquantile can be interpreted in the same way that a superquantile under a change of scale. In other words : fix a threshold α and compute the corresponding quantile. Further, change the scale $Y \mapsto \gamma'(Y)$ and compute the corresponding mean. At last, apply the inverse change of scale to come back to the true space.

This natural idea has already been used in economy. For example, noticing that the classical Gini index does not satisfy properties that are essential to ensure a reliable modelisation, Satya et al. introduced in [24] generalized Gini index thanks to a similar change of scale allowing the index to satisfy these properties.

In our case, the main interest of this new measure of risk is also in the change of scale. Indeed, choosing a slowing varying convex function γ leads to a more *robust* risk allowing a statistical estimation with better statistical properties (we show for example in Section 3 that empirical estimator for classical superquantile is not always consistent when X has a Pareto distribution, whereas it is always the case with the Bregman superquantile).

Remarque 2.2.2. *The Bregman superquantile has a close link with the weighted allocation functional in the capital allocation fields. Indeed, in [44], this quantity is defined as :*

$$A_w[U, V] := \frac{E(Uw(V))}{w(V)}$$

where U and V are two real random variables and w is a given map from \mathbb{R}^+ to \mathbb{R}^+ . Choosing $U = Y$, $V = \gamma'(Y)$ and $w(V) = \mathbb{1}_{V \geq Q_\alpha^V}$, we obtain

$$A_w[Y, \gamma'(Y)] = \gamma' \left(Q_\alpha^{d\gamma}(Y) \right).$$

2.3 Coherence of Bregman superquantile

We built the Bregman superquantile because we need a *more regular* measure of risk than the classical superquantile. Since the superquantile was introduced because it is a coherent measure of risk, we have to study this property on our new measure of risk.

2.3.1 Result

The following proposition gives some conditions under which the Bregman superquantile is a coherent measure of risk.

Proposition 2.3.1. *Fix α in $]0, 1[$.*

- i) Any Bregman superquantile always satisfies the properties of constant invariance and monotonicity.*
- ii) The Bregman superquantile associated to the function γ is homogeneous, if and only if, $\gamma''(x) = \beta x^\delta$ for some real numbers $\beta > 0$ and δ (as γ is convex, if the support of γ is strictly included in $\mathbb{R}_*^+ :=]0, +\infty[$ there is no condition on δ but if not, δ is an even number).*
- iii) If γ' is concave and sub-additive, then subadditivity and closeness axioms both hold.*

The proof of this proposition is deferred to Section 7.

To conclude, under some regularity assumptions on γ , the Bregman superquantile is a coherent measure of risk. Let us take some examples.

2.3.2 Examples and counter-examples

- **Example 1 :** $x \mapsto x^2$ satisfies all the hypothesis but it is already known that the classical superquantile is subadditive.
- **Example 2 :** The Bregman geometric and harmonic functions satisfies the assumptions i) and ii). Moreover, their derivatives are, respectively, $x \mapsto \gamma'(x) = \ln(x)$ and $x \mapsto \gamma'(x) = \frac{x-1}{x}$ which are concave but subadditive only on $[1, +\infty[$. Then the harmonic and geometric functions satisfy iii) not for all pairs of random variables but only for pairs (Y, Y') such that, denoting $S := Y + Y'$ we have

$$\min \left(q_\alpha^Y(\alpha), q_\alpha^{Y'}(\alpha), q_\alpha^S(\alpha) \right) > 1.$$

- **Example 3 :** A classical strictly convex function in economy (for example for the computations of the extended Gini index in [24]) is the function $\gamma(x) = x^\alpha$ with $\alpha > 1$ when considering random variables which support is included in $\mathbb{R}^+ := [0, +\infty[$. This convex function satisfies axiom ii) of our proposition, so the associated Bregman superquantile is homogeneous. Moreover, $\gamma'(x) = \alpha x^{\alpha-1}$ is concave if, and only if, $\alpha < 2$. In this case, it is subadditive on $[0, +\infty[$ as a concave function such that $f(0) \geq 0$. Finally, the Bregman superquantile associated to the function $\gamma(x) = x^\alpha$, $1 < \alpha < 2$ is a coherent measure of risk when considering non-negative random variables.
- **Counter-example 4 :** The subadditivity is not true in the general case. Indeed, let $\gamma(x) = \exp(x)$ and assume that $Y \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

$$\mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)} \right) = \int_{\alpha}^1 \exp(x) dx = e - \exp(\alpha).$$

Then, denoting $\mathcal{R}(V) = Q_{\alpha}^{d\gamma}(V)$ for V a random variable, we get

$$\mathcal{R}(Y) = \ln \left(\frac{e - \exp(\alpha)}{1 - \alpha} \right).$$

Moreover,

$$\mathcal{R}(\lambda Y) = \ln \left(\int_{\alpha}^1 \exp(\lambda x) dx \right) = \ln \left(\frac{\exp(\lambda) - \exp((\alpha)\lambda)}{\lambda(1 - \alpha)} \right).$$

For $\alpha = 0.95$ and $\lambda = 2$, we obtain

$$\mathcal{R}(2Y) - 2\mathcal{R}(Y) = \mathcal{R}(Y + Y) - (\mathcal{R}(Y) + \mathcal{R}(Y)) = 0.000107 > 0,$$

and subadditivity fails.

We can also notice that for $\lambda = 4$

$$\frac{\mathcal{R}(4Y)}{4\mathcal{R}(Y)} = 1,000321,$$

and the positive homogeneity is not true which is coherent with the Proposition 2.3.1 since the derivative of γ does not fulfil the assumption.

2.3.3 Remarks toward other natural properties

We study the Bregman superquantile as a measure of risk. It is then natural to wonder if other classical properties of measure of risk are satisfied by this new quantity. Let us make some remarks.

- 1) First, we can study the continuity of the Bregman superquantile. A condition for classical superquantile to be continuous, that is to have

$$Y_n \xrightarrow[a.s.]{} Y \Rightarrow Q_{\alpha}(Y_n) \rightarrow Q_{\alpha}(Y)$$

is that the sequence (Y_n) is equi-integrable. Then the continuity of the Bregman superquantile is true when the sequence $(\gamma'(Y_n))_n$ is equi-integrable.

We thus put forward an other advantage of the Bregman superquantile over the classical superquantile, because the transformation through γ can regularized the sequence and make it equi-integrable. Indeed, let us consider a sample (Y_n) of independent copies of Y where Y has the truncated Cauchy distribution. We have already seen that Y it not integrable. Then the sequence (Y_n) is not bounded in L^1 and so not equi-integrable. But, with the function $\gamma(x) = x \ln(x) - x + 1$, the random variable $\gamma'(Y)$ is integrable. Then the independent sample $(\gamma'(Y_n))_n$ is equi-integrable.

- 2) The relation exhibited in Equation (2.2) allows us to deduce some properties for the Bregman superquantile from the classical superquantile. For example, Gneiting et al. show in [50] that the classical superquantile is not elicitable (notion introduced in [110]). Then, an easy proof by reduction show that, the Bregman superquantile is not elicitable. Likewise, Cont et al. show in [33] that the classical superquantile is not robust (in particular because it is not subadditive). A direct consequence (because the function γ' is continuous and the Levy distance is the distance associated to the weak convergence) is that the Bregman superquantile is not robust either. The Bregman superquantile is another example of what Cont et al. calls the conflict between subadditivity and robustness.

2.4 Estimation of the Bregman superquantile

In this section the aim is to estimate the Bregman superquantile from a sample. We introduce a Monte Carlo estimator and study its asymptotic properties. Under regularity assumptions on the functions γ and F_Y^{-1} , the Bregman superquantile is consistent and asymptotically Gaussian. All along this section, we consider a function γ satisfying our usual properties and a real-valued random variable Y such that $\gamma'(Y)\mathbf{1}_{Y \geq 0}$ is integrable.

2.4.1 Monte Carlo estimator

Assume that we have at hand (Y_1, \dots, Y_n) an i.i.d sample with same distribution as Y . If we wish to estimate $Q_\alpha^{d_\gamma}$, we may use the following empirical estimator :

$$\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma} = \gamma'^{-1} \left[\frac{1}{1-\alpha} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=[n\alpha]+1}^n \gamma'(Y_{(i)}) \right) \right], \quad (2.3)$$

where $Y_{(1)} \leq Y_{(2)} \leq \dots \leq Y_{(n)}$ is the re-ordered sample built with (Y_1, \dots, Y_n) .

2.4.2 Asymptotics

We give a theorem which gives the asymptotic behaviour of the Bregman superquantile. The following assumptions are useful for our next theorem.

- H3)** The function $\gamma' \circ F_Y^{-1}$ is of class \mathcal{C}^1 on $]0, 1[$ and its derivative that we denote by l_γ satisfies $l_\gamma(t) = O\left((1-t)^{-2+\epsilon_{l_\gamma}}\right)$ for an $\epsilon_{l_\gamma} > 0$ when t goes to 1^- .
- H4)** The function $\gamma' \circ F_Y^{-1}$ is of class \mathcal{C}^2 on $]0, 1[$ and its second derivative that we denote by L_γ satisfies $L_\gamma(t) = O\left((1-t)^{-\frac{5}{2}+\epsilon_{L_\gamma}}\right)$ for an $\epsilon_{L_\gamma} > 0$ when t goes to 1^- .

Remarque 2.4.1. Assumption **H1** implies that Y is absolutely continuous of density f_Y which is continuous and positive and that γ is of class \mathcal{C}^2 . It also implies that $l_\gamma = o\left((1-t)^{-2}\right)$ around 1. Assumption **H2** implies that f_Y is also of class \mathcal{C}^1 and γ of class \mathcal{C}^3 . It also implies that $L_\gamma(t) = o\left((1-t)^{-\frac{5}{2}}\right)$.

Théorème 2.4.2. Let $\frac{1}{2} < \alpha < 1$ and Y be a real-valued random variable. Let (Y_1, \dots, Y_n) be an independent sample with the same distribution as Y .

i) Under assumption **H1**, the estimator $\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma}$ is consistent in probability :

$$\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma} \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}} Q_\alpha^{d_\gamma}.$$

ii) Under assumption **H2**, the estimator $\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma}$ is asymptotically normal :

$$\sqrt{n} \left(\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma} - Q_\alpha^{d_\gamma} \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\Rightarrow} \mathcal{N} \left(0, \frac{\sigma_\gamma^2}{\left(\gamma'' \left(Q_\alpha^{d_\gamma}(Y) \right) \right)^2 (1-\alpha)^2} \right),$$

where

$$\sigma_\gamma^2 := \int_\alpha^1 \int_\alpha^1 \frac{(\min(x, y) - xy)}{f_Z(F_Z^{-1}(x)) f_Z(F_Z^{-1}(y))} dx dy.$$

and $Z := \gamma'(Y)$.

Remarque 2.4.3. Easy calculations show that we have the following equalities

$$l_\gamma := \frac{\gamma'' \circ F_Y^{-1}}{f_Y \circ F_Y^{-1}},$$

$$L_\gamma := \frac{(\gamma''' \circ F_Y^{-1}) \times (f_Y \circ F_Y^{-1}) - (f_Y' \circ F_Y^{-1}) \times (\gamma'' \circ F_Y^{-1})}{(f_Y \circ F_Y^{-1})^3}$$

and

$$f_Z = \frac{f_Y \circ \gamma'^{-1}}{\gamma'' \circ \gamma'^{-1}}.$$

Remarque 2.4.4. The second part of the theorem shows the asymptotic normality of the Bregman superquantile empirical estimator. We can then use the Slutsky's lemma to find confidence intervals. Indeed, since our estimator (2.3) is consistent, we also have

$$\frac{\sqrt{n}}{\left(\gamma'' \circ \widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma} \right)} \left(\widehat{Q}_\alpha^{d_\gamma} - Q_\alpha^{d_\gamma}(Y) \right) \Rightarrow \mathcal{N} \left(0, \frac{\sigma_\gamma^2}{(1-\alpha)} \right).$$

2.4.3 Examples of asymptotic behaviour of the Bregman superquantile

Let us now study the same examples that in Chapter 1 but in the case of the Bregman superquantile and its empirical estimator (2.3). For the exponential distribution, the conclusion is the same as in the previous case of classical superquantile. However, for the Pareto distribution, we can find a function γ such that the estimator of the Bregman superquantile is asymptotically normal without any condition on the exponent a involved in the distribution. So, the Bregman superquantile is more interesting than the superquantile in this example.

Exponential distribution

Let us show the example of the exponential distribution (for X) and the harmonic Bregman function (for γ). We have $\gamma'(x) = (x-1)x^{-1}$ and $F_X^{-1}(t) = -\ln(1-t)$.

Then, $Q_\alpha^{d_\gamma} = (1 - I(\alpha))^{-1}$ for

$$I(\alpha) = \frac{1}{1-\alpha} \int_{-\ln(1-\alpha)}^{+\infty} \left(-\frac{1}{x} + 1\right) \exp(-x) dx < +\infty.$$

So that, denoting $Z = \gamma'(Y)$ as in Theorem 2.4.2,

$$F_Z^{-1}(t) = 1 + \frac{1}{\ln(1-t)}.$$

- Consistency. In this case, we have,

$$l_\gamma(t) = \frac{1}{(1-t)(\ln(1-t))^2}.$$

So, l_γ is a $O\left((1-t)^{-2+\frac{1}{2}}\right)$ (when $t \mapsto 1^-$). The estimator (2.3) is consistent.

- Asymptotical normality.

$$L_\gamma(t) = \frac{(\ln(1-t))^2 + 2\ln(1-t)}{(1-t)^2(\ln(1-t))^4},$$

Then L_γ is $O\left((1-t)^{-\frac{5}{2}+\frac{1}{3}}\right)$ (when $t \mapsto 1^-$). The estimator (2.3) is asymptotically Gaussian.

Pareto distribution

Let us now study the case of the Pareto distribution with the geometric Bregman function. We have $F_Y^{-1}(t) = (1-t)^{\frac{-1}{a}}$ and $\gamma'(t) = \ln(t)$. Then, for all $a > 0$, $Q_\alpha^{d_\gamma} = a^{-1}(1 - \ln(1-\alpha))$ is finite. Moreover

$$F_Z^{-1}(t) = -\frac{1}{a} \ln(1-t).$$

- Consistency.

$$l_\gamma(t) = \frac{1}{a} \frac{1}{1-t} = O\left(\frac{1}{(1-t)^{2-\frac{1}{2}}}\right),$$

and the monotonicity is true. The estimator (2.3) is consistent.

- Asymptotic normality.

$$L_\gamma(t) = \frac{1}{a} \frac{1}{(1-t)^2} = O\left((1-t)^{-\frac{5}{2}+\frac{1}{3}}\right).$$

The estimator (2.3) is consistent and asymptotically Gaussian for every $a > 0$.

See next part for an illustration of these results by simulations and a summary.

2.5 Numerical simulations

In our numerical tests we simulate values from a known theoretical distribution and computing the 0.95-quantiles and superquantiles. For each estimated quantity, the reference value is given via a 10^6 -size random sample and a convergence study is performed from a 1000 -size sample to a 10^5 size sample (with a step of 500). In order to annihilate the effect of randomness, 50 repetitions of each numerical experiment are made. Then, we compute

- The mean value of the 50 estimations to be compared to the reference value,
- The standard deviation of the 50 estimations. It allows to compute an experimental 95%-confidence interval (CI) to be compared to the theoretical 95%-CI (given by the central limit theorem).

Each is composed of four plots of convergence for the following quantities: quantile (up left), classical superquantile (up right), geometrical superquantile (bottom left) and harmonic superquantile (bottom right). Each superquantile convergence plot is composed of the following curves: Reference value (dotted black line), mean estimated values (red circles), theoretical 95%-CI (dashed black line) and experimental 95%-CI (solid blue line).

Figure 2.1 gives the results for an exponential distribution of parameter $\lambda = 1$. As predicted by the theory (see Section 2.4.3), for the three different superquantiles, the consistency is verified while the experimental CI perfectly fits the theoretical CI (given by the central limit theorem).

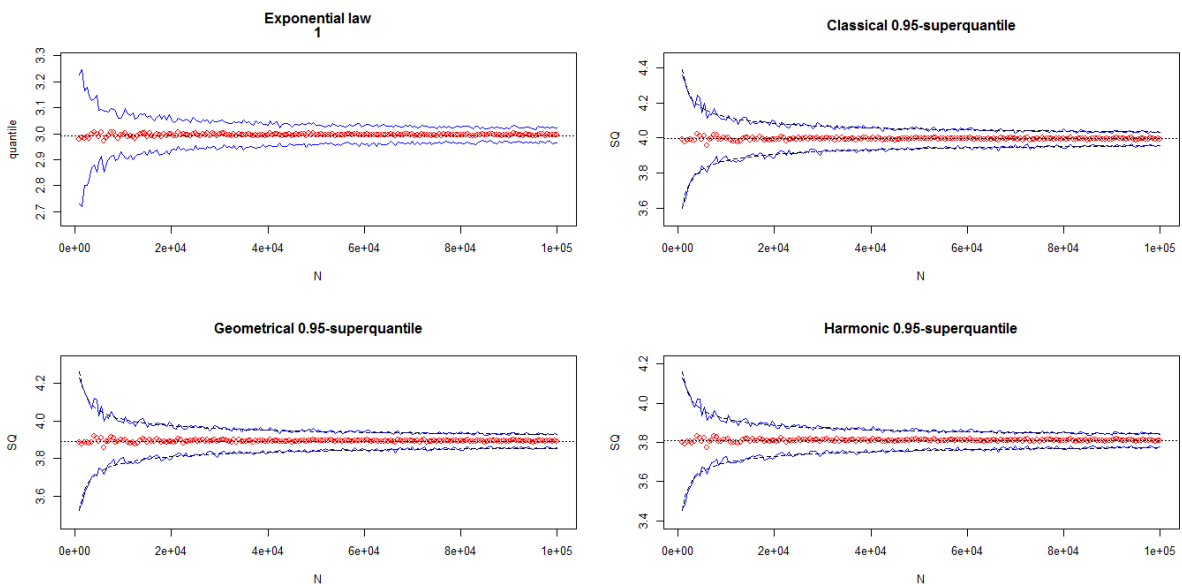


Figure 2.1: Numerical convergence test for the exponential distribution.

We then test the Pareto distribution (see Section 2.4.3) with three different shape parameters: $a = 0.5$, $a = 1.5$ and $a = 2.5$. Figures 2.2 ($a = 0.5$), 2.3 ($a = 1.5$) and 2.4 ($a = 2.5$) give the convergence results. For the geometrical and harmonic superquantiles, as predicted by the theory (see Section 2.4.3), the consistency of the Monte Carlo estimation is verified while the experimental CI perfectly fits the theoretical CI (asymptotic normality). For the classical superquantile, we distinguish three different behaviours:

- No convergence for $a = 0.5$ (Figure 2.2) because the superquantile is not finite.
- Consistency but no asymptotic normality for $a = 1.5$ (Figure 2.3) (theory predicts asymptotic normality only if $a > 2$),
- Consistency and asymptotic normality for $a = 2.5$ (Figure 2.4),

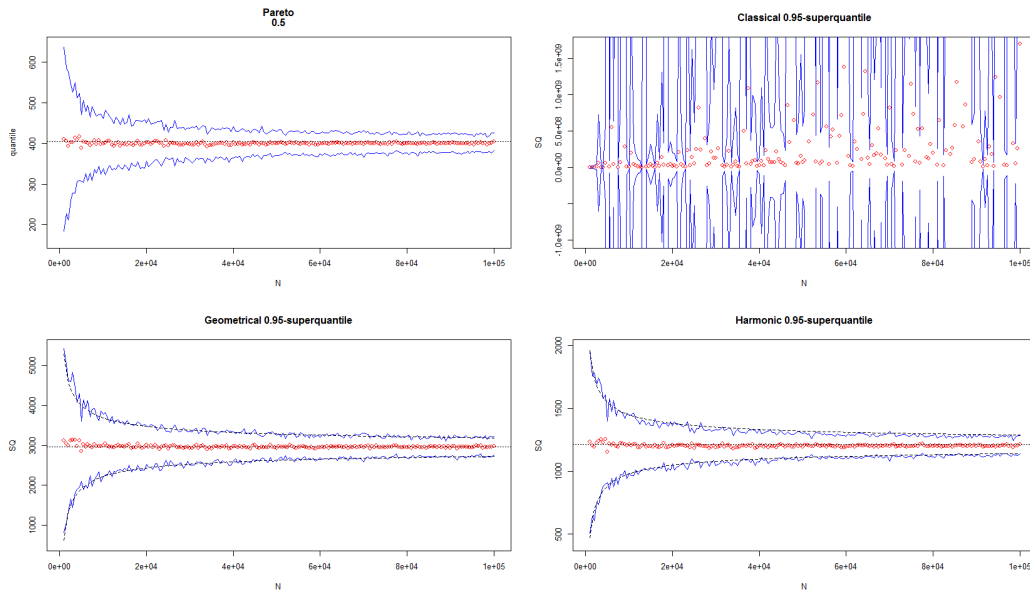


Figure 2.2: Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 0.5$).

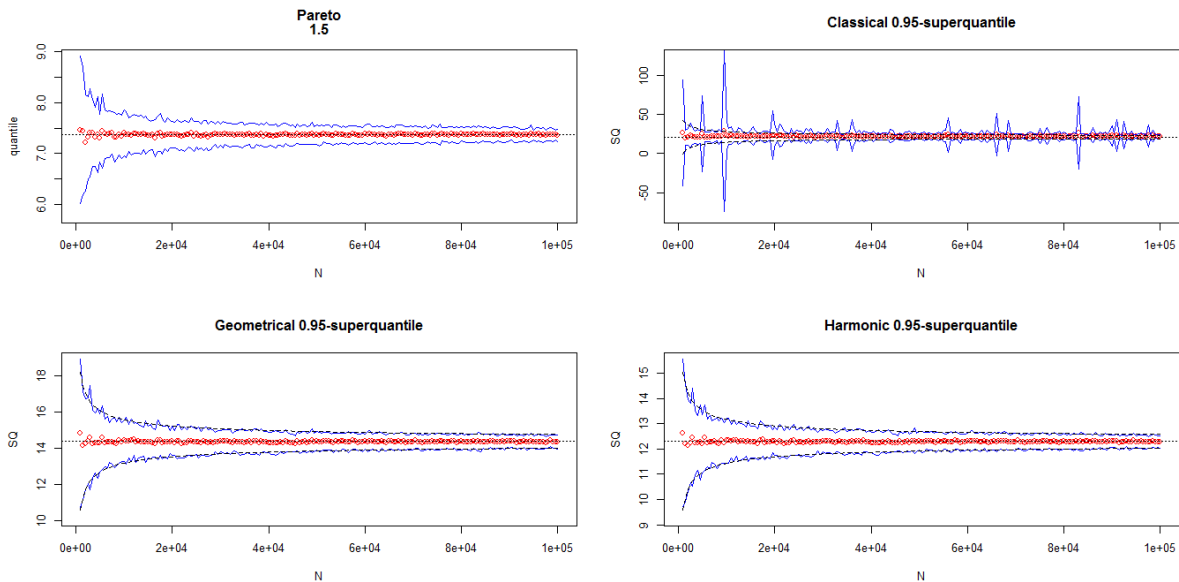


Figure 2.3: Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 1.5$).

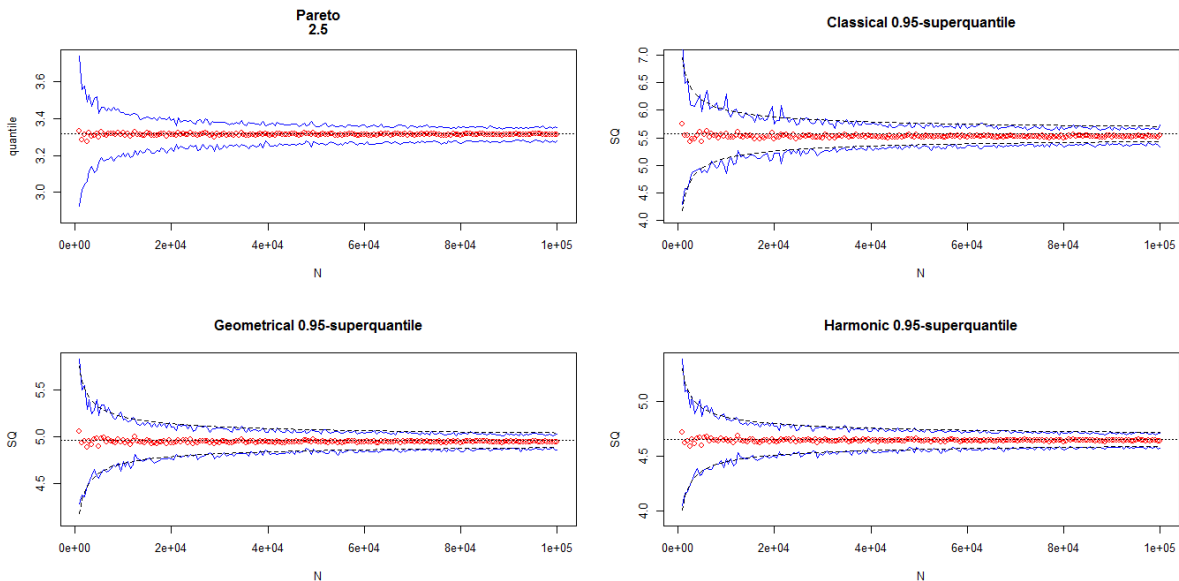


Figure 2.4: Numerical convergence test for the Pareto distribution ($a = 2.5$).

To sum up, the plug in estimators (1.1) and (2.3) seem to have the same asymptotic behaviour when considering distribution with not too heavy tail-distribution, like the exponential distribution. Nevertheless, the estimator of the Bregman superquantile (2.3) has better statistical properties when we deal with heavy tail-distribution. A typical example is the Pareto distribution. Indeed, with Pareto distribution of parameter $a > 2$, the tail is not too heavy and the both estimator have good asymptotic properties. This not the case any more when we choose parameter $a < 2$. When $1 < a < 2$, the estimator of the classical superquantile (1.1) is no more asymptotically Gaussian, whereas the estimator for Bregman superquantile (2.3) keeps good asymptotic properties. Finally, this example show again that the Bregman superquantile is very interesting because it is a quantity which is finite for more laws than the classical superquantile (there is no restriction on $a > 0$ for the Bregman superquantile to be finite whereas the classical superquantile is finite if, and only if $a > 1$).

2.6 Applications to a nuclear safety exercise

GASCON is a software developed by CEA (French Atomic Energy Commission) to study the potential chronological atmospheric releases and dosimetric impact for nuclear facilities safety assessment [54]. It evaluates, from a fictitious radioactive release, the doses received by a population exposed to the cloud of radionuclides and through the food chains. It takes into account the interactions that exist between humans, plants and animals, the different pathways of transfer (wind, rain, ...), the distance between emission and observation, and the time from emission.

As GASCON is relatively costly in computational time, in [54], the authors have built metamodels (of polynomial form) of GASCON outputs in order to perform uncertainty and sensitivity analysis. As in [55], we focus on one output of GASCON, the annual effective dose in ^{129}I received in one year by an adult who lives in the neighbourhood of a particular nuclear facility. Instead of the GASCON software, we will use here the metamodel of this output

which depends on 10 input variables, each one modelled by a log-uniform random variable (bounds are defined in [54]). The range of the model output stands on several decades (10^{-14} to 10^{-11} Sv/year) as shown by Figure 2.5 which represents the histogram (in logarithmic scale) of 10^6 simulated values.

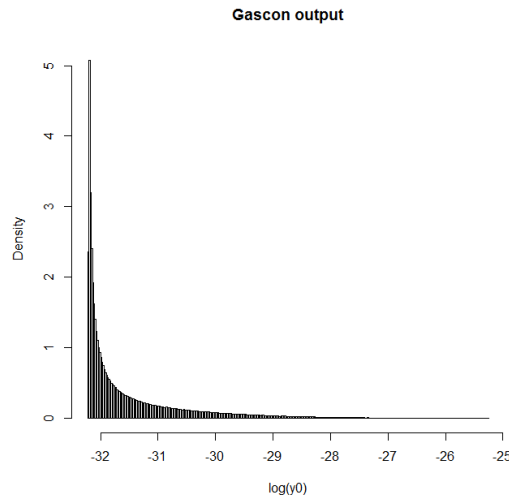


Figure 2.5: Distribution of the GASCON output variable.

For this kind of numerical simulation exercises, we can be typically interested by safety criteria as 95%-quantile and its associated superquantiles. The idea is to compare these values to regulatory limits or to results coming from other scenarios or from other tools. In practice, the number of simulations performed with the GASCON model is several hundreds. Table 2.1 gives the estimated values of the quantile and superquantiles for 1000 metamodel simulations. Figure 2.6 shows the relative errors (computed by averaging 1000 different estimations) which are made when estimating the superquantiles using 3 different Bregman divergences and with different sampling sizes. We observe that geometrical and harmonic superquantiles are clearly more precise than the classical one. Using such measures is therefore more relevant when performing comparisons.

Table 2.1: Estimated values of 95%-quantile and 95%-superquantiles for 1000 simulations.

Quantile	Classical superquantile	Geometrical superquantile	Harmonic superquantile
1.304×10^{-13}	4.769×10^{-13}	3.316×10^{-13}	2.637×10^{-13}

2.7 Proofs

2.7.1 Proof of the Proposition 2.3.1 : coherence of the Bregman superquantile

Proof. Proof of i) :

First we obviously have $Q_{\alpha}^{d\gamma}(C) = \gamma'^{-1}(\gamma'(C)) = C$.

The monotonicity property is well-known for the superquantile (see for example [77], [75] or [3]). Then, (2.2) and the monotonicity of γ'^{-1} and γ' (since γ is strictly convex, its

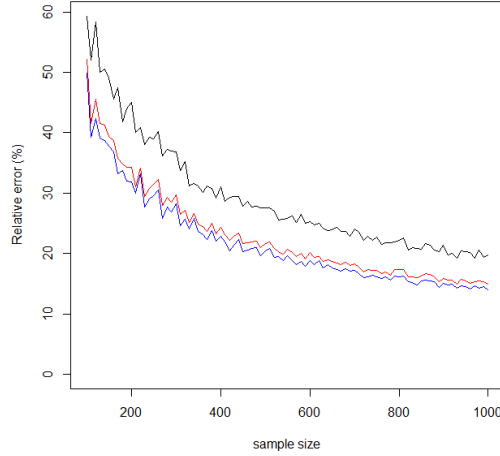


Figure 2.6: Evolution of the relative errors (mean square error divided by the reference value) on the estimated superquantiles in function of the sample size. In black: classical superquantile; in red: geometrical superquantile; in blue: harmonic superquantile. The reference value has been calculated with 10^7 simulations.

derivative γ' is strictly non-decreasing and so is its inverse function γ'^{-1}) allow us to conclude.

Proof of ii) :

Let us reformulate the problem. For every (measurable) function f and for every random variable Y , we denote

$$\mathbb{E}_\alpha[f(Y)] = \mathbb{E}[f(Y)|Y \geq F_Y^{-1}(\alpha)].$$

Let Y and Y' be two real-valued random variable. The Bregman superquantile of Y associated to γ is

$$\gamma'^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\gamma'(Y)]).$$

According to Definition 0.0.3, the Bregman superquantile associated γ is *homogeneous* if, for every random variable Y and every $\lambda > 0$,

$$\gamma'^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\gamma'(\lambda Y)]) = \lambda \gamma'^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\gamma'(Y)]) \quad (2.4)$$

As γ' and $x \mapsto (\gamma'(x) - \gamma'(1))/\gamma''(1)$ yield the same superquantiles, one may assume without loss of generality that $\gamma'(1) = 0$ and that $\gamma''(1) = 1$

First, it is easy to check that the condition given is sufficient. For simplicity, we write $\phi = \gamma'$. Let us show that (2.4) holds for each possible form of Φ given in the proposition. If $\phi(x) = (x^\beta - 1)/\beta$, then $\phi^{-1}(y) = (1 + \beta y)^{1/\beta}$ and

$$\begin{aligned} \phi^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\phi(\lambda Y)]) &= \left(1 + \beta \mathbb{E}_\alpha \left[\frac{(\lambda Y)^\beta - 1}{\beta} \right]\right)^{\frac{1}{\beta}} \\ &= \lambda \left(\mathbb{E}_\alpha [Y^\beta]\right)^{1/\beta} \\ &= \lambda \left(1 + \beta \mathbb{E}_\alpha \left[\frac{Y^\beta - 1}{\beta} \right]\right)^{\frac{1}{\beta}} \\ &= \lambda \phi^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\phi(Y)]). \end{aligned}$$

If $\phi(x) = \ln(x)$, then $\phi^{-1}(y) = \exp(y)$ and

$$\begin{aligned}\phi^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\phi(\lambda Y)]) &= \exp(\mathbb{E}_\alpha(\ln(\lambda Y))) \\ &= \exp(\mathbb{E}_\alpha(\ln(\lambda)) + \mathbb{E}_\alpha(\ln(Y))) \\ &= \lambda \exp(\mathbb{E}_\alpha(\ln(Y))) \\ &= \lambda \phi^{-1}(\mathbb{E}_\alpha[\phi(Y)]) .\end{aligned}$$

Let us now show that the condition on Φ is necessary for (2.4) holds. Let $y > 0$. Let γ be a strictly convex function such that its associated Bregman superquantile is positively homogeneous : for every random variable Y and for every $\lambda > 0$, 2.4 holds. In particular, let U be a random variable with distribution \mathbb{P} such that, denoting $a = y \wedge 1$, $\mathbb{P}(du) = \alpha a^{-1} 1_{[0,a]}(u)du + (1 - \alpha)p\delta_y + (1 - \alpha)(1 - p)\delta_1$. Its quantile of order α is $F_U^{-1}(\alpha) = a$. The conditional distribution of U given $U \geq F_U^{-1}(\alpha)$ is $(1 - p)\delta_1 + p\delta_y$, and $\mathbb{E}_\alpha[\phi(U)] = (1 - p)\phi(1) + p\phi(y)$. The positive homogeneity property (2.4) and the assumption $\phi(1) = 0$ imply that

$$\phi^{-1}((1 - p)\phi(\lambda) + p\phi(\lambda y)) = \lambda \phi^{-1}(p\phi(y)) .$$

By assumption, the expressions on both sides are smooth in p and y . Taking the derivative in p at $p = 0$ yields

$$\frac{\phi(\lambda y) - \phi(\lambda)}{\phi'(\lambda)} = \lambda \frac{\phi(y)}{\phi'(1)} ,$$

and hence, as $\phi'(1) = 1$,

$$\phi(\lambda y) - \phi(\lambda) = \lambda \phi'(\lambda) \phi(y) .$$

By differentiating with respect to y , one gets

$$\phi'(\lambda y) = \phi'(\lambda) \phi'(y) . \tag{2.5}$$

Let ψ be defined on \mathbb{R} by $\psi(z) = \ln(\phi'(\exp(z)))$. One readily checks that Equation (2.5) yields

$$\psi(\ln(y) + \ln(\lambda)) = \psi(\ln(y)) + \psi(\ln(\lambda)) .$$

This equation holds for every $y, \lambda > 0$. This is well known to imply the linearity of ψ : there exists a real number β (which will be positive since γ is convex) such that for all $z \in \mathbb{R}$,

$$\ln(\phi'(\exp(z))) = \psi(z) = \beta z .$$

Thus, $\phi'(\exp(z)) = \exp(\beta z)$, that is $\phi'(y) = y^\beta$ for all $y > 0$. For $\beta = -1$, one obtains $\phi(y) = \ln(y)$. Otherwise, taking into account the constraint $\phi(1) = 0$, this yields

$$\phi(y) = \frac{y^{1+\beta} - 1}{1 + \beta} .$$

Proof of iii) :

Let Y and Y' be two real-valued random variable. Still denoting, $\mathcal{R}(x) = Q_\alpha^{d_\gamma}(Y)$, we want to show that

$$\mathcal{R}(Y + Y') \leq \mathcal{R}(Y) + \mathcal{R}(Y') .$$

Since γ is convex, γ' is non-decreasing and this is the same thing to show that

$$\gamma' \left(\frac{\mathcal{R}(Y + Y')}{2} \right) \leq \gamma' \left(\frac{\mathcal{R}(Y) + \mathcal{R}(Y')}{2} \right).$$

We set $S := Y + Y'$. Using the concavity of γ , we have

$$\begin{aligned} \gamma' \left(\frac{\mathcal{R}(Y) + \mathcal{R}(Y')}{2} \right) &\leq \frac{1}{2} \left[\gamma'(\mathcal{R}(Y)) + \gamma'(\mathcal{R}(Y')) \right] \\ &= \frac{1}{2(1-\alpha)} \mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{X \geq q_\alpha^Y} + \gamma'(Y') \mathbb{1}_{Y' \geq q_\alpha^{Y'}} \right) \end{aligned}$$

where we still denote $\mathcal{R}(V) = Q_\alpha^{d\gamma}(V)$ when V is a random variable. But

$$\gamma' \left(\frac{\mathcal{R}(S)}{2} \right) = \frac{1}{2(1-\alpha)} \mathbb{E} \left(\gamma'(S) \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right).$$

So we want to show that

$$\mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq q_\alpha^Y} + \gamma'(Y') \mathbb{1}_{Y' \geq q_\alpha^{Y'}} - \gamma'(S) \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right) \geq 0.$$

The sud-additivity hypothesis on γ allows us to use the same argument as in [7] for the classical superquantile :

$$\begin{aligned} &\mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq q_\alpha^Y} + \gamma'(Y') \mathbb{1}_{Y' \geq q_\alpha^{Y'}} - \gamma'(S) \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right) \\ &\geq \mathbb{E} \left(\gamma'(Y) \mathbb{1}_{Y \geq q_\alpha^Y} + \gamma'(Y') \mathbb{1}_{Y' \geq q_\alpha^{Y'}} - \gamma'(Y) \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} - \gamma'(Y') \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right) \\ &\geq \gamma'(q_\alpha^Y) \mathbb{E} \left(\mathbb{1}_{Y \geq q_\alpha^Y} - \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right) + \gamma'(q_\alpha^{Y'}) \mathbb{E} \left(\mathbb{1}_{Y' \geq q_\alpha^{Y'}} - \mathbb{1}_{S \geq q_\alpha^S} \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Finally, we show the closeness under the same assumption as just before. Let be $(Y_h)_{h>0}$ satisfying the hypothesis. By subadditivity we have

$$\mathcal{R}(Y) \leq \mathcal{R}(Y_h) + \mathcal{R}(Y_h - Y) \leq 0 + \mathcal{R}(Y_h - Y).$$

Then denoting $U_h = Y_h - Y$, it is enough to show that

$$U_h \xrightarrow{L^2, n \rightarrow +\infty} 0 \implies \mathcal{R}(U_h) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$$

to conclude. Thanks to the concavity of γ' we can use Jensen inequality for conditional expectation

$$\gamma'^{-1} \left[\mathbb{E} \left(\gamma'(U_h) | U_h \geq F_{U_h}^{-1}(\alpha) \right) \right] \leq \mathbb{E} \left(U_h | U_h \geq F_{U_h}^{-1}(\alpha) \right).$$

We conclude with Cauchy-Schwartz inequality

$$\frac{\mathbb{E} \left(U_h \mathbb{1}_{U_h \geq F_{U_h}^{-1}(\alpha)} \right)}{1-\alpha} \leq \mathbb{E} \left((U_h)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbb{E} \left(\mathbb{1}_{U_h \geq F_{U_h}^{-1}(\alpha)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{1-\alpha} = \|U_h\|^2 \sqrt{1-\alpha} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

□

2.7.2 Proof of Theorem 2.4.2 : asymptotic behaviour of the plug-in estimator (2.3)

Thanks to the link established in Equation (2.2) between the classical and the Bregman superquantile, we can prove Theorem 2.4.2 by using Theorem 1.2.1 of the Chapter 1.

First, we apply Theorem 1.2.1 to the sample (Z_1, \dots, Z_n) where $Z_i := \gamma'(X_i)$. Then we conclude by applying the continuous mapping theorem with γ'^{-1} which is continuous thanks to assumption **H3** for the consistency, and by applying the delta-method (see for example [101]), with the function γ'^{-1} which is differentiable thanks to assumption **H4** and of positive derivative since γ is strictly convex.

2.8 Conclusion

In this chapter, we have introduced a new coherent measure of risk with the help of the Bregman divergence associated to a strictly convex function γ . They are rich tools because of the diversity of the functions γ that can be chosen according to the problem we study. We shown through different examples that a judicious choice for the function γ can make the Bregman superquantile a more interesting measure of risk than the classical superquantile (Bregman superquantile can be finite even in infinite mean model, it is continuous in more cases, more *robust* etc...). Moreover, we have introduced a Monte Carlo estimator of the Bregman superquantile which is statistically powerful thanks to the strictly convex (and so settling) function γ .

The theoretical properties obtained in this paper are confirmed on several numerical test cases. More precisely, geometrical and harmonic superquantiles are more robust than the classical superquantile. This robustness is particularly important in in finance and risk assessment studies. For instance, in risk assessment, when dealing with real data, geometrical and harmonic statistics have been proved to be more relevant than classical statistics. For example [25] prove the usefulness of the geometrical mean and variance for the analysis of air quality measurements. As an illustration, we have applied the geometrical and harmonic superquantiles on real data coming from a radiological impact code used in the nuclear industry.

Further studies will try to apply these criteria in probabilistic assessment of physical components reliability using numerical simulation codes [37]. However, Monte Carlo estimators are no longer applicable in this context and efficient estimators have to be developed. Ideas involving response surface technique should be developed (see for example [21] for quantile estimation and [9] for rare event probability estimation).

Finally those Bregman superquantiles are interesting because they can be linked with several previous works in economy. There is for example a strong link between capital allocations and Bregman superquantile. It would be interesting to apply our results on this economic theory in a future work.

Conclusion

Dans cette première partie, nous avons traité de l'estimation empirique du quantile et du superquantile dans des codes numériques non coûteux. Nous avons d'abord rappelé les théorèmes concernant le comportement asymptotique de l'estimateur empirique du quantile. Ensuite, nous avons proposé un théorème avec des hypothèses minimales, claires et simples à vérifier en pratique, résumant le comportement asymptotique de l'estimateur empirique du superquantile. Enfin, après avoir mis en avant une faiblesse de ce dernier (il n'est très performant d'un point de vue statistique pour certaines lois à lourde queue de distribution), nous avons introduit une nouvelle mesure de risque, le superquantile. Cette nouvelle quantité à l'avantage d'être finie pour de plus nombreuses lois et son estimateur empirique se comporte mieux dans un cadre général.

Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'Introduction de cette thèse, tous les résultats de cette partie peuvent facilement s'appliquer au modèle de code stochastique non coûteux. Il suffit pour cela de remplacer toutes les sorties Y par des sorties $Y(x)$ pour une entrée x quelconque. Cependant, cette méthode d'estimation nécessite la création d'un échantillon d'inférence différents pour toutes les entrées x . Même si le code que nous considérons n'est pas coûteux, ce n'est peut-être pas la méthode la plus adaptée aux codes stochastiques. Dans la suite, nous allons donc chercher une méthode d'estimation plus adaptée aux codes stochastiques. Une telle méthode devra permettre, pour chaque entrée x fixée mais quelconque, de donner une bonne estimation du quantile conditionnel correspondant, mais en utilisant un échantillon d'inférence commun à toutes ces entrées.

En pratique, nous l'avons déjà vu, la plupart des codes qui sont utilisés sont en réalité très coûteux. La méthode que nous avons présentée n'est pas une méthode intéressante dans ce contexte, si nous n'en connaissons que des résultats asymptotiques. Pour obtenir des résultats non-asymptotiques, plus informatifs dans ce contexte de codes coûteux, nous avons déjà vu qu'il semble plus pertinent de travailler sur des méthodes d'estimation séquentielles. Bien que les estimateurs empiriques puissent s'écrire de manière séquentielle, ce ne sont pas les estimateurs pour lesquels il est le plus aisé d'obtenir des résultats non-asymptotiques. En revanche, parmi la classe des estimateurs séquentiels, il existe une sous-catégorie d'estimateurs pour lesquels la recherche de résultats non-asymptotiques est en pleine expansion. Il s'agit des algorithmes stochastiques, dont nous allons parler dans la deuxième partie de cette thèse.

Part II

Estimation séquentielle par algorithme stochastique

Introduction

Dans cette partie, nous souhaitons estimer le quantile et le superquantile de la sortie de codes numériques ou stochastiques coûteux. Afin de gérer au mieux notre budget d'appels au code, nous souhaitons développer une estimation séquentielle à un pas et en étudier le comportement non-asymptotique. Pour cela, nous faisons appel à la théorie des algorithmes stochastiques de Robbins-Monro. Ces algorithmes, introduits pour la première fois dans [80], ont pour but d'estimer le zéro d'une fonction dépendant d'une variable aléatoire inconnue. Ils sont alors tout indiqués pour estimer un quantile q ou un superquantile Q de niveau α d'une loi inconnue Y . En effet lorsque la loi Y est continue, le quantile est bien le zéro de la fonction $F_Y(\cdot) - \alpha$. De même, puisque le superquantile est défini (à une constante près que nous négligeons dans toute cette partie) comme l'espérance de la loi tronquée au delà de son quantile, il est bien le zéro de la fonction $\mathbb{E}[(Y\mathbf{1}_{Y>q} - \cdot)^2]$. Ainsi, en prenant $(\gamma_n^q)_n$ et $(\gamma_n^Q)_n$ deux suites de pas déterministes, positives et décroissante, on peut construire les algorithmes

$$\begin{cases} q_0 \in \mathbb{R} \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1}^q (\mathbf{1}_{Y_{n+1}>q_n} - \alpha) \end{cases} \quad (2.6)$$

et

$$\begin{cases} Q_0 \in \mathbb{R} \\ Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1}\mathbf{1}_{Y_{n+1}>q_n} - Q_n) \end{cases} \quad (2.7)$$

qui produisent de *bons* estimateurs de q et de Q . Dans cette thèse et comme dans la majorité de la littérature, nous considérons des pas de descente de gradient de la forme $\gamma_n = C_\gamma n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1]$. La théorie des algorithmes stochastiques de type Robbins-Monro permet de montrer que si l'on choisit bien les pas, ces deux algorithmes produisent des estimateurs qui sont fortement consistants et asymptotiquement normaux, comme nous le verrons dans les Chapitres 3 et 4. On pourra par ailleurs noter que lorsqu'on prend un pas $\gamma_n^Q = n^{-1}$, on obtient $Q_n = \bar{Z}_n$ pour $Z = Y\mathbf{1}_{Y>q}$, c'est à dire l'estimateur empirique de la moyenne. La loi forte des grands nombres et le théorème de la limite centrale classiques permettent donc de conclure directement quand au comportement asymptotique de cet estimateur.

Concernant le précédent estimateur du superquantile, il y a tout de même un problème. L'algorithme introduit précédemment nécessite la connaissance de la valeur du quantile q . Mais en pratique, lorsque l'on cherche à estimer le superquantile d'une loi inconnue, on ne connaît pas son quantile. Pour résoudre ce problème, on peut alors avoir l'idée (voir [8]) d'utiliser un double algorithme, qui permet d'estimer de manière simultanée le quantile par l'algorithme (2.6) et le superquantile par l'algorithme (2.7) dans lequel on remplacerait à chaque étape, q par son estimé q_n . Cela donne

$$\begin{cases} (q_0, Q_0) \in \mathbb{R}^2 \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1}^q (\mathbf{1}_{Y_{n+1}>q_n} - \alpha) \\ Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1}\mathbf{1}_{Y_{n+1}>q_n} - Q_n). \end{cases} \quad (2.8)$$

Cet algorithme est un double algorithme dans le sens où, à chaque étape $n+1$, connaissant seulement la tribu $\mathcal{F}_n := \sigma(Y_1, \dots, Y_n)$ et donc q_n et Q_n , lorsqu'on observe Y_{n+1} , on peut calculer de manière simultanée les nouveaux estimateurs q_{n+1} et Q_{n+1} . On peut en fait le voir comme un algorithme bi-dimensionnel en considérant le couple (q_n, Q_n) . En se référant à [8], nous proposerons, dans le Chapitre 4, une discussion sur le comportement asymptotique de cet algorithme. Nous verrons à cette occasion, comment le fait de remplacer q par son estimateur q_n impacte la précision de l'algorithme (2.8) par rapport à l'algorithme (2.7).

Grâce à ces outils et en considérant que Y est la sortie d'un code numérique, nous obtenons des estimateurs du quantile et du superquantile performants d'un point de vue asymptotique. Lorsqu'on se place sous l'hypothèse d'un code coûteux, nous avons déjà vu que nous cherchons des garanties non-asymptotiques sur le risque quadratique des estimateurs. La recherche de tels résultats est en plein essor. On peut en effet trouver plusieurs travaux traitant de résultats non-asymptotiques pour les algorithmes de type Robins-Monro (par exemple [72], [43], [91], [22], ...). Nous verrons cependant dans le Chapitre 3 qu'il n'existe pour le moment aucun papier ne donnant de résultats non-asymptotiques sous des hypothèses s'appliquant au cas du quantile. Nous proposerons alors une étude non-asymptotique complète dans le cas où la densité de Y est minorée par une constante strictement positive sur son support. Nous donnerons ensuite des pistes pour traiter du cas général. Nous mettrons alors en avant les difficultés techniques qui nous ont empêché de sortir du cadre compact.

Concernant l'estimateur du superquantile, nous n'avons trouvé aucune référence traitant de ce genre de double algorithme d'un point de vue non-asymptotique. Il est clair que le risque quadratique de Q_n dépend entièrement du comportement de q_n . Dans le Chapitre 4, nous proposerons alors une étude non-asymptotique du risque quadratique de Q_n dans le cas où nous connaissons bien le comportement de q_n c'est-à-dire dans le cas où Y a une densité minorée. Nous comparerons à nouveau les résultats avec le cas simple où q est connu pour bien comprendre ce que nous perdons en précision lorsque nous ne le connaissons pas.

Les Chapitre 3 et 4 de cette thèse sont consacrés à l'étude asymptotique et non-asymptotique d'algorithmes stochastiques pour estimer le quantile et le superquantile de la sortie d'un code numérique coûteux. On peut alors se demander comment procéder lorsque l'on souhaite estimer ces quantités d'intérêt pour la sortie d'un code stochastique. On rappelle que le but, dans ce contexte, est de trouver pour toute entrée x , un algorithme qui permette d'estimer le quantile ou le superquantile de la loi de $Y^x = g(x, \epsilon)$. Nous avons déjà vu précédemment qu'il est hors de question de construire un échantillon de Y^x pour tout x . Nous souhaitons donc construire un estimateur basé sur les algorithmes stochastiques de type Robbins-Monro mais qui utilise le même échantillon indépendant $(X_i, Y_i)_i$ de (X, Y) pour toute entrée x . Évidemment, pour que cela soit possible, il faut trouver un moyen de *localiser* les algorithmes, c'est-à-dire de faire en sorte que pour un x fixé, seuls les éléments (X_i, Y_i) qui auront un comportement *proche* de (x, Y^x) ne comptent réellement. Pour mettre cela en pratique, nous avons décidé d'une part de ne considérer que des codes *continus* c'est à dire tels que les réponses qu'ils fournissent à deux entrées proches ne peuvent être trop éloignées, (nous verrons dans le Chapitre 4 comment traduire cela proprement d'un point de vue mathématique) et d'autre part, nous avons voulu utiliser la théorie des k -plus proches voisins. L'algorithme que nous proposons pour l'estimation du quantile est alors

$$\begin{cases} q_0(x) \in \mathbb{R} \\ q_{n+1}(x) = q_n(x) - \gamma_{n+1}^q \left(\mathbf{1}_{Y_{n+1} > q_n(x)} - \alpha \right) \mathbf{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} \end{cases} \quad (2.9)$$

où $kNN_{n+1}(x)$ est l'ensemble des k_n ($k_n \in \mathbb{N}^*$) plus proches voisins de x parmi (X_1, \dots, X_{n+1})

pour la norme euclidienne. Il s'agit d'une adaptation de l'algorithme (2.6) dans laquelle on ne fait la mise à jour que lorsque la nouvelle entrée X_{n+1} est assez proche de x . En ajoutant cette notion de k -plus proches voisins pour gérer le côté stochastique du code, on fait apparaître un second paramètre à régler. En effet, dans l'algorithme (2.9), il faut choisir d'une part un bon pas de descente de gradient γ_n et d'autre part un bon nombre de voisins k_n . Nous étudierons des pas de descente de gradient de la forme $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1]$ et des nombres de voisins k_n de la forme $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ avec $\beta \in]0, 1]$. Dans le Chapitre 5 de cette thèse, nous proposerons des conditions sur ces deux paramètres pour que l'algorithme soit fortement consistant. Nous proposons de plus, sous certaines conditions (classiques pour la théorie des k -plus proches voisins) sur le modèle, une inégalité non asymptotique sur le risque quadratique de l'algorithme. Nous verrons que cette dernière nous permet d'exhiber les paramètres à fournir à l'algorithme pour que ce dernier converge en moyenne quadratique avec la plus grande vitesse. Pendant toute l'étude, nous tâcherons de bien mettre en avant l'erreur commise par la *localisation* pour bien comprendre ce qui change par rapport au cadre non-conditionnel. Tous nos résultats seront illustrés par des simulations numériques.

Pour terminer cette partie, nous proposons dans le Chapitre 6 de montrer la consistance forte et de faire l'étude non-asymptotique de l'algorithme

$$\left\{ \begin{array}{l} (q_0(x), Q_0(x)) \in \mathbb{R}^2 \\ q_{n+1}(x) = q_n(x) - \gamma_{n+1}^q \left(\mathbf{1}_{Y_{n+1} > q_n(x)} - \alpha \right) \mathbf{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^q(x)} \\ Q_{n+1}(x) = Q_n(x) + \gamma_{n+1}^Q \left(Y_{n+1} \mathbf{1}_{Y_{n+1} > q_n(x)} - Q_n(x) \right) \mathbf{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^Q(x)} \end{array} \right. \quad (2.10)$$

version conditionnelle de l'algorithme (2.8) pour estimer simultanément le quantile et le superquantile de la sortie d'un code stochastique. Pour faire tourner cet algorithme, il faut cette fois régler quatre paramètres : les deux pas de descente de gradient et les deux nombres de voisins. Une grande partie du Chapitre 6 est consacrée à une discussion sur le choix de ces paramètres. Encore une fois, nous tâcherons de bien séparer les termes d'erreur dûs à la localisation et les termes d'erreur dûs à l'approximation de q par q_n . Nous illustrerons à nouveau nos propos par des simulations numériques.

Chapter 3

Estimation de quantile dans les codes numériques

Dans ce chapitre, nous souhaitons estimer le quantile q de niveau fixé α de la sortie Y d'un code numérique par l'algorithme stochastique

$$\begin{cases} q_0 \in \mathbb{R} \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1} (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha). \end{cases} \quad (3.1)$$

où $(Y_i)_{i=1, \dots, n}$ est un échantillon indépendant de Y , $(\gamma_n)_n$ est une suite déterministe décroissante positive, appelée *pas de la descente de gradient*. Le but de ce chapitre est l'étude de cet algorithme en fonction du choix des pas (γ_n) . Pour cela, nous allons dans un premier temps, faire le point sur les résultats de la littérature concernant son comportement asymptotique. Nous verrons que ces premiers résultats montrent qu'il est plus intéressant de choisir des pas déterministes de l'ordre n^{-1} . En effet, avec ces pas et sous certaines conditions sur le modèle, l'algorithme (3.1) est normalement asymptotique à vitesse \sqrt{n} , qui est la vitesse optimale. Pour traiter des codes coûteux, nous proposerons dans un second temps, des pistes concernant l'étude non-asymptotique de cet algorithme. D'abord, nous verrons que les résultats généraux connus sur les algorithmes de type Robbins Monro ne peuvent s'appliquer à notre cas. Nous écrirons alors une inégalité non-asymptotique sur son risque quadratique dans le cas d'une loi Y à densité minorée par une constante $D > 0$, pour bien comprendre ce qu'il se passe. Ensuite, nous proposerons des pistes pour généraliser notre résultat. Nous verrons que cela comporte certaines difficultés techniques que nous n'avons, actuellement, pas réussi à lever.

3.1 Etude du comportement asymptotique de l'algorithme (3.1)

Dans la littérature, il est très souvent considéré des pas de la forme $\gamma_n = C_\gamma n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]0, 1]$ et $C_\gamma > 0$. Ce sera aussi le cas dans cette thèse. Dans cette partie nous cherchons donc des conditions sur les pas γ_n pour que l'algorithme ait un bon comportement asymptotique.

Pour commencer, les conditions de forte consistance de l'estimateur (3.1) sont résumées dans le théorème de Robbins-Monro suivant (voir par exemple Théorème 1.4.26 de [40]).

Théorème 3.1.1. *Si la densité de Y ne s'annule pas en q et si la suite de pas déterministes $(\gamma_n)_n$ vérifie*

$$\sum_{n \geq 0} \gamma_n = \infty \quad (3.2)$$

$$\sum_{n \geq 0} \gamma_n^2 < \infty \quad (3.3)$$

alors l'algorithme (3.1) converge presque sûrement vers q .

Pour avoir une preuve détaillée de ce théorème (dans le cas particulier du quantile), on pourra aussi se reporter à [14]. Pour bien comprendre le rôle de hypothèses, nous allons tout de même donner une heuristique de la preuve. Le schéma de cette preuve est très classique, il sera repris plusieurs fois dans cette deuxième partie.

1) Pour la filtration $\mathcal{F}_n := \sigma(Y_1, \dots, Y_n)$, et en posant

$$\begin{aligned} h(q_n) &= \mathbb{E}(\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha | \mathcal{F}_n) = F(q_n) - \alpha \\ \xi_{n+1} &= \mathbb{E}(\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha | \mathcal{F}_n) - h(q_n) = \mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - F(q_n), \end{aligned}$$

on construit la martingale

$$T_n = q_n - \sum_{j=1}^n \gamma_{j+1} h(q_j) = \sum_{j=1}^n \gamma_{j+1} \xi_{j+1}.$$

Comme l'incrément de martingale ξ_n est borné presque sûrement par 1, et grâce à l'hypothèse (3.2), la martingale T_n est bornée dans L^2 , donc converge presque-sûrement.

2) La convergence de (T_n) implique celle de (q_n) dès lors que l'on a montré que cette suite ne divergeait pas vers $+\infty$ ou $-\infty$. Cela est vrai grâce à l'hypothèse (3.3). En effet, pour fixer les idées, sous cette hypothèse, si les itérations de l'algorithme deviennent très grandes (en comparaison du quantile), il vérifiera pour un certain N_0 , $q_{N_0} \geq Y_{N_0+1}$. Ainsi, par définition, $q_{N_0+1} = Q_{N_0} - (1 - \alpha)\gamma_{N_0+1}$. L'algorithme reculera de cette manière avec des pas $(1 - \alpha)\gamma_i$ tant que $q_i \leq Y_i$ pour $i \geq N_0 + 1$. L'hypothèse (3.3) implique qu'il existe alors presque-sûrement un i pour lequel q_i aura assez reculer pour vérifier $q_i \leq Y_{i+1}$ et donc que l'algorithme ne peut diverger vers $+\infty$.

Concernant la normalité asymptotique, on peut noter deux comportements différents suivant les valeurs de γ . En fait, lorsque $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1[$, on peut montrer (voir par exemple le Théorème 13 de [11]) que l'algorithme produit un estimateur normalement asymptotique à vitesse $\sqrt{n^\gamma}$ (et ce quelque soit la valeur de la constante C_γ). Ainsi, plus on va prendre un γ proche de 1 et meilleure sera la vitesse de convergence. Il est alors naturel de chercher ce qu'il se passe lorsque $\gamma = 1$. Ce cas limite est assez particulier. On peut résumer les comportements asymptotiques associés à ce cas dans le théorème suivant (voir Théorème 2.2.12 de [40]).

Théorème 3.1.2. *Supposons que la densité f de la loi de Y soit de classe \mathcal{C}^1 et que $f(q) > 0$, alors pour des pas de la forme $\gamma_n = n^{-1}$, l'algorithme (3.1) vérifie un des comportements asymptotiques suivants*

1) Si $f(q) > \frac{1}{2}$, alors

$$\sqrt{n}(q_n - q) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}\left(0, \frac{\alpha(1 - \alpha)}{2f(q) - 1}\right).$$

2) Si $f(q) = \frac{1}{2}$,

$$\sqrt{\frac{n}{\ln(n)}}(q_n - q) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \alpha(1 - \alpha)).$$

3) Si $f(q) < \frac{1}{2}$,

$$n^{f(q)} (q_n - q) \xrightarrow{p.s.} Z,$$

où Z est une variable aléatoire.

On remarque alors que le cas des pas $\gamma_n = n^{-1}$ est bien différent des autres. Dans cette thèse, nous n'entrerons pas dans les détails de la preuve de ces théorèmes. L'idée est cependant la même que pour la convergence presque-sûre ; il faut faire apparaître une martingale et utiliser les théorèmes de convergence relatifs aux martingales pour conclure, en re-normalisant correctement. Les difficultés sont donc d'ordre technique. Néanmoins, il est important de comprendre ce qui change entre le cas $\gamma < 1$ et le cas $\gamma = 1$. Tout repose sur le fait que, lorsque $\gamma < 1$, la somme partielle de la série de γ_n reste de l'ordre d'une puissance de n . En revanche, pour le cas $\gamma = 1$, la somme est de l'ordre de $\ln(n)$. Cela modifie beaucoup de choses dans les calculs et change complètement les résultats, comme nous pouvons le voir dans le précédent théorème. Nous reviendrons plus en détail sur cette différence lorsque nous établirons des inégalités non-asymptotiques pour cet algorithme.

Lorsque $f(q) > 1/2$, la comparaison des résultats montre qu'il est plus intéressant de choisir des pas $\gamma_n = n^{-1}$. En effet, dans ce cas, les vitesses sont en $n^{\gamma/2}$ pour tout choix de $\gamma \in]1/2, 1]$. Nous atteignons donc la vitesse optimale en \sqrt{n} pour le pas $\gamma_n = n^{-1}$. Lorsque $f(q) = 1/2$, c'est toujours le cas $\gamma = 1$ le plus intéressant mais l'écart de vitesse se réduit. Enfin, le cas $f(q) > 1/2$ est un peu à part. Lorsque $\gamma = 1$, nous avons une convergence presque-sûre qui est donc plus forte que la convergence en loi obtenue dans l'autre cas. Mais la limite est inconnue et la vitesse est plus lente. L'idéal est donc de se retrouver dans le premier cas et de faire tourner l'algorithme avec des pas en $\gamma_n = n^{-1}$. Malheureusement, si on souhaite estimer un quantile extrême (α est plutôt proche de 1), on risque fortement de se retrouver dans le troisième cas. Il faut donc trouver un moyen de modifier l'algorithme pour basculer systématiquement dans le premier cas. C'est en fait le rôle de la constante C_γ qui est considérée égale à 1 dans le Théorème 3.1.2. En effet, si on prend une constante $C_\gamma \neq 1$, alors notre algorithme devient

$$q_{n+1} = q_n - \frac{C_\gamma}{n+1} (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \geq q_n} - \alpha) = q_n - \frac{1}{n+1} (C_\gamma \mathbf{1}_{Y_{n+1} \geq q_n} - C_\gamma \alpha).$$

Comme le quantile est aussi le zéro de la fonction $h : t \mapsto C_\gamma F_Y(t) - C_\gamma \alpha$, on ne change pas de cible. En revanche, si on applique la précédente étude théorique à ce nouvel algorithme, on doit cette fois distinguer les cas suivant la valeur de $h'(q) = C_\gamma f(q)$ par rapport à $1/2$. Ainsi, on prenant par exemple $C_\gamma = 1/f(q)$, on est toujours dans le premier cas du théorème précédent. Cette solution théorique est cependant problématique en pratique puisque pour connaître la valeur intéressante de C_γ , il faut connaître $f(q)$. Souvent, pour résoudre ce problème, on commence par faire une première approximation grossière de $f(q)$ (par estimation empirique par exemple) avant de lancer l'algorithme avec de bons paramètres de descente de gradient. Ce n'est évidemment pas une solution miracle mais elle fonctionne assez bien.

Remarque 3.1.3. *Il est tout de même important de souligner, à ce stade, que la précédente solution ne satisfait pas vraiment la communauté statisticienne. Ainsi, pour éviter ce problème de paramétrage de constante, Polyak et al. proposent dans [78], un algorithme modifié. Cet algorithme construit la suite (q_n) de la même manière que dans notre cas, mais considère plutôt l'estimateur (\bar{q}_n) défini par récurrence de la manière suivante*

$$\begin{cases} \bar{q}_0 = q_0 \\ \bar{q}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} q_k. \end{cases} \quad (3.4)$$

On comprend aisément pourquoi ce nouvel algorithme porte le nom d'algorithme stochastique moyenné. Lorsque (q_n) est construite avec des pas $\gamma_n = C_\gamma n^{-\gamma}$ pour n'importe quelle constante $C > 0$ et pour tout $0 < \gamma < 1$, on peut montrer (voir [78]) que l'algorithme est fortement consistant. Mieux encore, il est normalement asymptotique à vitesse \sqrt{n} . Cet algorithme est donc très puissant puisqu'il atteint la vitesse optimale de l'algorithme (3.1) pour n'importe quel choix de constante et de pas (du moment que $\gamma < 1$). On trouve de plus en plus de travaux sur cet algorithme (voir par exemple [78, 68] pour le comportement asymptotique, et [72, 23] et leur références pour l'étude non-asymptotique). Cependant, dans cette thèse, nous ne nous attarderons pas plus sur cet algorithme moyenné. C'est plutôt la difficulté créée par la singularité en $\gamma = 1$ dans l'algorithme (3.1) qui nous intéresse.

En conclusion, l'étude asymptotique de l'algorithme (3.1) montre qu'il est plus intéressant, en théorie, de choisir des pas de la forme $\gamma_n = C_\gamma n^{-1}$ avec une constante $C_\gamma > 1/2f(q)$. Il est cependant difficile en pratique de calibrer cette constante donc la valeur optimale dépend du paramètre d'intérêt. L'importance de cette constante dans le cas où $\gamma = 1$ est un point central de ce chapitre. Nous en profitons pour rappeler que lorsque les pas sont choisis avec $\gamma < 1$, la constante C_γ n'a aucune influence sur le comportement de l'algorithme. Nous reparlerons de cette constante lorsque nous discuterons du comportement non-asymptotique.

3.2 Etude du comportement non-asymptotique de l'algorithme (3.1)

Dans cette section, nous souhaitons étudier le comportement non-asymptotique de l'algorithme (3.1). Notre but est donc d'écrire une inégalité sur son risque quadratique qui soit vraie pour tout n .

3.2.1 Quelques simulations

Suite à la partie précédente, nous pensons que la vitesse optimale en \sqrt{n} est atteinte pour des pas $\gamma_n = (f(q)n)^{-1}$. Comme la convergence en moyenne quadratique est plus forte que la convergence en loi, et que nous cherchons en plus des résultats non-asymptotiques, il s'agit seulement d'une conjecture. Pour commencer, nous avons effectué plusieurs simulations pour voir si notre conjecture se vérifiait sur des données simulées. Les figures 3.1 présentent une partie de ces simulations. Nous avons fait tourner l'algorithme avec Y suivant une loi exponentielle de paramètre 1 et des pas de la forme $(f(q)n)^{-\gamma}$ pour $\gamma = 0.55$, $\gamma = 0.75$ et $\gamma = 1$. Par méthode Monte Carlo (de précision 500), nous avons estimé la moyenne quadratique de l'algorithme pour des pas n allant de 1 à 100. La première figure montre la convergence vers 0 de ce risque quadratique (la moyenne est tracée en fonction du numéro de l'étape). La seconde représente la même chose mais en échelle logarithmique. Dans tous les cas, on constate bien la convergence en moyenne quadratique de l'algorithme. Mais, en particulier, on peut observer que la vitesse de convergence est meilleure lorsque l'on prend un pas avec $\gamma = 1$ (attention, ce n'est pas la même échelle).

Les simulations que nous avons faites semblent confirmer ce que nous pensions : la meilleure vitesse serait bien atteinte pour le pas le plus grand, c'est-à-dire de l'ordre de n^{-1} .

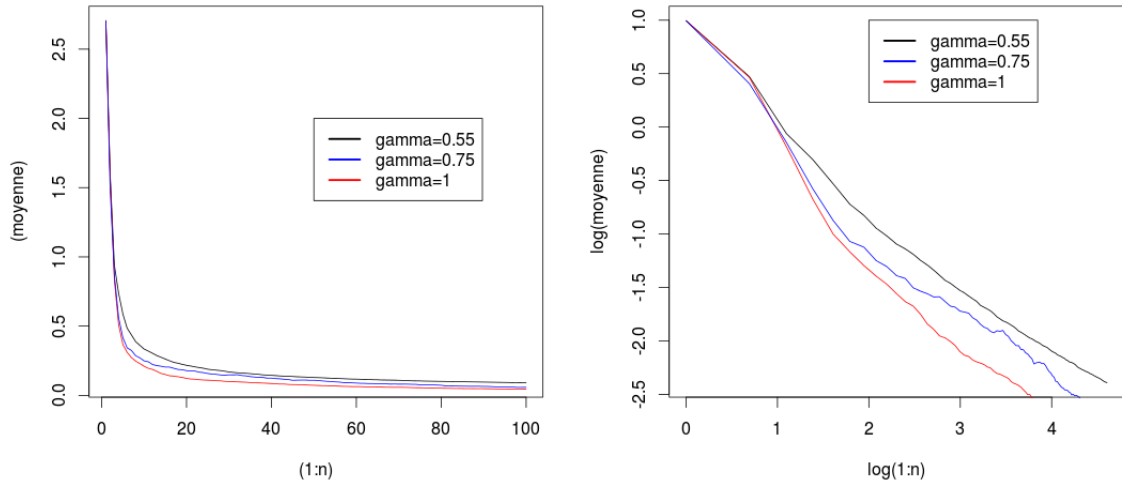


Figure 3.1: Convergence en moyenne quadratique

Nous allons maintenant faire un rapide état de l'art pour montrer que les travaux concernant les résultats non-asymptotiques sur les algorithmes de type Robins-Monro ne peuvent pas s'appliquer à l'algorithme (3.1).

3.2.2 Etat de l'art

De nombreux travaux concernant l'étude non-asymptotique des algorithmes de type Robbins-Monro sont disponibles dans la littérature (on peut citer par exemple [43, 91, 72, 17, 22, 51], ...). Cependant, lorsque l'on cherche à les appliquer à l'algorithme (3.1), il y a toujours une hypothèse mise en défaut. C'est le cas par exemple pour les travaux de Moulines et al. dans [72] et de Cardot et al. dans [22] qui sont très représentatifs du problème et que nous allons maintenant développer. Pour commencer, Moulines et al. étudient des algorithmes de Robbins-Monro sous hypothèse de forte convexité. Ils considèrent un algorithme stochastique non pas à valeurs dans \mathbb{R} mais dans un espace de Hilbert général \mathcal{H} . Ils étudient alors les algorithmes de la forme

$$\begin{cases} \theta_0 \in \mathcal{H} \\ \theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} f'_{n+1}(\theta_n), \end{cases} \quad (3.5)$$

visant à estimer θ^* , où f'_n est la différentielle d'une fonction $f_n : \mathcal{H} \mapsto \mathbb{R}$. Pour étudier le comportement de cet algorithme, les auteurs supposent que la fonction f_n est presque sûrement convexe, différentiable et qu'il existe une constante L telle que pour tout $n \geq 1$ et pour tout $(\theta_1, \theta_2) \in \mathcal{H}$,

$$\|f'_n(\theta_1) - f'_n(\theta_2)\| \leq L \|\theta_1 - \theta_2\|.$$

Cette hypothèse permet, et c'est le point crucial qui fait tout fonctionner, d'obtenir l'inégalité $\forall n \geq 1$,

$$\langle \theta_n - \theta^*, \mathbb{E}_n (f'_{n+1}(\theta_n)) \rangle \geq L \|\theta_n - \theta^*\|^2. \quad (3.6)$$

Le problème, c'est que même si on étendait la notion de différentiabilité à celle de la dérivation au sens des distributions, on aurait dans notre cas,

$$f'_n(\theta) = \alpha - \mathbf{1}_{Y \leq \theta},$$

et donc

$$f_n(\theta) = (Y - \theta)(\alpha - 1)\mathbf{1}_{Y \leq \theta} + (Y - \theta)\alpha\mathbf{1}_{Y > \theta}.$$

Cette fonction est convexe presque partout mais en revanche la condition de lipschitzienité sur la dérivée f'_n n'est pas vérifiée. Cela nous empêche donc d'utiliser ces résultats pour conclure à notre problème.

On notera dès à présent que l'équivalent, dans notre contexte de l'Equation (3.6) serait : il existe une constante $D > 0$ telle que pour tout n ,

$$(F_Y(q_n) - F_Y(q))(q_n - q) \geq L\|q_n - q\|^2. \quad (3.7)$$

Le second article que nous souhaitons mentionner est [22] de Cardot et al. Les auteurs y proposent d'estimer la médiane géométrique d'une variable aléatoire Y à valeurs dans un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} . C'est à dire le nombre m tel que

$$m = \operatorname{argmin}_{h \in \mathcal{H}} \mathbb{E}(\|Y - h\| - \|Y\|).$$

Pour cela, ils utilisent le même algorithme stochastique que nous, mais dans un espace de Hilbert, à savoir

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} \frac{Y_{n+1} - \theta_n}{\|Y_{n+1} - \theta_n\|},$$

où en revanche, les pas γ_n sont toujours construits avec $\gamma < 1/2$. La différence fondamentale avec notre problème, c'est qu'ils travaillent avec l'hypothèse suivante : la variable aléatoire Y n'est pas concentrée sur une droite. Cette hypothèse (dimension strictement supérieure à 1) leur permet de considérer l'orthogonal de l'espace des valeurs possibles de Y . Ainsi, grâce à des raisonnements hilbertiens (projection, théorème de Pythagore, ...) ils obtiennent l'inégalité suivante (voir Proposition 2.1 de [23]) : pour toute boule centrée en la cible et de rayon $A > 0$, il existe une constante $C_A > 0$, telle que pour tout z dans cette boule et pour tout élément k du Hilbert \mathcal{H} ,

$$\langle k, H_z k \rangle \geq C_A \|k\|^2. \quad (3.8)$$

où H est la Hessienne de la fonctionnelle G telle que

$$\Delta_z G = \mathbb{E} \left(\frac{Y - z}{\|Y - z\|} \right).$$

Cela leur permet d'obtenir l'équivalent de l'inégalité cruciale (3.7) sur toute boule autour de la cible. Évidemment, puisque nous cherchons à estimer le quantile au sens classique, nous travaillons avec une variable aléatoire réelle Y et nous n'entrons donc pas dans les hypothèses de ce papier.

Les références précédentes ne nous permettent donc pas de résoudre directement notre problème. En revanche, elles permettent de mettre en avant le besoin d'une inégalité de la forme de (3.7). Dans la suite de cette partie, nous allons expliquer plus en détails le rôle de cette inégalité et pourquoi il est très difficile de s'en passer. Pour cela, nous allons

dans un premier temps étudier le cas simple où la densité de Y est minorée par une constante strictement positive. Nous verrons que dans ce cas, l'inégalité précédente est vraie et pourrons donc bien voir comment elle permet de conclure rapidement. Nous essayerons ensuite de traiter le cas général, celui où une telle inégalité n'est plus vraie.

Il paraît important de mentionner que même si les références précédemment citées ne peuvent s'appliquer directement à notre cadre, il est clair que les idées et les techniques qui y figurent ont largement inspiré les travaux que nous allons présenter par la suite.

3.2.3 Le cas d'une loi à densité minorée

Dans cette partie et dans la suivante, nous allons considérer des constantes de pas $C_\gamma = 1$. Dans le cas où $\gamma = 1$, nous devrions donc voir apparaître une distinction de cas en fonction de la valeur de $f(q)$ par rapport à $1/2$. On se place sous l'hypothèse

Hypothèse H1 : La variable aléatoire Y est à densité minorée par une constante $D > 0$.

Cette section est importante parce que c'est l'étude de ce cas particulier qui permet de comprendre toute la suite. Pour cette étude, nous allons adopter un plan de raisonnement qui sera réutilisé plusieurs fois. Nous allons donc détailler toutes les étapes et mettre en avant les points importants. Ces étapes sont au nombre de trois : on commence par écrire une inégalité de récurrence sur a_n , on en déduit ensuite une inégalité exprimant a_n en fonction de a_0 et n , puis nous terminons par rechercher les ordres en n des différents termes. Sous l'hypothèse **H1**, il est direct que tout $n \geq 1$,

$$(q_n - q)(F(q_n) - F(q)) \geq D(q_n - q)^2. \quad (3.9)$$

Nous sommes donc dans un cas où l'inégalité que nous avons vu apparaître dans les références ci-dessus est vraie.

Etape 1 : Equation de récurrence sur a_n

L'idée principale de cette première étape est la recherche d'une formule de récurrence sur le risque quadratique a_n de la forme $\forall n \geq 1$,

$$a_{n+1} \leq a_n(1 - c_{n+1}) + d_{n+1}, \quad (3.10)$$

avec pour tout $n \geq 0$, $0 < c_n < 1$ et $d_n > 0$. Dans notre cas précis, nous allons montrer que

Théorème 3.2.1. *Sous l'hypothèse (3.9), le risque quadratique de l'algorithme (3.1) vérifie l'inégalité suivante pour tout $n \geq 0$.*

$$a_{n+1} \leq (1 - 2D\gamma_{n+1})a_n + \gamma_{n+1}^2. \quad (3.11)$$

Proof. On commence par développer le carré suivant

$$\begin{aligned} (q_{n+1} - q)^2 &= (q_n - q - \gamma_{n+1}(\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha))^2 \\ &= (q_n - q)^2 + \gamma_{n+1}^2(\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha)^2 - 2\gamma_{n+1}(q_n - q)(\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \\ &= (q_n - q)^2 + \gamma_{n+1}^2[(1 - 2\alpha)\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} + \alpha^2] - 2\gamma_{n+1}(q_n - q)[\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha]. \end{aligned}$$

En notant $\mathcal{F}_n := \sigma(Y_1, \dots, Y_n)$ la tribu du passé, on peut alors prendre l'espérance conditionnelle sachant \mathcal{F}_n de l'inégalité précédente. Dans la suite, nous noterons \mathbb{E}_n cette espérance conditionnelle et F la fonction de répartition de Y . Il vient

$$\mathbb{E}_n \left[(q_{n+1} - q)^2 \right] = (q_n - q)^2 + \gamma_{n+1}^2 [(1 - 2\alpha)F(q_n) + \alpha^2] - 2\gamma_{n+1}(q_n - q)[F(q_n) - F(q)].$$

Dès lors, on comprend bien pourquoi il est nécessaire d'avoir une hypothèse permettant une équation de la forme (3.9). En effet, pour avoir une chance de retomber sur une inégalité de la forme de (3.11), il nous faut être capable de minorer le terme du double produit. Grâce à notre hypothèse, nous obtenons donc

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left[(q_{n+1} - q)^2 \right] &\leq (q_n - q)^2 + \gamma_{n+1}^2 - 2D\gamma_{n+1}(q_n - q)^2 \\ &\leq (1 - 2D\gamma_{n+1})(q_n - q)^2 + \gamma_{n+1}^2. \end{aligned}$$

En prenant l'espérance, nous obtenons

$$a_{n+1} \leq (1 - 2D\gamma_{n+1})a_n + \gamma_{n+1}^2.$$

□

Etape 2 : Majoration de a_n en fonction de n

On déduit ensuite du résultat précédent, une majoration de a_n qui ne dépend que de n et de a_0 .

Corollaire 3.2.2. *Sous l'hypothèse **H1**, le risque quadratique de l'algorithme (3.1) vérifie l'inégalité non-asymptotique suivante. Pour tout $n \geq 1$,*

$$a_n \leq \exp(-2D\Gamma_n)a_0 + \sum_{k=1}^n \exp(-2D(\Gamma_n - \Gamma_k))\gamma_k^2,$$

$$\text{où } \Gamma_n = \sum_{k=1}^n \gamma_k.$$

Proof. C'est une simple récurrence utilisant le fait que $\forall x \in \mathbb{R}, \exp(x) \geq 1 + x$. □

Etape 3 : Etude des ordres en n des différents termes

Le corollaire précédent a permis de majorer a_n par deux termes qui dépendent de n . On va donc les majorer à leur tours pour trouver leur ordre en n .

Corollaire 3.2.3. *Sous l'hypothèse (3.9), le risque quadratique de l'algorithme (3.1) vérifie les inégalités non-asymptotiques suivantes.*

Dans le cas où $\gamma_n = \frac{1}{n}$, pour tout $n \geq 1$, on a

$$a_n \leq \begin{cases} n^{-2D}a_0 + \frac{4}{(2D-1)n} + \frac{1}{n^2} & \text{si } D > \frac{1}{2} \\ (a_0 + 4C_1)n^{-2D} + \frac{1}{n^2} & \text{si } D < \frac{1}{2} \\ \frac{a_0}{n} + \frac{4 \ln(n)}{n} + \frac{1}{n^2} & \text{si } D = \frac{1}{2}, \end{cases}$$

où

$$C_1 = \sum_{k=1}^{\infty} k^{2D-2}. \quad (3.12)$$

Dans le cas où $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1[$, pour tout $n \geq \max(n_1, 3)$ on a

$$a_n \leq \frac{2^{2\gamma-1}}{Dn^\gamma} + \exp\left(-Dn^{-\gamma+1}\right) C_2 \frac{(n+1)^{-2\gamma+1}}{-2\gamma+1} + \exp\left(-2D \frac{n^{-\gamma+1}}{-\gamma+1}\right) a_0,$$

avec

$$C_2 = \sum_{k=2}^{\infty} k^{-2\gamma}, \quad (3.13)$$

et où n_1 est un rangs déterministe explicitement connu (nous verrons sa définition exacte dans la preuve).

Remarque 3.2.4. Les théorème 3.2.1 et Corollaire 3.2.2 sont des vrais théorèmes non-asymptotiques, dans la mesure où ils présentent une inégalité vraie pour tout $n \geq 1$. Le théorème 3.1.2, dans le second cas, donne une inégalité qui est vraie à partir d'un certain rang. Même si ce rang est déterministe et explicitement connu, nous n'avons plus totalement affaire ici à un résultat non-asymptotique. Mais ce résultat est tout de même intéressant puisqu'il nous donne l'ordre en n de chacun des termes. C'est ce genre de raisonnement qui permettra dans les chapitres suivants, de trouver les paramètres optimaux pour les différents algorithmes étudiés.

Avant de faire la preuve de ce corollaire, nous pouvons le comparer aux résultats asymptotiques du Théorème 3.1.2. Concernant les pas en $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1[$, le terme dominant lorsque n tend vers l'infini sera de l'ordre de $n^{-\gamma}$, ce qui correspond bien au comportement asymptotique en loi. Concernant les pas qui nous intéressent le plus (ceux en $\gamma_n = n^{-1}$), on peut remarquer que les résultats sont aussi très cohérents avec ceux du Théorème 3.1.2. On retrouve bien les trois différents cas suivant la valeur de la densité en le point quantile. En effet, lorsque q_n est proche de q , on peut penser à la constante D comme la densité f en le quantile puisque

$$h(q_n) = |F(q_n) - F(q)| \sim f(q)|q_n - q|.$$

Nous retrouvons donc l'importance de la valeur de $f(q)$ par rapport à $\frac{1}{2}$ que nous avons dans le Théorème 3.1.2. En effet, on notant $\sigma^2 = \frac{\alpha(1-\alpha)}{2f(q)-1}$ et $\sigma'^2 = \alpha(1-\alpha)$.

1) Lorsque $f(q) > \frac{1}{2}$, asymptotiquement en loi, nous avons

$$q_n \sim q + \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Notre résultat nous donne parallèlement que si $D > \frac{1}{2}$, alors

$$\mathbb{E} \left[(q_n - q)^2 \right] \sim C_{ste} \frac{1}{n}.$$

2) Lorsque $f(q) = \frac{1}{2}$, asymptotiquement et lois, nous avons

$$q_n \sim q + \sigma' \sqrt{\frac{\log(n)}{n}} \mathcal{N}(0, 1).$$

Notre résultat nous donne parallèlement que si $D = \frac{1}{2}$, alors

$$\mathbb{E} \left[(q_n - q)^2 \right] \sim C_{ste} \frac{\log(n)}{n}.$$

3) Lorsque $f(q) < \frac{1}{2}$, asymptotiquement en loi, nous avons

$$q_n \sim q + \frac{\sigma}{nf(q)}Z.$$

Notre résultat nous donne parallèlement que si $D < \frac{1}{2}$, alors

$$\mathbb{E} \left[(q_n - q)^2 \right] \sim C_{ste} \frac{1}{n^{2D}}.$$

Les ordres sont donc bien ceux que nous avons conjecturés. On peut noter que les constantes sont en revanche différentes. Cela est dû au fait que nous ne considérons pas le même type de convergence, mais aussi au fait que notre méthode récursive fait perdre une petite précision, puisque nous manipulons des inégalités (notamment lorsqu'on applique l'hypothèse **H1** ou quand on utilise dans l'étape suivante que $\exp(x) \geq 1 + x$).

Voyons maintenant comment prouver le Corollaire 3.2.3.

Proof. Toute cette preuve repose sur les inégalités suivantes que nous obtenons par comparaison série-intégrale.

Lemma 3.2.5. 1) Pour tout $n \geq 1$,

$$\ln(n+1) \leq 1 - \ln(2) + \ln(n+1) \leq \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \leq \ln(n) + 1.$$

2) Pour tout $k \geq 1$ et $n \geq k+1$,

$$\ln\left(\frac{n+1}{k+1}\right) \leq \sum_{j=k+1}^n \frac{1}{j} \leq \ln\left(\frac{k}{n}\right).$$

3) Pour tout $a < -1$, pour tout $n \geq 1$,

$$\frac{(n+1)^{a+1} - 2^{a+1}}{a+1} + 1 \leq \sum_{k=1}^n k^a \leq \frac{n^{a+1} - 1}{a+1} + 1$$

4) Pour tout $a < -1$, pour tout $k \geq 1$ et pour tout $n \geq k+1$,

$$\frac{n^{a+1} - (k+1)^{a+1}}{a+1} \leq \sum_{j=k+1}^n j^a \leq \frac{n^{a+1} - k^{a+1}}{a+1}.$$

5) Pour toute constante $C > 0$ et pour tout $0 < a < 1$, pour tout $k \geq a/C$ et pour tout $n \geq k+1$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{C} \left(\exp\left(C \frac{(k+1)^{1-a}}{1-a}\right) - \exp\left(C \frac{(n+1)^{1-a}}{1-a}\right) \right) &\leq \sum_{j=k+1}^n \exp\left(C \frac{j^{1-a}}{1-a}\right) j^{-a} \\ &\leq \frac{1}{C} \left(\exp\left(C \frac{k^{1-a}}{1-a}\right) - \exp\left(C \frac{n^{1-a}}{1-a}\right) \right). \end{aligned}$$

Commençons par le cas $\gamma_n = \frac{1}{n}$. Le premier item du Lemme 3.2.5 permet, lorsqu'on l'injecte dans le Corollaire 3.2.2, de dire que si $D > 1/2$,

$$\begin{aligned}
 a_n &\leq \exp(-2D \ln(n+1))a_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \exp\left(-2D \ln\left(\frac{n+1}{k+1}\right)\right) \frac{1}{k^2} + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq (n+1)^{-2D}a_0 + \sum_{k=1}^n \left(\frac{n+1}{k+1}\right)^{-2D} \frac{1}{k^2} + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}a_0 + \frac{1}{(n+1)^{2D}} \sum_{k=2}^n (k+1)^{2D-2} \left(\frac{k+1}{k}\right)^2 + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}a_0 + \frac{4}{(n+1)^{2D}} \frac{n^{2D-1} - 2^{2D-1}}{2D-1} + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}a_0 + \frac{4}{(2D-1)n} + \frac{1}{n^2}.
 \end{aligned}$$

où l'on a utilisé que $\forall k \geq 1, (k+1/k)^2 \leq 4$. On notera d'ailleurs que nous sommes ici obligés de mettre cette constante 4 uniquement pour le terme $k=1$.

Par ailleurs, si $D < \frac{1}{2}$,

$$\begin{aligned}
 a_n &\leq \exp(-2D \ln(n+1))a_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \exp\left(-2D \ln\left(\frac{n+1}{k+1}\right)\right) \frac{1}{k^2} + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq (n+1)^{-2D}a_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{n+1}{k+1}\right)^{-2D} \frac{1}{k^2} + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}a_0 + \frac{1}{(n+1)^{2D}} \sum_{k=1}^{n-1} (k+1)^{2D-2} \left(\frac{k+1}{k}\right)^2 + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}a_0 + 4n^{2D}C_1 + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq n^{-2D}(a_0 + 4C_1) + \frac{1}{n^2}.
 \end{aligned}$$

Enfin si $D = \frac{1}{2}$,

$$\begin{aligned}
 a_n &\leq n^{-1}a_0 + \frac{4}{(n+1)} \sum_{k=1}^{n-1} (k+1)^{-1} + \frac{1}{n^2} \\
 &= \frac{1}{n}a_0 + \frac{4}{n} (\ln(n) - \ln(2)) + \frac{1}{n^2} \\
 &\leq \frac{a_0}{n} + \frac{4 \ln(n)}{n} + \frac{1}{n^2}.
 \end{aligned}$$

Les calculs se font de la même manière dans le cas où on choisit des pas de la forme $\gamma_n = \frac{1}{n^\gamma}$ avec $\gamma > \frac{1}{2}$. Ils sont un peu plus techniques mais il est important de les comprendre dans ce cas facile, parce qu'ils nous resserviront dans le Chapitre 5. Le Corollaire 3.2.2 et le Lemme 3.2.5 donnent dans ce cas, pour tout $n \geq 3$,

$$\begin{aligned}
 a_n &\leq \exp\left(-2D\frac{(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) a_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \frac{1}{k^{2\gamma}} + \frac{1}{n^{2\gamma}} \\
 &\leq \exp\left(-2D\frac{n^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) a_0 + \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \frac{1}{k^{2\gamma}} \\
 &\quad + \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \frac{1}{k^{2\gamma}} + \frac{1}{n^{2\gamma}}.
 \end{aligned}$$

L'hypothèse $n \geq 3$ a permis de découper la somme en deux. On notera que la *difficulté technique* réside maintenant dans le fait que la fonction $x \mapsto \exp\left(2D\frac{x^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) x^{-\gamma}$ n'est croissante que sur $[\frac{\gamma}{2D}, +\infty[$. Pour utiliser les raisonnements sur les comparaisons séries-intégrales, il faut donc être loin de 0, c'est pourquoi nous sommes obligés de séparer la précédente somme en deux. Nous aurons besoin de cela pour traiter la deuxième somme. Concernant la première, nous savons que $\forall j \in [k+1, n]$, on a $\gamma_j \geq \gamma_n$. De plus, $\forall k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, $n - k \geq \frac{n}{2}$. Ainsi,

$$\exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \leq \exp(-2D\gamma_n(n-k)) \leq \exp\left(-2D\gamma_n\frac{n}{2}\right),$$

et donc

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \frac{1}{(k+1)^{2\gamma}} &\leq \exp(-Dn^{1-\gamma}) \sum_{k=1}^n k^{-2\gamma} \\
 &\leq \exp(-Dn^{1-\gamma}) C_2
 \end{aligned}$$

Pour gérer la deuxième somme, nous allons avoir besoin de définir le rang n_1 du théorème. Soit n_1 le rang tel que

$$\forall n \geq n_1, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2D}{\gamma}.$$

Pour tout $n \geq \max(3, n_2)$ on obtient donc les inégalités suivantes. D'abord, d'après le Lemme 3.2.5,

$$\begin{aligned}
 &\sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \gamma_k^2 \\
 &\leq \exp\left(-2D\left(\frac{(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right)\right) \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(2D\frac{(k+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) k^{-2\gamma}.
 \end{aligned}$$

Mais puisque pour $k \geq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1$, $k^{-\gamma} \leq (2/n)^{-\gamma}$, on obtient

$$\begin{aligned}
 &\sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2D\sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \gamma_k^2 \\
 &\leq \left(-2D\left(\frac{(n+1)^{1-\gamma}}{-\gamma}\right)\right) \frac{2^\gamma}{n^\gamma} \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(2D\frac{(k+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) k^{-\gamma}.
 \end{aligned}$$

Comme de plus $\forall k \geq 1, k^{-\gamma} \leq 2^\gamma(k+1)^{-\gamma}$,

$$\begin{aligned} & \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2D \sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \gamma_k^2 \\ & \leq \exp\left(-\frac{2D(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) \left(\frac{2}{n}\right)^\gamma 2^\gamma \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(2D \frac{(k+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) (k+1)^{-\gamma}. \end{aligned}$$

Et enfin, comme $n \geq n_1$,

$$\begin{aligned} & \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2D \sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \gamma_k^2 \\ & \leq \frac{2^{2\gamma-1}}{Dn^\gamma} \exp\left(-2D \left(\frac{(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right)\right) \left[\exp\left(2D \frac{n^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) - \exp\left(2D \frac{(\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 2)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) \right] \\ & \leq \frac{2^{2\gamma} - 1}{Dn^\gamma} \exp\left(\frac{-2D}{1-\gamma} \left((n+1)^{1-\gamma} - n^{1-\gamma}\right)\right) \\ & \leq \frac{2^{2\gamma-1}}{Dn^\gamma}. \end{aligned}$$

□

Bilan

Le raisonnement en trois étapes précédent est important parce qu'il montre bien ce qu'il se passe. Pour étudier un tel algorithme stochastique, il y a deux types de *difficultés* mais qui ne sont pas du tout de même nature. D'abord, et c'est en réalité le plus difficile, il faut écrire une inégalité de récurrence de la forme

$$a_{n+1} \leq (1 - E\gamma_{n+1}) a_n + \gamma_{n+1}^2, \quad (3.14)$$

où E est une constante positive. C'est à partir de cette équation que l'étude non-asymptotique est possible. En effet, les deux étapes suivantes du raisonnement ne sont pas difficiles théoriquement ; elles ne sont constituées que de calculs et de points techniques. Certes, ces calculs ne sont pas toujours aisés à mener (notamment dans le cas des pas $\gamma_n = n^{-1}$ puisque que, comme nous l'avons déjà remarqué, la somme des pas n'est plus une puissance de n), mais la plus grosse difficulté réside en réalité dans l'établissement de l'inégalité (3.14).

Concernant cette équation, il y a une chose vraiment cruciale à remarquer, c'est le rôle de la constante E . Si on reprend les calculs précédents, on se rend compte que dans le cas où les pas γ_n sont construits avec $\gamma < 1$, la constante E n'a aucune influence. Ainsi, il sera plus facile de traiter ces cas-là, puisque qu'on pourra s'autoriser n'importe quelle constante (et donc faire des majorations plus grossières). En revanche, c'est cette constante E qui détermine entièrement le comportement de l'algorithme lorsque l'on prend des pas construits avec $\gamma = 1$. Plus exactement, c'est la comparaison de la valeur de E par rapport à 1 qui permet de conclure (et cette différence s'explique toujours par le fait qu'il y a une discontinuité entre les ordres des deux sommes partielles. On comprend donc que l'étude de l'algorithme pour des pas en $\gamma_n = n^{-1}$ est plus difficile parce qu'elle demandera des majorations plus fines, pour obtenir la bonne constante E . Ce problème est bien entendu le même que celui du calibrage de la constante C_γ que nous avons supposée ici égale à 1.

3.2.4 Pistes pour un résultat général

Dans la section précédente, nous avons donc présenté un type général de raisonnement pour établir des inégalités non-asymptotiques sur le risque quadratique d'un tel algorithme. Dans cette partie, nous allons donner quelques pistes pour appliquer ce raisonnement au cas général. Nous montrerons alors quelles sont les difficultés qui se posent et en donnerons les raisons.

Deux comportements de l'algorithme

Puisque nous sommes dans un cas général, nous n'avons plus l'hypothèse de minoration de la densité de la loi de Y . Ainsi, nous ne pouvons plus avoir d'expression du type

$$(q_n - q)(F(q_n) - F(q)) \geq D(q_n - q)^2. \quad (3.15)$$

Or, c'est exactement cette expression qui nous permettait d'obtenir le terme le plus important (celui en $E\gamma_n$ dans l'équation (3.15)). Il va donc falloir trouver une solution de substitution.

La difficulté principale est alors que le comportement théorique de $(q_n - q)(F(q_n) - F(q))$ dépend fortement de là où se trouve q_n par rapport à sa cible q . Dans cette partie, nous allons simplement expliquer nos pistes de réflexions et les difficultés que nous avons rencontrées. Nous ne cherchons donc pas à présenter des résultats aboutis mais plutôt à faire comprendre des idées. Ainsi, pour simplifier les notations et les distinctions de cas, nous considérerons dans la suite de cette partie, que $q = 0$. De plus, on notera $h(q_n) := F(q_n) - f(q)$. Suivant la localisation de q_n par rapport à 0, on peut distinguer deux comportements de l'algorithme. D'abord, si la fonction f est continue, il existe un $\epsilon > 0$ tel que lorsque $|q_n| \leq \epsilon$, $f(x) \geq \frac{f(0)}{2}$. Ainsi, pour cet ϵ il existe deux situations.

- q_n est loin de sa cible $q = 0$, c'est-à-dire que $|q_n| > \epsilon$. Ce cas est le plus gênant parce que nous ne pouvons alors pas dire grand chose, si ce n'est que

$$\left| \int_0^{q_n} f(x) dx \right| \geq \int_0^\epsilon f(x) dx \geq \frac{f(0)}{2} \epsilon := c_\epsilon.$$

Ainsi, il nous sera impossible de majorer $h(q_n)q_n$ par une quantité de l'ordre de q_n^2 .

- q_n est proche de sa cible $q = 0$, c'est-à-dire que $|q_n| \leq \epsilon$. Dans ce cas, le formule de Taylor nous permet de dire que si f' est continue

$$h(q_n) \geq |q_n|f(0) - \|f'\|_{\infty, [-\epsilon, \epsilon]} \frac{q_n^2}{2},$$

et donc

$$q_n h(q_n) \geq a_n^2 f(0) \left(1 - \frac{\epsilon \|f'\|_{\infty, [-\epsilon, \epsilon]}}{2f(0)} \right).$$

On arrive donc bien ici à faire apparaître le terme q_n^2 mais le fait qu'il soit multiplié par un terme de la forme $(1 - \epsilon Cste)$ n'est pas une bonne chose, comme nous allons le voir. Cependant, dans le but d'obtenir une inégalité de récurrence comme dans (3.11), il est donc préférable de trouver un moyen de ne pas avoir à utiliser le premier item, qui ne donne pas du tout le bon ordre. Nous proposons donc de raisonner de la manière suivante. Pour trouver une inégalité de récurrence sur a_n , on écrira d'abord que pour une suite (ϵ_n) fixée,

$$a_n \leq \mathbb{E} \left[q_n^2 \mathbf{1}_{q_n \leq \epsilon_n} \right] + (q_0 + \alpha \Gamma_n)^2 \mathbb{P}(q_n \geq \epsilon_n) := b_n + \bar{b}_n \quad (3.16)$$

Nous verrons dans la suite comment régler ce ϵ_n (quitte à supposer que la fonction f' est bornée sur tout \mathbb{R}), et nous notons toujours $\Gamma_n = \sum_{k=1}^n \gamma_k$. Ainsi, pour obtenir une équation du type (3.14), nous avons deux choses à faire.

- 1) Etablir une inégalité de récurrence sur b_n de la forme de (3.14).
- 2) Montrer que $(q_0 + \alpha \Gamma_n)^2 \mathbb{P}(q_n \geq \epsilon_n) \leq \gamma_n^2$.

En réalité nous allons voir que pour faire l'étape 1), nous aurons besoin de faire l'étape 2). Voyons donc comment gérer le régime où q_n est proche de q .

Etude du régime de proximité de la cible

Nous souhaitons écrire une inégalité de récurrence sur b_n . Cependant, on ne peut pas appliquer directement la méthodologie récursive précédente puisqu'il n'existe pas de moyen d'exprimer $q_{n+1}^2 \mathbf{1}_{q_{n+1} \leq \epsilon_{n+1}}$ en fonction de $q_n^2 \mathbf{1}_{q_n \leq \epsilon_n}$ mais seulement en fonction de $q_n^2 \mathbf{1}_{\theta_{n+1} \leq \epsilon_{n+1}}$. C'est pour cela que nous allons devoir intégrer le deuxième régime dans l'étude du premier. Nous écrivons donc

$$\begin{aligned} b_{n+1} &= \mathbb{E} \left[q_{n+1}^2 \mathbf{1}_{|q_n| \leq \epsilon_n} \right] \\ &\leq \mathbb{E} \left(q_{n+1}^2 \right) \\ &= \mathbb{E} \left[(q_n - \gamma_{n+1} (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha))^2 \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\left(q_n^2 - 2\gamma_{n+1} q_n (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) + \gamma_{n+1}^2 (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha)^2 \right) \right] \\ &\leq \mathbb{E} \left[\left(q_n^2 - 2\gamma_{n+1} q_n (\mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \right) \right] + \gamma_{n+1}^2 \\ &= \mathbb{E} \left[\mathbb{E} \left(q_n^2 - 2\gamma_{n+1} q_n \mathbf{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha \right) | \mathcal{F}_n \right] + \gamma_{n+1}^2 \\ &= \mathbb{E} \left[\left(q_n^2 - 2\gamma_{n+1} h(q_n) q_n \right) \right] + \gamma_{n+1}^2 \\ &\leq b_n + \bar{b}_n - 2f(0)(1 - C\epsilon_n)b_n + \gamma_{n+1}^2. \end{aligned}$$

En reportant dans (3.16), on obtient donc

$$b_{n+1} \leq b_n (1 - c_{n+1}) + \gamma_{n+1}^2 + (q_0 + \alpha \Gamma_n)^2 \mathbb{P}(q_n \geq \epsilon_n), \quad (3.17)$$

où $c_{n+1} = 2f(0)(1 - C\epsilon_n)$. On remarque déjà ici, que nous sommes pas dans le cadre optimal présenté avant puisque $c_n \neq D\gamma_n$. Cependant, comme nous avons fait dépendre ϵ_n de n , on peut essayer de le calibrer de manière à compenser cette perte. Nous recherchons donc à trouver un ϵ_n qui soit assez petit pour que c_n soit proche de $D\gamma_n$, mais assez grand pour que la probabilité de déviation $\mathbb{P}(|\theta_n| \geq \epsilon_n) \Gamma_n^2$ soit négligeable devant le terme de reste γ_n^2 . Ce compromis est difficile à mettre en place. Nous avons fait les calculs (qui sont vraiment similaires à ceux du cas borné, ainsi nous ne les re-développerons pas) et avons trouvé que pour tomber sur la bonne vitesse en faisant le raisonnement récursif sur b_n , il fallait prendre

- lorsque l'on considère des pas en $\gamma_n = n^{-1}$, $\epsilon_n = \ln(n)^{-\delta}$ avec $\delta > 1$. Dans ce cas, on retrouve bien les trois comportements en fonction de la valeur de $f(0)$.

- lorsque l'on considère des pas en $\gamma_n = n^{-\gamma}$ pour $\gamma \in]1/2, 1[$, $\epsilon_n = \gamma_n$. Cette conclusion est assez logique puisque comme nous l'avons déjà remarqué, dans ce cas, la constante importe peu.

Ainsi, si ces ϵ_n étaient le bon compromis, on pourrait montrer que

- lorsqu'on prend des pas $\gamma_n = n^{-1}$,

$$\mathbb{P}\left(|q_n| > \frac{1}{\ln(n)^\delta}\right) \leq \frac{1}{(n \ln(n))^2};$$

- lorsqu'on prend des pas $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]1/2, 1[$,

$$\mathbb{P}\left(|q_n| \geq \frac{1}{n^\gamma}\right) \leq \frac{1}{n^2}.$$

Nous avons essayé de démontrer ces inégalité de déviations sans succès (voir certains de nos calculs en annexes). Même l'inégalité de Markov exponentielle ne nous permet pas de conclure. La valeur de ϵ_n nécessaire à la bonne conclusion pour la récurrence de b_n dans la première partie est trop petit pour que nous puissions démontrer des inégalités de déviation assez fortes pour conclure dans la seconde partie. Si on effectue le travail dans l'autre sens, c'est la même conclusion : on peut trouver un ϵ_n vérifiant probabilité de déviation du bon ordre. Mais lorsqu'on l'injecte dans la récurrence sur b_n , on tombe sur une vitesse sous-optimale.

Pour terminer cette partie, on fera la remarque suivante. Cardot et al. arrivent dans [22], à conclure dans leur cas, sans hypothèse de forte convexité, mais seulement parce qu'ils se placent en dimension strictement supérieure à 1. Cela leur permet de considérer des orthogonaux et de conclure à l'inégalité souhaitée, par le théorème de Pythagore, sur toute boule centrée en la cible. Ainsi, pour simplifier, grâce au même découpage que nous, ils obtiennent

$$b_{n+1} \leq b_n(1 - c_{n+1}) + \gamma_{n+1}^2 + R_{n+1}$$

où R_n est la probabilité de déviation. Leur avantage, c'est que les valeurs de c_n ne dépendent pas de celles de ϵ_n , qui n'intervient donc que dans R_n . Ainsi, il n'y a plus de problème de compromis, il leur suffit de régler ϵ_n pour que R_n soit du bon ordre pour conclure.

Nous n'avons pas réussi à obtenir une inégalité de la forme de (3.9) dans notre contexte. Il est alors assez difficile d'intuiter la raison de cette différence entre la dimension 1 et les dimensions supérieures. Une explication qui nous vient à l'esprit serait la suivante. Lorsque nous sommes en dimension 1, une zone proche de la cible de la forme $] - \epsilon_n, \epsilon_n[$ a une aire qui dépend linéairement de ϵ_n . Lorsque nous sommes en dimension 2, cette dépendance est quadratique. Ainsi, lorsque la dimension augmente, la zone où l'algorithme est proche de la cible est significativement plus grande. Cela permet peut-être d'avoir des probabilités de déviation plus faible et de conclure plus facilement.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'abord donné un état de l'art concernant le comportement asymptotique de l'algorithme (3.1) permettant d'estimer séquentiellement le quantile de la sortie d'un code numérique. Pour traiter du cas des codes coûteux, nous avons aussi proposé des pistes pour l'étude non-asymptotique de cet algorithme (et une preuve complète dans le cas où Y est à densité minorée).

Dans tous les cas, nous avons mis en avant la différence fondamentale entre les pas de la forme $C_\gamma n^{-1}$ et de la forme $C_\gamma n^{-\gamma}$ avec $\gamma < 1$. Dans le premier cas, on peut accéder à une vitesse optimale en \sqrt{n} (autant d'un point de vue asymptotique qu'à priori d'un point de vue non-asymptotique, même si le résultat n'est démontré pour le moment que dans le cas de la densité minorée), dès lors que la constante C_γ est supérieure à $1/2f(q)$ (valeur malheureusement inconnue). Dans le second cas, la vitesse ne sera qu'en $n^{-\gamma/2}$. En revanche, ce résultat ne demande aucune condition sur la constante C_γ . Cette étude sera utile dans les chapitres 4, 5 et 6.

3.4 Annexe : sur la piste des inégalités de déviation

Dans cette partie, nous présentons les calculs que nous avons effectué pour tenter de montrer l'inégalité de déviation

$$\mathbb{P}\left(|q_n| > \frac{1}{\ln(n)^\delta}\right) \leq \frac{1}{(n \ln(n))^2}.$$

Nous nous plaçons donc dans le cas où $\gamma_n = n^{-1}$ (c'est le cas le plus difficile) mais les calculs s'adaptent complètement dans l'autre cas. Pour commencer, nous introduisons la décomposition classique "martingale-reste" (on peut trouver ce genre de décomposition dans [40] ou [22]).

$$q_n = \beta_{n-1}q_1 + \beta_{n-1}S_n + \beta_{n-1}R_{n-1}$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_n = 1 - f(0)q_n \\ \beta_n = \alpha_1 \dots \alpha_n \\ R_n = \sum_{k=1}^{n-1} \gamma_k \beta_k^{-1} \delta_k \\ S_n = \sum_{k=1}^{n-1} \gamma_k \beta_k^{-1} \xi_{k+1} \\ \delta_k = h(q_k) - q_k f(0). \\ \xi_{k+1} = \mathbf{1}_{Y_{k+1} \leq q_k} - F(q_n). \end{array} \right.$$

Nous voulons alors montrer que

$$\mathbb{P}\left(q_1 \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \ln(n)^2}\right) + \mathbb{P}\left(R_n \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \ln(n)^2}\right) + \mathbb{P}\left(S_n \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \ln(n)^2}\right) \leq \frac{1}{(n \ln(n))^2}.$$

Introduisons d'abord un lemme technique.

Lemma 3.4.1. *Avec les notations précédentes, il existe une constante C telle que*

$$\frac{\beta_n}{\beta_k} \leq C \left(\frac{n}{k}\right)^{-f(0)}.$$

Proof. Les comparaisons séries-intégrales permettent de dire que

$$\prod_{i=k+1}^n \alpha_i \leq \exp\left(-f(0) \sum_{i=k+1}^n \gamma_i\right) \leq \left(\frac{n}{k+1}\right)^{-f(0)}.$$

□

Remarque 3.4.2. *Nous omettrons les constantes comme C . Nous nous concentrerons plutôt sur l'ordre en n des termes, qui est bien plus important. On comprendra donc les inégalités par la suite comme vraie à une constante près.*

Le premier terme de la somme est déterministe. Le lemme précédent donne la majoration

$$\mathbb{P}\left(\beta_n \theta_1 > \frac{1}{3 \ln(n)^\beta}\right) \leq \mathbb{P}\left(\frac{\ln(n)^\beta}{n^{f(0)}} > \frac{1}{3q_1}\right),$$

qui est égal à 0 pour n suffisamment grand (mais ce rang est déterministe).

Traisons maintenant le cas du terme martingale. On notera ici que nous sommes obligés d'aller chercher une inégalité de Markov exponentielle pour conclure, alors que l'inégalité de Tchebychev suffit dans le cas des pas $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma < 1$. Commençons donc par calculer la transformée de Laplace de $\beta_n S_n$. Pour cela, on note $\Delta_k = \frac{\beta_n}{\beta_k} \gamma_k$.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\exp(\lambda \beta_n S_n)) &= \exp(\lambda \mathbb{E}(S_n | \mathcal{F}_n)) \\ &\leq \mathbb{E}(\exp(\lambda S_n) | \mathcal{F}_n) \\ &\leq \mathbb{E}(\exp(\lambda \Delta_{n-1} \xi_n) \exp(\lambda S_{n-1}) | \mathcal{F}_n) \\ &\leq \mathbb{E}(\exp(\lambda S_{n-1}) | \mathcal{F}_{n-1}) \mathbb{E}(\exp(\lambda \Delta_{n-1} \xi_n) | \mathcal{F}_n) \\ &\leq \dots \\ &\leq \mathbb{E}\left(\prod_{k=1}^{n-1} \mathbb{E}(\exp(\lambda \Delta_k \xi_{k+1}) | \mathcal{F}_k)\right), \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'inégalité de Jensen avec la fonction convexe exponentielle. Sachant que $\forall n, |\xi_n| \leq 1$, pour Z une variable aléatoire de Rademacher, nous avons grâce à l'inégalité de Hoeffding

$$\mathbb{E}(\exp(\lambda \beta_n S_n)) \leq \mathbb{E}\left(\prod_{k=1}^{n-1} \mathbb{E}(\exp(\lambda \Delta_k Z))\right) \leq \prod_{k=1}^{n-1} \exp\left(\frac{\lambda^2 \Delta_k^2}{4}\right).$$

Nous avons maintenant besoin du lemme suivant.

Lemma 3.4.3. *Avec les notations suivantes, nous avons*

$$\sum_{k=1}^n \Delta_k^2 \leq \frac{1}{n}.$$

Proof. Grâce au Lemme 3.4.1, nous avons

$$\sum_{k=1}^n \Delta_k \leq \sum_{k=1}^n n^{2f(0)} k^{2f(0)-1} \leq \frac{1}{n}.$$

□

Finalement, la transformée de Laplace vérifie

$$\mathbb{E}(\exp(\lambda\beta_n S_n)) \leq \exp\left(\frac{\lambda^2}{4n}\right),$$

et l'inégalité de Markov exponentielle nous permet de conclure que $\forall \lambda > 0$,

$$\mathbb{P}\left(S_n \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \log(n)^2}\right) \leq \frac{\mathbb{E}(\exp(\lambda\beta_n S_n))}{\exp\left(\lambda \frac{1}{3 \log(n)^2}\right)} \leq \exp\left(\frac{\lambda^2}{4n} - \frac{\lambda}{3 \log(n)^\beta}\right).$$

En optimisant en λ , il vient

$$\mathbb{P}\left(S_n \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \log(n)^2}\right) \leq \exp\left(-\frac{n}{\ln(n)^{2\beta}}\right) \leq \frac{1}{(n \ln(n))^2}.$$

Pour conclure, il resterait donc seulement à gérer le terme de reste, c'est à dire à montrer que

$$\mathbb{P}\left(R_n \beta_{n-1} > \frac{1}{3 \log(n)^2}\right) \leq \frac{1}{(n \ln(n))^2}.$$

C'est le point de blocage. La seule chose que nous pouvons dire sur ce reste est que

$$|\delta_k| \leq \frac{q_k^2}{2} \|f'\|_\infty.$$

Ainsi, nous avons essayé d'utiliser l'inégalité de Tchebychev. Le moment d'ordre 2 est

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[\left(\sum_{k=1}^n \frac{\gamma_k}{\beta_k} \beta_n \delta_k\right)^2\right] &= \mathbb{E}\left[\sum_{k=1}^n \gamma_k^2 \left(\frac{\beta_n}{\beta_k}\right)^2 \delta_k + \sum_{i \neq j} \left(\gamma_i \frac{\beta_n}{\beta_i} \delta_i\right) \left(\gamma_j \frac{\beta_n}{\beta_j} \delta_j\right)\right] \\ &:= \mathbb{E}[T_1 + T_2]. \end{aligned}$$

Nous voyons apparaître ici le moment d'ordre 4 de l'algorithme. Ainsi, pour conclure, il faudrait avoir un résultat sur le moment d'ordre 4. Mais dans un premier temps, imaginons simplement que ce que nous cherchons à démontrer soit vrai. Dans ce cas, on aurait

$$\mathbb{E}(q_n^4) \leq \frac{1}{n^2}.$$

Ainsi, les calculs habituels nous donneraient

$$\mathbb{E}[T_1] \leq \frac{1}{n}.$$

Malheureusement, cela ne suffit pas puisque lorsque nous allons utiliser l'inégalité de Tchebychev, nous aurons seulement

$$\mathbb{P}\left(\beta_{n-1} R_n \geq \frac{1}{3 \log(n)^2}\right) \leq \frac{9 \ln(n)^4}{n}.$$

qui est loin d'être inférieur à $(n \ln(n))^{-2}$. On notera que l'inégalité de Tchebychev ne suffit pas non plus à conclure dans le cas des autres pas. L'idée naturelle qui vient par la suite serait d'utiliser une inégalité de Markov exponentielle. Écrire cette inégalité demande de faire des calculs très poussés. Nous ne les présenterons donc pas ici parce qu'ils n'ont que peu d'intérêt. Il ne permettent en effet pas de conclure. Nous pensons que le problème vient du fait que, même en écrivant cette inégalité, nous perdons trop d'informations lorsque nous utilisons les deux seules majorations que nous avons, à savoir

$$\delta_k \leq \frac{q_k^2}{2} \|f'\|_\infty \text{ et } \xi_k \leq 1.$$

Malheureusement, nous ne voyons pas comment affiner ces majorations.

Chapter 4

Estimation de superquantile dans les codes numériques

Dans ce chapitre, nous souhaitons estimer séquentiellement le superquantile Q de la sortie Y d'un code numérique coûteux. Nous considérons donc, dans la suite, une variable aléatoire Y telle que $Y\mathbb{1}_{Y>0}$ soit intégrable. Puisque que le superquantile est fortement relié au quantile du même niveau, nous avons vu dans l'introduction de cette deuxième partie, qu'il était pertinent d'estimer le superquantile en utilisant une estimation du quantile de la manière suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} q_0 \in \mathbb{R} \\ Q_0 \in \mathbb{R} \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1}^q (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n} - \alpha) \\ Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n), \end{array} \right. \quad (4.1)$$

où $(Y_i)_{i=1, \dots, n}$ est toujours un échantillon indépendant de Y et γ_n^q et γ_n^Q sont les pas de descente de gradient que l'on considérera toujours de la forme $n^{-\gamma^q}$ et $n^{-\gamma^Q}$ avec γ^q et γ^Q deux éléments de $]0, 1]$.

Dans le chapitre précédent, nous avons déjà étudié les comportements asymptotique et non-asymptotique de la première coordonnée de cet algorithme (c'est-à-dire de (q_n)). Nous souhaitons maintenant étudier le comportement de la seconde coordonnée (c'est-à-dire (Q_n)). Puisque Q_n est lié à q_n , nous utiliserons les résultats du Chapitre 3. Une question intéressante est de savoir si les deux paramètres de descente de gradient doivent ou non être choisis de la même manière. Même si le fait de les choisir égaux pourrait apporter des simplifications techniques, il semble que ce ne soit pas justifié d'un point de vue théorique. L'intuition pousse même à chercher des pas optimaux différents, puisque la suite (q_n) peut être construite sans la suite (Q_n) . Nous reviendrons sur cette question.

Ce chapitre est composé de deux parties. Nous commencerons par discuter du comportement asymptotique de l'algorithme (4.7). Ensuite, nous nous pencherons sur son comportement non-asymptotique. Dans tous les cas, nous discuterons de la manière de calibrer nos deux paramètres de descente de gradient.

4.1 Etat de l'art sur l'étude asymptotique de l'algorithme (4.7)

Théorème 4.1.1. *Soit une variable Y telle que $Y\mathbb{1}_{Y \geq 0}$ admette un moment d'ordre 2. Lorsque les paramètres γ^q et γ^Q sont des éléments de $]1/2, 1[$ alors,*

$$(q_n, Q_n) \xrightarrow{p.s.} (q, Q).$$

Esquisse de Preuve :

La convergence presque-sûre de (q_n) sous ces hypothèses a déjà été mentionnée dans le Chapitre 3. Nous en avons même donné une esquisse de preuve. La convergence presque sûre de la seconde coordonnée s'établit selon le même plan. L'hypothèse supplémentaire sur le moment d'ordre 2 intervient pour que l'incrément de martingale ξ_n soit uniformément borné dans L^2 , ce qui était trivialement vrai pour (q_n) puisque dans ce cas, l'incrément était bornée presque-sûrement par 1. On pourra se reporter à [8] pour une preuve détaillée.

Concernant l'étude de la normalité asymptotique, le travail est plus technique, si nous souhaitons un théorème de la limite centrale joint pour le couple (q_n, Q_n) . Outre la difficulté de passer en dimension 2, le problème est compliqué puisque nous souhaitons établir un résultat pour des pas non nécessairement égaux. Pour cela, le lecteur pourra se référer au travaux existant sur la normalité asymptotique de tels doubles algorithmes, dits *two time-scale stochastic approximation algorithms*, comme [71], [66] ou [15]. L'objet de ce chapitre étant plutôt une étude non-asymptotique, nous n'entrerons pas plus dans les détails. On notera par ailleurs que Bardou et al. proposent, toujours dans leur article [8], un théorème de la limite centrale à vitesse \sqrt{n} pour la version modifiée et simplifiée de l'algorithme (4.7). Ils étudient en effet la version moyennée, dont nous avons déjà parlé, pour éviter le problème de la constante C_γ à calibrer, et prennent des pas de descente de gradient égaux à $\gamma \in]1/2, 1[$, pour pouvoir utiliser le théorème de la limite centrale bidimensionnel classique.

4.2 Etude non-asymptotique de l'algorithme (4.7)

On se place maintenant dans le cadre de l'étude des codes coûteux. Nous souhaitons établir une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique de notre double algorithme. Nous raisonnons, pour cela, coordonnée par coordonnée. Nous avons donné dans le chapitre précédent, des éléments pour écrire une telle inégalité pour la première coordonnées (qui est complément indépendante de la seconde). Nous souhaitons maintenant trouver le même type de résultat pour la seconde coordonnée, qui elle, dépend complètement de la première. Cette remarque nous permet d'anticiper la forme de la majoration du risque quadratique que nous allons obtenir. En effet, cette borne devrait être constituée d'une partie due à l'erreur d'approximation que nous faisons en utilisant un algorithme stochastique mais aussi d'une partie due à l'erreur que nous faisons en considérant q_n au lieu de la vraie valeur de q . Pour bien comprendre la contribution de chacune de ces erreurs, nous allons commencer par traiter le cas où la seconde erreur est nulle, c'est-à-dire le cas où le quantile est connu. Ensuite, nous étudierons la seconde erreur en approchant q par q_n .

4.2.1 Etude du risque quadratique de l'estimateur empirique de la moyenne

Pour commencer, nous allons étudier le cas simple de la moyenne empirique d'une variable aléatoire Z . Lorsque nous appliquerons le résultat obtenu à $Z = Y\mathbb{1}_{Y \geq q}$, nous verrons comment se comporte la première erreur de l'algorithme (4.7) dans le cas des pas en $\gamma_n^q = n^{-1}$.

L'étude de ce cas très simple est intéressante parce que c'est un cas où nous connaissons la valeur exacte du risque quadratique. Nous allons donc pouvoir vérifier que le point de vue récursif conduit au bon ordre. Nous étudions l'algorithme stochastique suivant

$$\begin{cases} \theta_1 \in \mathbb{R} \\ \theta_{n+1} = \theta_n + \frac{1}{n+1} (Z_{n+1} - \theta_n), \end{cases} \quad (4.2)$$

où $(Z_i)_{i=1,\dots,n}$ est un échantillon indépendant d'une variable aléatoire admettant un moment d'ordre 2. Notant θ^* la cible de notre algorithme (à savoir $\mathbb{E}(Z)$) et σ l'écart type de Z , la décomposition biais-variance du risque quadratique donne que pour tout $n \geq 1$,

$$a_n = \mathbb{E} \left[(\theta_{n+1} - \theta^*)^2 \right] = \text{Var}(\theta_n) = \frac{1}{n} \sigma^2. \quad (4.3)$$

Effectuons maintenant notre analyse récursive habituelle pour voir si nous obtenons ce résultat. Soit $n \geq 0$. Tout d'abord, nous développons le carré.

$$(\theta_{n+1} - \theta^*)^2 = (\theta_n - \theta^*)^2 + \frac{2}{n+1} (\theta_n - \theta^*) (Z_{n+1} - \theta_n) + \frac{1}{(n+1)^2} (Z_{n+1} - \theta_n)^2.$$

En prenant l'espérance conditionnelle sachant la tribu du passé $\mathcal{F}_n = \sigma(Z_1, \dots, Z_n)$, on obtient

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((\theta_{n+1} - \theta^*)^2 \right) &= (\theta_n - \theta^*)^2 + \frac{2}{n+1} (\theta_n - \theta^*) \mathbb{E}_n(Z_{n+1} - \theta_n) + \frac{1}{(n+1)^2} \mathbb{E}_n \left((Z_{n+1} - \theta_n)^2 \right) \\ &= (\theta_n - \theta^*)^2 + \frac{2}{n+1} (\theta_n - \theta^*) (\mathbb{E}(Z) - \theta_n) + \frac{1}{(n+1)^2} \\ &\quad + \left[\mathbb{E}_n \left((Z_{n+1} - \theta^*)^2 + (\theta^* - \theta_n)^2 + 2(Z_{n+1} - \theta^*)(\theta^* - \theta_n) \right) \right] \\ &= (\theta_n - \theta^*)^2 - \frac{2}{n+1} (\theta_n - \theta^*)^2 \\ &\quad + \frac{1}{(n+1)^2} \left(\text{Var}(Z) + (\theta^* - \theta_n)^2 + 2(\theta^* - \theta_n)(\mathbb{E}(Z) - \theta^*) \right) \\ &= (\theta_n - \theta^*)^2 \left(1 - \frac{2}{n+1} + \frac{1}{(n+1)^2} \right) + \frac{\text{Var}(Z)}{(n+1)^2}. \end{aligned}$$

En passant à l'espérance et en notant $a_n := \mathbb{E} \left((\theta_n - \theta^*)^2 \right)$, on obtient donc que $\forall n \geq 0$,

$$a_{n+1} = a_n(1 - c_{n+1}) + d_{n+1},$$

avec $c_n = \frac{2}{n} - \frac{1}{n^2}$ et $d_n = \frac{\text{Var}(Z)}{n^2}$. C'est la fin de ce qui était appelé première étape dans le chapitre précédent. On notera par ailleurs que jusqu'ici, nous n'avons encore fait aucune majoration. C'est maintenant, pour passer à la seconde étape que nous allons faire la première. Comme dans le chapitre précédent, une simple récurrence, utilisant le fait que $\exp(x) \geq 1 + x$, permet alors de montrer que pour tout $n \geq 1$,

$$a_n \leq a_0 \exp \left(- \sum_{k=1}^n c_k \right) + \sum_{k=1}^n \exp \left(- (S_n - S_k) \right) d_k, \quad (4.4)$$

où l'on a noté $S_k = \sum_{j=1}^k c_j$.

Il reste maintenant à effectuer la troisième étape, c'est-à-dire calculer les ordres en n . En reprenant le même type de calculs que dans le chapitre précédent (avec $D = 1$), on trouve que pour tout $n \geq 2$,

$$\begin{aligned} a_n &\leq a_0 \exp\left(-\sum_{k=1}^n \left(\frac{2}{k} - \frac{1}{k^2}\right)\right) + \sum_{k=1}^{n-1} \exp\left(-\sum_{j=k+1}^n \frac{2}{k} - \frac{1}{j^2}\right) \frac{\text{Var}(Z)}{k^2} + \frac{\text{Var}(Z)}{n^2} \\ &\leq a_0 \exp(-2 \ln(n+1)) \exp\left(\sum_{k=1}^n k^{-2}\right) + \sum_{k=1}^{n-1} \exp\left(-2 \ln\left(\frac{n+1}{k+1}\right)\right) \exp\left(\sum_{j=k+1}^n j^{-2}\right) \frac{\text{Var}(Z)}{k^2} + \frac{\text{Var}(Z)}{n^2} \\ &\leq \frac{C_4 a_0 + \text{Var}(Z)}{n^2} + \frac{C_4}{(n+1)^2} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{k+1}{k}\right)^2 \text{Var}(Z) \\ &\leq \frac{C_4 a_0 + \text{Var}(Z)}{n^2} + \frac{4C_4 \text{Var}(Z)}{n}, \end{aligned}$$

où l'on a noté

$$C_3 := \sum_{k=1}^{\infty} k^{-2} \text{ et } C_4 := \exp(C_3),$$

et utilisé le Lemme 3.2.5 du chapitre précédent.

On constate que la méthode déployée permet, dans ce cas, de donner une majoration *optimale* du risque quadratique, dans le sens où la borne obtenue est du bon ordre à savoir n^{-1} . Malheureusement, les majorations conduisent à des constantes plus grandes que les constantes théoriques.

Lorsque l'on considère la version généralisée de l'algorithme (4.2), c'est-à-dire le même algorithme mais avec des pas $\gamma_n = n^{-\gamma}$ avec $\gamma \in]1/2, 1[$, on peut aussi reprendre les calculs du chapitre précédent. On va alors trouver que $\forall n \geq 0$,

$$a_{n+1} \leq a_n(1 - c_{n+1}) + d_{n+1}$$

mais cette fois avec $c_n = 2\gamma_n - \gamma_n^2$ et $d_n = \text{Var}(Z)\gamma_n^2$. En reprenant les calculs du chapitre précédent, on trouvera donc que $\forall n \geq \max(3, n_1)$,

$$\begin{aligned} a_n &\leq \exp\left(-2 \sum_{j=1}^n \gamma_j\right) \exp\left(\sum_{j=1}^n \gamma_j\right) a_0 \\ &\quad + \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp\left(-2 \sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \exp\left(\sum_{j=k+1}^n \gamma_j^2\right) \frac{\text{Var}(Z)}{k^{2\gamma}} \\ &\quad + \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \exp\left(-2 \sum_{j=k+1}^n \gamma_j\right) \exp\left(\sum_{j=k+1}^n \gamma_j^2\right) \frac{\text{Var}(Z)}{k^{2\gamma}} \\ &\quad + \frac{\text{Var}(Z)}{n^2} \\ &:= T_1 + T_2 + T_3 + T_3, \end{aligned} \tag{4.5}$$

où

$$\begin{aligned} T_1 &\leq a_0 C_5 \exp\left(-2 \frac{(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right), \quad T_2 \leq C_5 C_2 \exp\left(-\frac{n^{1-\gamma}}{2}\right) \text{Var}(Z) \\ T_3 &\leq \frac{2^{2\gamma-1} C_5 \text{Var}(Z)}{n^\gamma} \text{ et } T_4 = \frac{\text{Var}(Z)}{n^{2\gamma}}, \end{aligned} \tag{4.6}$$

avec

$$C_2 = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^2 \text{ et } C_5 := \exp(C_2)$$

et n_1 le rang à partir duquel

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2}{\gamma}.$$

En optimisant les bornes obtenues, il semble plus intéressant d'estimer la moyenne classique avec des pas $\gamma_n = n^{-1}$ puisque que nous obtenons dans ce cas une convergence en n^{-1} au lieu de $n^{-\gamma}$ au mieux dans les autres cas.

Voyons maintenant ce qu'il se passe dans le cas plus intéressant où le quantile n'est pas connu.

4.2.2 Etude du risque quadratique de l'algorithme (4.7) dans un cas simple

Cadre et hypothèse

On souhaite étudier

$$Q_{n+1} = Q_n + \gamma_{n+1}^Q (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n), \quad (4.7)$$

où q_n est estimé par l'algorithme stochastique précédent. Pour bien comprendre ce qu'il se passe et faire apparaître les deux erreurs précédemment citées, nous nous plaçons dans le cadre simple de l'hypothèse suivante.

Hypothèse H2 : Les suites (q_n) et (Q_n) sont bornées presque sûrement par des constantes R^q et R^Q .

Quitte à grossir un peu ces constantes, on les choisira de telle sorte que nous ayons en plus,

$$|q| \leq R^q \text{ et } |Q| \leq R^Q.$$

Remarque 4.2.1. *L'hypothèse H2 est compliquée à vérifier en pratique. Mais on peut imaginer des hypothèses plus fortes qui nous permettent d'être dans ce cadre. Par exemple, si la loi de Y admet une densité minorée par $D > 0$ sur son support (c'est l'hypothèse H1 du Chapitre 3), alors (Q_n) est bornée presque sûrement. Si, en plus, $\gamma^q \in]1/2, 1]$ alors (q_n) est aussi bornée presque sûrement.*

Nous avons déjà démontré dans le Chapitre 3 le résultat sur (q_n) . Concernant l'algorithme pour estimer le superquantile, c'est encore plus simple. Dès lors que l'on choisi $|Q_0| \leq \max(|L|, |U|) := R^Q$, alors l'algorithme est presque sûrement borné par R . Cela se voit facilement par récurrence. Supposons que $|Q_n| \leq R^Q$. On remarque d'abord que $|Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1}}| \leq R^Q$. Ainsi,

$$\begin{aligned} Q_{n+1} &= Q_n (1 - \gamma_{n+1}^q) + \gamma_{n+1}^Q Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} \\ &\leq R^Q (1 - \gamma_{n+1}^q) + \gamma_{n+1}^Q R^Q \leq R^Q, \end{aligned}$$

et de la même manière

$$\begin{aligned} -Q_{n+1} &= -Q_n (1 - \gamma_{n+1}^q) + \gamma_{n+1}^Q (-Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n}) \\ &\leq R^Q (1 - \gamma_{n+1}^q) + \gamma_{n+1}^Q R^Q \leq R^Q. \end{aligned}$$

Finalemment,

$$|Q_{n+1}| = \max(-Q_{n+1}, Q_{n+1}) \leq R^Q.$$

Expression de a_n en fonction de n

Nous commençons toujours pas établir une inégalité de récurrence sur a_n .

Théorème 4.2.2. *Sous l'hypothèse **H2**, soit Y une variable aléatoire réelle telle que $Y \mathbb{1}_{Y \geq 0}$ admette un moment d'ordre 2 et de densité f vérifiant $\|f\|_\infty < +\infty$. Soit (Y_1, \dots, Y_n) un échantillon indépendant de même loi que Y . Alors l'algorithme précédent (4.7) vérifie l'inégalité non-asymptotique suivante pour son risque quadratique a_n , $\forall n \geq 0$,*

$$a_{n+1} \leq a_n \left(1 - 2\gamma_{n+1}^Q + (\gamma_{n+1}^Q)^2 \right) + (\gamma_{n+1}^Q)^2 \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q}) + \left(C_7 \gamma_{n+1}^Q + C_6 (\gamma_{n+1}^Q)^2 \right) \sqrt{\mathbb{E}((q_n - q)^2)},$$

avec

$$C_7 = 4\|f\|_\infty R^Q R^q$$

et

$$C_6 = \|f\|_\infty R^q (2R^Q + R^q + 2).$$

Ce théorème illustre parfaitement l'intuition précédente. Nous retrouvons la partie avec la variance qui est la même que dans le cas où le quantile est connu et qui est donc due à l'erreur d'approximation par algorithme stochastique. Mais nous voyons aussi apparaître un nouveau terme, proportionnel au risque quadratique de q_n , qui représente donc la seconde erreur que l'on commet lorsqu'on approxime le quantile par q_n .

Proof. Dans la suite de cette preuve, pour alléger les notations, nous allons oublier l'indice Q sur le pas de descente γ . Commençons par développer le carré suivant.

$$(Q_{n+1} - Q^*)^2 = (Q_n - Q^*)^2 + \gamma_{n+1}^2 (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n)^2 + 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q^*) (-Q_n + Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n}).$$

Nous passons ensuite à l'espérance conditionnelle sachant la tribu $\mathcal{F}_n := \sigma(Y_1, \dots, Y_n)$ que nous noterons \mathbb{E}_n dans la suite.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left[(Q_{n+1} - Q)^2 \right] &\leq (Q_n - Q)^2 + 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q) (\mathbb{E}_n(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n}) - Q_n) \\ &\quad + \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}_n \left((Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n)^2 \right). \end{aligned}$$

Nous traitons ensuite du dernier terme de l'inégalité précédente. Nous le découpons en deux morceaux, pour faire apparaître l'erreur qui est commise en remplaçant q par son estimée.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n [Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_{n+1}}] &= \mathbb{E}_n [Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q}) + (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})] \\ &= \mathbb{E}_n [Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})] + Q. \end{aligned}$$

Ainsi, en reportant dans l'inégalité précédente, il vient

$$\mathbb{E}_n [(Q_{n+1} - Q)^2] = (Q_n - Q)^2 + 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q)(Q - Q_n) + 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q)T_n + \gamma_{n+1}^2 R_n, \quad (4.8)$$

avec

$$R_n = \mathbb{E}_n \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n)^2 \right],$$

et

$$T_n = \mathbb{E}_n \left[Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q}) \right].$$

Nous allons maintenant étudier le terme R_n . Pour cela, nous allons utiliser le même type de décomposition que dans la partie précédente concernant la moyenne classique, c'est-à-dire que nous allons faire sortir la variance de notre loi tronquée. Nous ajoutons et retirons le terme Q_n de la manière suivante

$$\begin{aligned} R_n &= \mathbb{E}_n \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q)^2 + (Q_n - Q)^2 + 2 (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q) (Q - Q_n) \right] \\ &:= R_n^1 + (Q - Q_n)^2 + R_n^2. \end{aligned}$$

Mais, en insérant à nouveau le vrai quantile au lieu de son estimé, nous trouvons

$$\begin{aligned} R_n^1 &= \mathbb{E}_n \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q} - Q)^2 \right] + \mathbb{E}_n \left[(Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q}))^2 \right] \\ &\quad + 2 \mathbb{E}_n \left[Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q}) (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q} - Q) \right] \\ &= \text{Var} (Y \mathbb{1}_{Y > q}) + \mathbb{E}_n \left[Y_{n+1}^2 (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})^2 \right] \\ &\quad + 2 \mathbb{E}_n \left[Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q}) (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q} - Q) \right]. \end{aligned}$$

De la même manière, nous obtenons

$$\begin{aligned} R_n^2 &= 2(Q_n - Q) \mathbb{E}_n (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_{n+1}} - Q) \\ &= 2(Q - Q_n) \left[\mathbb{E}_n (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q} - Q) + \mathbb{E}_n [Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})] \right] \\ &= 2(Q - Q_n) \mathbb{E}_n [Y_{n+1} (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})]. \end{aligned}$$

En reprenant la notation T_n précédente, nous avons donc

$$\begin{aligned} R_n &= (Q - Q_n)^2 + \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q}) + \mathbb{E} \left(Y^2 (\mathbb{1}_{Y > q_n} - \mathbb{1}_{Y > q}) \right) \\ &\quad - 2 \mathbb{E} (Y (\mathbb{1}_{Y > q_n} - \mathbb{1}_{Y > q})) - 2Q_n T_n. \end{aligned}$$

En revenant à l'équation (4.8), nous obtenons alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [(Q_{n+1} - Q)^2] &= (Q_n - Q)^2 (1 - 2\gamma_n + \gamma_n^2) + \gamma_n^2 \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q}) + T_n [2\gamma_n(Q_n - Q) - 2\gamma_n^2 Q_n] \\ &\quad + \gamma_n^2 (\mathbb{E} [Y^2 (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})] - 2 \mathbb{E} [Y (\mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q})]). \end{aligned} \quad (4.9)$$

On remarque ici que le début de l'équation est exactement de la même forme que pour la moyenne classique. La seule différence réside dans les termes suivants, qui sont dûs à l'erreur commise en remplaçant q par q_n . Dans la suite, nous gérons ces termes. Nous allons voir qu'ils peuvent tous s'exprimer en fonction du risque quadratique de l'algorithme d'estimation du quantile. Puisque Y est à densité, nous avons

$$T_n = \int_{q_n}^q y f(y) dy.$$

Ainsi, en notant F la fonction de répartition de Y , nous avons

$$T_n \leq |T_n| \leq R^q |F(q_n) - F(q_n)| \leq R^q \|f\|_\infty. \quad (4.10)$$

De la même manière,

$$\mathbb{E} \left(Y^2 (\mathbb{1}_{Y > q_n} - \mathbb{1}_{Y > q}) \right) \leq (R^q)^2 \|f\|_\infty |q_n - q|. \quad (4.11)$$

et

$$\mathbb{E} (Y \mathbb{1}_{q < Y < q_n}) \leq R^q \|f\|_\infty. \quad (4.12)$$

En reportant alors les équations (4.10), (4.11) et (4.12) dans l'équation (4.9), et en utilisant la définition de R^Q , on trouve

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left[(Q_{n+1} - Q)^2 \right] &\leq (Q_n - Q)^2 \left(1 - 2\gamma_{n+1} + \gamma_{n+1}^2 \right) + \gamma_{n+1}^2 \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q}) \\ &\quad + \gamma_{n+1} \left(4\|f\|_\infty R^Q R^q \right) |q_n - q| + \gamma_{n+1}^2 (R^q \|f\|_\infty) (2R_Q + R^q + 2) |q_{n+1} - q|. \end{aligned}$$

Pour se débarrasser de l'espérance conditionnelle, nous passons maintenant à l'espérance. Enfin, nous utilisons l'inégalité de Cauchy-Schwarz pour faire apparaître le risque quadratique de l'estimateur du quantile. Cela donne finalement

$$\begin{aligned} a_{n+1} &\leq a_n \left(1 - 2\gamma_{n+1} + \gamma_{n+1}^2 \right) + \gamma_{n+1}^2 \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q}) \\ &\quad + \gamma_{n+1} \left(4\|f\|_\infty R_Q R^q \right) \sqrt{\mathbb{E}((q_n - q)^2)} + \gamma_{n+1}^2 (\|q\| \|f\|_\infty) (2R + |q| + 2) \sqrt{\mathbb{E}((q_n - q)^2)}. \end{aligned}$$

Nous avons bien montré l'inégalité annoncée. \square

Corollaire 4.2.3. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.2, a_n vérifie l'inégalité non-asymptotique suivante, $\forall n \geq 1$,*

$$a_n \leq \exp(-S_n) a_0 + \sum_{k=1}^n \exp(-(S_n - S_k)) d_k$$

$$\text{avec } d_k = \left(\gamma_k^Q \right)^2 \text{Var}(Y \mathbb{1}_{Y > q_\alpha}) + \left(C_7 \gamma_k^Q + C_6 \left(\gamma_k^Q \right)^2 \right) \sqrt{\mathbb{E}((q_{k-1} - q)^2)} \text{ et } S_n = \sum_{j=1}^n c_j \text{ où}$$

$$c_j = 2\gamma_j^Q - \left(\gamma_j^Q \right)^2.$$

Proof. Comme dans le chapitre précédent, on obtient ce corollaire par simple récurrence et en utilisant le fait que $\exp(x) \geq 1 + x$. \square

Choix des pas de descente de gradient et étude des termes dominants

Le Corollaire 4.2.3 va nous permettre de donner, suivant les valeurs de γ^q et de γ^Q , une borne sur la vitesse de décroissance du risque quadratique de Q_n . Ces résultats nous permettront de proposer des paramètres optimaux pour régler l'algorithme. Dans l'expression de d_n , il y a un terme qui dépend du risque quadratique de q_n . Dans la suite de ce chapitre, nous allons donc noter $a_k(q)$ le risque quadratique de q_k et $a_k(Q)$ celui de Q_k . Nous avons montré dans le chapitre précédent, que lorsque γ^q était choisi égal à 1, sous l'hypothèse **H1**, $a_n(q)$ atteignait sa vitesse maximale. Puisque que q_n ne dépend pas de Q_n , nous décidons d'utiliser directement ce résultat. On se place donc, dans la suite, sous l'hypothèse **H1** et on considère, pour simplifier, que $D > 1/2$ (nous avons de toutes manière vu comment s'y ramener en

jouant sur C_γ). Sous ces hypothèses, le Corollaire 3.2.3 du Chapitre 3 nous assure qu'en choisissant $\gamma^q = 1$, pour tout $n \geq 2$, nous avons

$$a_n(q_n) \leq \frac{4}{(2D-1)n} + \frac{a_0(q)}{n^{2D}} + \frac{1}{n^2}.$$

En reportant cela dans le Corollaire 4.2.3, on peut montrer le résultat suivant

Corollaire 4.2.4. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.2 et sous **H1**, en prenant $\gamma^q = 1$, nous avons*

- Si $\gamma^Q = 1$, pour tout $n \geq 4$,

$$a_n(Q) \leq \frac{C_4(a_0(Q) + C_{10})}{n^{2D}} + \frac{2\sqrt{3}C_4}{\sqrt{n}} + \frac{C_9 2^{\frac{3}{2}}}{n}.$$

- Si $1/2 < \gamma^Q < 1$, pour tout $n \geq \max(6, n_1)$,

$$a_n(Q) \leq C_4(a_0(Q) + C_{10}) \exp\left(\frac{-2(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma}\right) + C_5 C_{11} \exp\left(\frac{-n^{1-\gamma}}{2}\right) + \frac{\sqrt{2}\sqrt{3}C_5}{\sqrt{n}} + \frac{C_9 2^{2\gamma-\frac{1}{2}}}{n^{\gamma+\frac{1}{2}}}.$$

où $C_{11} := \sum_{k=1}^{\infty} k^{-\gamma-1/2}$ et les autres constantes sont définies dans la preuve.

Proof. Puisque γ^q est fixé, pour alléger les notations nous n'indicerons plus γ^Q par Q . L'idée de la preuve est toujours la même, mais le terme de reste étant une somme de plusieurs termes, les calculs sont plus compliqués. Voyons comment gérer le terme de reste d_k . Dans un premier temps, nous savons que pour tout $k \geq 2$,

$$a_k(q) \leq \frac{4}{(2D-1)k} + \frac{a_0(q)}{k^{2D}} + \frac{1}{k^2}.$$

Ainsi, pour $C_8 = q_0(q)2^{2D-1} + 1/2 + 4/(2D-1)$, nous avons pour tout $k \geq 2$,

$$a_k(q) \leq \frac{C_8}{k}.$$

Ainsi, pour tout $k \geq 3$, et pour tout $\gamma \in]1/2, 1]$, nous avons,

$$d_k \leq \frac{1}{(k-1)^{2\gamma}} \text{Var}(Z) + \left(\frac{C_7}{(k-1)^\gamma} + \frac{C_6}{(k-1)^{2\gamma}} \right) \sqrt{a_{k-1}(q)} \leq \frac{C_9}{(k-1)^{\gamma+\frac{1}{2}}},$$

pour $C_9 = \text{Var}(Z)2^{1/2-\gamma} + C_7\sqrt{C_8} + C_6\sqrt{C_8}2^{-\gamma}$.

Ainsi, pour $n \geq 4$, on peut écrire,

$$\begin{aligned} a_n(Q) &\leq \exp(-S_n)a_0(Q) + \sum_{k=3}^{n-1} \exp(-(S_n - S_k)) \frac{C_9}{(k-1)^{2\gamma-\frac{1}{2}}} + \frac{C_9}{(n-1)^{2\gamma-\frac{1}{2}}} \\ &\quad + \exp(-(S_n - S_1))d_1 + \exp(-(S_n - S_2))d_2 \\ &\leq \exp(-S_n)(a_0(Q) + C_{10}) + \sum_{k=3}^{n-1} \exp(-(S_n - S_k)) \frac{C_9}{(k-1)^{2\gamma-\frac{1}{2}}} + \frac{C_9}{(n-1)^{2\gamma-\frac{1}{2}}}, \end{aligned}$$

où

$$C_{10} := \exp(S_1)d_1 + \exp(S_2)d_2$$

$$\leq [\text{Var}(Z) + (C_6 + C_7)\sqrt{a_0}]e + \left[\frac{\text{Var}(Z)}{2} + \left(\frac{C_7}{2^\gamma} + \frac{C_6}{2^{2\gamma}} \right) \sqrt{a_0 + 1} \right] \exp \left(1 + \frac{2}{2^\gamma} - \frac{1}{2^{2\gamma}} \right).$$

Il reste maintenant à séparer les cas. Si $\gamma = 1$, par les calculs habituels, on obtient que pour $n \geq 3$,

$$a_n(Q) \leq \frac{C_4(a_0(Q) + C_{10})}{n^2} + \frac{2\sqrt{3}C_4}{\sqrt{n}} + \frac{C_9 2^{\frac{3}{2}}}{n}.$$

où l'on a utilisé que pour $k \geq 2$, $1/(k-1) \leq 3/(k+1)$. En revanche, si $\gamma < 1$, on obtient que pour $n \geq \max(6, n_1)$, (on a besoin de $n \geq 6$ pour pouvoir couper la somme en deux comme dans les calculs du chapitre précédent et donc pour que $\lfloor n/2 \rfloor \geq 3$)

$$a_n(Q) \leq C_4(a_0(Q) + C_{10}) \exp \left(\frac{-2(n+1)^{1-\gamma}}{1-\gamma} \right) + C_5 C_{11} \exp \left(\frac{-n^{1-\gamma}}{2} \right) + \frac{2C_5}{\sqrt{n}} + \frac{C_9 2^{2\gamma - \frac{1}{2}}}{n^{\gamma + \frac{1}{2}}}.$$

en utilisant encore que pour $k \geq 4$,

$$1/(k-1) \leq 2/(k+1).$$

□

Les bornes que nous obtenons sur le risques quadratiques semblent montrer que dès lors que l'on choisit bien le paramètre pour estimer le quantile, on peut utiliser n'importe quel paramètre $\gamma^Q \in]1/2, 1[$ pour estimer le superquantile. Dans tous les cas, notre borne atteint une vitesse de décroissance en \sqrt{n} . La différence de vitesse entre le cas où le quantile est connu et celui où le quantile n'est pas connu semble très importante. On peut alors se demander si la méthode que nous avons mis en place ne conduirait pas à une majoration trop forte. Comme nous n'avons pas de théorème de la limite centrale dans ce cas et nous ne savons pas calculer directement le risque quadratique, nous n'avons aucune garantie théorique de l'optimalité de nos bornes. Pour répondre partiellement à la question, nous avons alors décidé de faire des simulations numériques. Nous avons fait tourner le double algorithme sur un échantillon gaussien, pour estimer le superquantile à 95% en utilisant des pas de l'ordre de n^{-1} . Par une méthode de Monte Carlo à 100 itérations, nous avons calculé le risque quadratique de l'estimateur du superquantile et l'avons tracé en fonction de l'étape n . Ensuite, nous avons cherché la meilleure constante d'ajustement des données aux fonctions $n \mapsto C/n$ et $n \mapsto C/\sqrt{n}$ par méthode des moindres carrés. La Figure 4.1 montre la courbe de nos résultats et les deux courbes d'ajustement. Sur cet exemple (et sur tous les exemples que nous avons simulés), il semble que la vitesse soit plus proche de \sqrt{n} que de n .

La perte de vitesse observée est bien sûr due au fait que nous utilisons dans l'estimation du superquantile, un estimateur du quantile. Cela induit un biais relativement important. Dans la preuve précédente, on voit bien l'effet de ce biais. Le reste d_n qui est dans le cas où le quantile est connu, de l'ordre de γ_n^2 , devient, dans le cas où le quantile est inconnu, de l'ordre de $\gamma_n |q_n - q|$. On passe donc d'un reste en $n^{-2\gamma}$ à un reste de l'ordre de $n^{-1/2-\gamma}$, et cela conduit à la conclusion précédente.

Pour terminer, il peut sembler étonnant que le choix du pas pour l'algorithme permettant d'estimer le superquantile n'ait pas d'influence. Nous avons aussi fait des simulations numériques en changeant le pas γ^Q et nous n'avons effectivement pas observé de différences

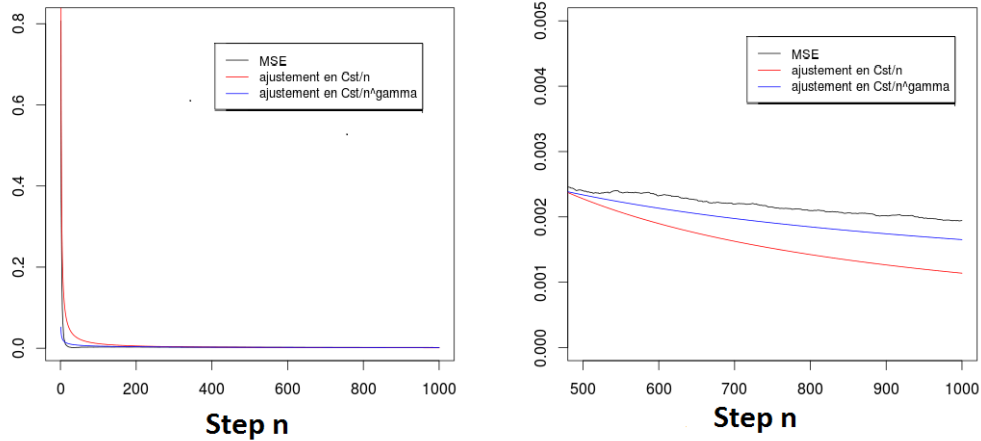


Figure 4.1: Vitesse de décroissance du risque quadratique de l'estimateur du superquantile lors que le quantile n'est pas connu.

notables. Cela s'explique sans doute par le fait que la partie biais que nous venons de discuter est assez importante pour écraser ces différences de comportement. Si on devait tout de même choisir un *meilleur* paramètre pour régler l'algorithme, on pourrait étudier l'ordre des constantes qui sont devant le terme dominant. On constate que

$$C_4 = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} k^{-2}\right) \leq \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} k^{-2\gamma}\right) = C_5.$$

Comme en plus l'inégalité est vraie à partir d'un rang plus petit lorsque l'on choisit $\gamma^Q = 1$, on peut conclure que le choix le plus judicieux est ce dernier. Les simulations numériques semblent confirmer ce choix. En effet, lorsque nous faisons les ajustements par moindres carrés, nous obtenons toujours une plus grosse constante pour des pas satisfaisant $\gamma^Q < 1$. On notera que à nouveau, les constantes obtenues par nos majorations sont plus grandes que celles obtenues par les simulations et les ajustements par moindres carrés.

4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié un algorithme stochastique permettant d'estimer le superquantile de la sortie d'un code numérique à partir d'une estimation du quantile. Cet algorithme est composé de deux coordonnées et donc de deux pas de descente de gradient. La première coordonnée sert à estimer le quantile et correspond à l'algorithme que nous avons étudié dans le Chapitre 3. La seconde coordonnée est liée à la première et sert à estimer le superquantile, lorsque le quantile est inconnu. Après avoir fait un rapide résumé des propriétés connues sur le comportement non-asymptotique de ce double algorithme, nous avons étudié le comportement non-asymptotique de l'estimateur du superquantile. La borne obtenue sur son risque quadratique se décompose en deux erreurs : celle que l'on fait parce qu'on utilise un algorithme stochastique pour estimer une moyenne, et celle que l'on fait parce qu'on utilise q_n pour approcher q . Dans le cas où la densité de Y est minorée et en choisissant les pas de descente de gradient optimaux pour l'algorithme concernant le quantile, nous avons donné une borne supérieure sur le risque quadratique de l'estimateur séquentiel

du superquantile ayant une vitesse de décroissance de l'ordre de $n^{-1/2}$. Ce résultat est vrai quelque soit le choix du pas de descente de gradient pour le superquantile $1/2 < \gamma^Q \leq 1$. Les simulations numériques que nous avons effectué semblent être en accord avec les résultats théoriques et confirmer que la double estimation engendre un biais important.

Les résultats et raisonnements que nous avons fait dans ce chapitre nous resservirons dans le Chapitre 6, lorsque nous traiterons de l'estimation du superquantile de la sortie d'un code stochastique.

4.4 Annexes

Dans ce chapitre, nous avons noté,

- $C_1 = \sum_{k=1}^{\infty} k^{2D-2}$
- $C_2 = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k^2$
- $C_3 = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-2}$
- $C_4 = \exp(C_3)$
- $C_5 = \exp(C_2)$
- $C_6 = \|f\|_{\infty} R^q (2R^Q + R^q + 2)$
- $C_7 = 4\|f\|_{\infty} R^Q R^q$
- $C_8 = q_0(q)2^{2D-1} + 1/2 + 4/(2D - 1)$
- $C_9 = \text{Var}(Z)2^{1/2-\gamma} + C_7\sqrt{C_8} + C_6\sqrt{C_8}2^{-\gamma}$
- $C_{10} = [\text{Var}(Z) + (C_6 + C_7)\sqrt{a_0}] e + \left[\frac{\text{Var}(Z)}{2} + \left(\frac{C_7}{2^\gamma} + \frac{C_6}{2^{2\gamma}} \right) \sqrt{a_0 + 1} \right] \exp\left(1 + \frac{2}{2^\gamma} - \frac{1}{2^{2\gamma}}\right).$

Chapter 5

Sequential conditional quantile estimation for stochastic codes

The results of this chapter are derived from the paper "Sequential conditional quantile estimation for stochastic codes" of T. Labopin-Richard, F. Gamboa and A. Garivier, submitted in the journal *Electronic Journal of Statistics*.

5.1 Introduction

Computer code experiments have encountered, in the last decades, a growing interest among statisticians in several fields (see [90] and references therein and also [64, 89, 74, 57, 9]...). In the absence of noise, a numerical black box $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ maps an *input vector* X to $Y = g(X) \in \mathbb{R}$. When the black box does include some randomness, the code is called *stochastic* and the model is as follows: a random vector $\epsilon \in \mathbb{R}^m$, called *random seed*, models the stochasticity of the function, while X is a random vector. The random seed and the input are assumed to be stochastically independent. The map g (which satisfies some regularity assumption specified below) is defined on $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$ and outputs

$$Y = g(X, \epsilon), \quad (5.1)$$

hence yielding possibly different values for the same input X . One observes a sample of (X, Y) , without having access to the details of g . However, those observations are often expensive (for example when g has a high computational complexity) and one aims at learning rapidly some properties of interest on g .

We focus in this work on the estimation of the conditional quantile of the output Y given the input X . For a given level $\alpha \in [1/2, 1)$ and for every possible input $x \in \mathbb{R}^d$, the target is

$$q^*(x) := q_\alpha(g(x, \epsilon)), \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

where $q_\alpha(Z) := F_Z^{-1}(\alpha)$ is the quantile of level α of the random variable Z and $F_Z^{-1}(u) := \inf\{x : F_Z(x) \geq u\}$ is the generalized inverse of the cumulative distribution function of Z . Moreover, we would like to estimate such a quantile for different values of x .

5.1.1 The algorithm

For a fixed value of x , there are several well-known procedures to estimate the quantile $\theta^*(x)$. Given a sample $(Y_i^x)_{i=1\dots n}$ of $Y^x := g(x, \epsilon)$, the empirical quantile is a solution. For a sequential estimation, one may use a Robbins Monro [80] estimator. This method permits to

iteratively approximate the zero of a function $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ by a sequence of estimators defined by induction: $\theta_0 \in \mathbb{R}^d$ and for all $n \geq 0$,

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} H(\theta_n, Z_{n+1}) .$$

Here, (γ_n) is the learning rate (a deterministic step-size sequence), (Z_n) is an i.i.d sample of observations, and H is a noisy version of h . Denoting $\mathcal{F}_n := \sigma(Z_1, \dots, Z_n)$, H is such that

$$\mathbb{E}(H(\theta_n, Z_{n+1}) | \mathcal{F}_n) = h(\theta_n) .$$

Classical conditions for the the choice of the step sizes (γ_n) are

$$\sum_n \gamma_n^2 < \infty, \text{ and } \sum_n \gamma_n = \infty .$$

These conditions ensure the convergence of the estimates under weak assumptions. For example, convergence in mean square is studied in [80], almost sure consistency is considered in [14, 91], asymptotic rate of convergence are given in [41, 87, 88], while large deviations principles are investigated in [108]. There has been a recent interest on non-asymptotic results. Risk bounds under Gaussian concentration assumption (see [43]) and finite time bounds on the mean square error under strong convexity assumptions (see [72, 91] and references therein), have been given. Quantile estimation corresponds to the choice $h : t \mapsto F(t) - \alpha$, where F is the cumulative distribution function of the target distribution. One can show that the estimator

$$\begin{cases} q_0 \in \mathbb{R} \\ q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1} (\mathbb{1}_{Z_{n+1} \leq q_{n+1}} - \alpha) . \end{cases} \quad (5.2)$$

is consistent and asymptotically Gaussian (see [40] chapters 1 and 2 for proofs and details). It is important to remind, however, that the lack of strong convexity prevents most non-asymptotic results to be applied directly, except when the density is lower-bounded. We nevertheless mention that Cardot et al. and Godichon prove in [22, 51] such non-asymptotic results for the adaptation of algorithm (5.2) to the case where Z is a random variable on an Hilbert space of dimension higher than 2.

Of course, unless x can take a finite but small number of different values, it is not possible to use this algorithm with a sample of Y^x for each x . Even more, when the code has a high computational complexity, the overall number of observations (all values of x included) must remain small, and we need an algorithm using only one limited sample $(X_i, Y_i)_{i=1 \dots n}$ of (X, Y) . Then, the problem is more difficult. For each value of x , we need to estimate quantile of the conditional distribution given x using a *biased* sample. To address this issue, we propose to embed Algorithm (5.2) into a non-parametric estimation procedure. For a fixed input x , the new algorithm only takes into account the pairs (X_i, Y_i) for which the input X_i is close to x , and thus (presumably) the law of Y_i close to that of Y^x . To set up this idea, we use the k -nearest neighbours method, introducing the sequential estimator:

$$\begin{cases} q_0(x) \in \mathbb{R} \\ q_{n+1}(x) = q_n(x) - \gamma_{n+1} \left(\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} , \end{cases} \quad (5.3)$$

where

- $kNN_n(x)$ is the set of the k_n nearest neighbours of x for the euclidean norm on \mathbb{R}^d . Denoting by $\|X - x\|_{(i,n)}$ the i th statistic order of a sample $(\|X_i - x\|)_{i=1 \dots n}$ of size n , we have

$$\{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)\} = \{\|X_{n+1} - x\| \leq \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}\}.$$

In this work, we discuss choices of the form $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ for $0 < \beta < 1$, $n \in \mathbb{N}^*$.

- (γ_n) is the deterministic steps sequence. We also study the case $\gamma_n = n^{-\gamma}$ for $0 < \gamma \leq 1$, $n \in \mathbb{N}^*$.

The k -nearest neighbours method of localization first appears in [97, 98] for the estimation of conditional expectations. In [12], Bhattacharya et al. apply it to the (non-recursive) estimation of the conditional quantile function for real-valued inputs. If the number of neighbours k_n is small, then few observations are used and the estimation is highly noisy; on the other hand, if k_n is large, then values of Y_i may be used that have a distribution significantly different from the target. The challenge is thus to tune k_n so as to reach an optimal balance between bias and variance.

In this work, this tuning is combined with the choice of the learning rate. The main objective of this work is thus to optimize the two parameters of Algorithm (5.3), i.e. the step size γ_n and the number of neighbours k_n . The paper is organized as follows: Section 5.2 deals with the almost sure convergence of the algorithm. Further, it contains the main result of our paper that is a non-asymptotic inequality on the mean square error from which an optimal choice of parameters is derived. In Section 5.3, we present some numerical simulations to illustrate our results. The technical points of the proofs are deferred to Section 5.5.

5.2 Main results

We explain here how to tune the parameters of the algorithm. We also provide conditions allowing theoretical guarantees of convergence. Before that, we start by some notation and technical assumptions.

5.2.1 Notation and assumptions

The constants appearing in the sequel are of three different types:

- 1) (L, U) denote lower- and upper bounds for the support of random variables. They are indexed by the names of those variables;
- 2) $(N_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ are integers denoting the first ranks after which some properties hold;
- 3) $(C_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ are positive real numbers used for other purposes.

Without further precision, constants of type 2) and 3) only depend on the model, that is, on g and on the distribution of (ϵ, X) . Further, we will denote $C_i(u)$ or $N_i(u)$ for $u \in \mathcal{P}(\{\alpha, x, d\})$ (the power set of a $\{\alpha, x, d\}$) constant depending on the model, on the probability level α , on the point x and on the dimension d . The values of all the constants are summarized in the Appendix.

For any random variable Z , we denote by F_Z its cumulative distribution function. We denote by \mathcal{B}_x the set of the balls of \mathbb{R}^d centred at x . For $B \in \mathcal{B}_x$, we denote by r_B its radius and for $r_B > 0$, we call Y^B a random variable with distribution $\mathcal{L}(Y|X \in B)$.

Remarque 5.2.1. *If the pair (X, Y) has a density $f_{(X,Y)}$ and if the marginal density $f_X(x)$ is positive, then we can compute the density of $\mathcal{L}(Y|X = x)$ by*

$$f_{Y|X=x} = \frac{f_{(X,Y)}(x, \cdot)}{f_X(x)},$$

and when $B = \{x\}$,

$$Y^B \stackrel{\mathcal{L}}{=} Y^x = g(x, \epsilon) \sim \mathcal{L}(Y|X = x).$$

We will make four assumptions. The first one is hardly avoidable, since we deal with k -nearest neighbours. The three others are more technical.

Assumption A1 For all x in the support of X (that we will denote $\text{Supp}(X)$ in the sequel), there exists a constant $M(x)$ such that the following inequality holds :

$$\forall B \in \mathcal{B}_x, \forall t \in \mathbb{R}, |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| \leq M(x)r_B.$$

In words, we assume that the stochastic code is sufficiently smooth. The law of two responses corresponding to two different but close inputs are not completely different. The assumption is clearly required, since we want to approximate the law $\mathcal{L}(Y^x)$ by the law $\mathcal{L}(Y|X \in kNN_n(x))$.

Remarque 5.2.2. *If we consider random vector supported by $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$, we can show that Assumption A1 holds, for example, as soon as (X, Y) had a regular density. In all cases, it is easier to prove this assumption when the couple (X, Y) has a density. See Subsection 3.1 for an example.*

Assumption A2 The law of X has a density and this density is lower-bounded by a constant $C_{input} > 0$ on $\text{Supp}(X)$.

This hypothesis implies in particular that the law of X has a compact support. Notice that this kind of assumptions is usual in k -nearest neighbours context (see for example [45]).

Assumption A3 The code function g takes its values in a compact $[L_Y, U_Y]$.

Under Assumption A3 and if $\beta \geq \gamma$, then

$$\sqrt{C_1} := \max(U_Y - L_Y + (1 - \alpha), U_Y + \alpha - L_Y) = U_Y - L_Y + \alpha,$$

is a bound of $|q_n(x) - q^*(x)|$ (see Lemma 5.5.8 in Appendix).

Assumption A4 For all x , the law $g(x, \epsilon)$ has a density which is lower-bounded by a constant $C_g(x) > 0$ on its support.

Lemma 5.2.3. *Denoting $C_2(x, \alpha) := \min\left(C_g(x), \frac{1-\alpha}{U_Y + \alpha - L_Y}\right)$, we have thanks to assumption A4,*

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, [F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x))] [q_n(x) - q^*(x)] \geq C_2(x, \alpha) [q_n(x) - q^*(x)]^2. \quad (5.4)$$

Proof. When $q_n(x) \in [L_Y, U_Y]$, it is obvious that the inequality (5.4) holds for $C_2 := C_g(x)$. When $q_n(x) \in [L_{q_n}, L_Y]$, we have

$$L_{q_n} \leq q_n(x) \leq L_Y \leq q^*(x),$$

and then $F_{Y^x}(q_n(x)) = 0$. Thus,

$$\begin{aligned} (q_n(x) - q^*(x))(F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x))) &= (q_n(x) - q^*(x))^2 \frac{(0 - \alpha)}{q_n(x) - q^*} \\ &\geq (q_n(x) - q^*(x))^2 \frac{-\alpha}{L_Y - (1 - \alpha) - U_Y} \\ &\geq C_2(x, \alpha)(q_n(x) - q^*(x))^2 . \end{aligned}$$

The proof of the last case follows similarly using that $C_2(x, \alpha, d) \geq \frac{1-\alpha}{U_Y + \alpha - L_Y}$. □

This assumption is useful to deal with non-asymptotic inequality for the mean square error. It is the substitute of the strong convexity assumption made in [72] which is not true in the case of the quantile.

5.2.2 Almost sure convergence

The following theorem studies the almost sure convergence of our algorithm.

Théorème 5.2.4. *Let x be a fixed input. Under Assumptions **A1** and **A2**, Algorithm (5.3) is almost surely convergent whenever $\frac{1}{2} < \gamma \leq \beta < 1$.*

Sketch of proof : In the sequel, we still denote $\mathcal{F}_n := \sigma(X_1, \dots, X_n, Y_1, \dots, Y_n)$ and \mathbb{E}_n and \mathbb{P}_n the conditional expectation and probability given \mathcal{F}_n . For sake of simplicity, we denote

$$H(q_n(x), X_{n+1}, Y_{n+1}) := \left(\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} .$$

The proof is organized in three steps.

- 1) We decompose $H(q_n(x), X_{n+1}, Y_{n+1})$ as a sum of a drift and a martingale increment :

$$h_n(q_n) := \mathbb{E}(H(q_n, X_{n+1}, Y_{n+1}) | \mathcal{F}_n) \text{ and } H(q_n, X_{n+1}, Y_{n+1}) := h_n(q_n) + \xi_{n+1} .$$

Then,

$$T_n := q_n(x) + \sum_{j=1}^n \gamma_j h_{j-1}(q_{j-1}(x)) ,$$

is a martingale which is bounded in L^2 . So it converges almost surely.

- 2) We show the almost sure convergence of $(q_n)_n$:

- a) First, we check that (q_n) does not diverge to $+\infty$ or $-\infty$.
- b) Then, we prove that (q_n) converges almost surely to a finite limit.

- 3) We conclude by identifying the limit : $q^*(x)$, the conditional quantile.

Steps 2a), 2b) et 3) are shown by contradiction. The key point is that almost surely, after a certain rank, $h_n(q_n) > 0$. This property is ensured by Assumptions **A1** and **A2**. The entire proof is available in Section 5.

Comments on parameters. In the Theorem 5.2.4, we assume that $0 < \beta < 1$. $\beta > 0$ means that the number of neighbours goes to $+\infty$ and then, $\|X - x\|_{(k_n, n)} \rightarrow 0$. The condition $\beta < 1$ allows to apply the Lemma 5.5.4. It is a technical condition. The condition $\beta \geq \gamma$ can be understood in this way. When considering Algorithm (5.2), we deal with the *global learning rate* $\gamma_n = n^{-\gamma}$. In Algorithm (5.3), since for a fixed input x , there is not an update at each step n , we introduce the *effective learning rate* γ_{k_n} in the following way. At step k , $q_k(x)$ has a probability of k^β/k to be updated. Then, until time n , the algorithm is updated a number of times equal to

$$N = \sum_{k \leq n} k^{\beta-1} \sim n^\beta .$$

Thus, there were $N = n$ updates at time $n^{\frac{1}{\beta}}$. Then, in mean, it is as if the algorithm was defined by

$$q_{k_n}(x) = q_{k_n-1}(x) + \gamma_{k_n} \left(\mathbb{1}_{Y_{k_n} \geq q_{k_n}(x)} - \alpha \right) ,$$

with the learning rate

$$\gamma_{k_n} = \frac{1}{\left(n^{\frac{1}{\beta}}\right)^\gamma} = \frac{1}{n^{\frac{\gamma}{\beta}}} .$$

This is a well-known fact that this algorithm has a *good* behaviour if, and only if, the sum

$$\sum_n \gamma_{k_n} = \sum_n \frac{1}{n^{\frac{\gamma}{\beta}}} ,$$

is divergent. That is if, and only if $\beta > \gamma$. At last, the condition $\frac{1}{2} < \gamma < 1$ is a classical assumption on the Robbins Monro algorithm to be consistent (see for example in [80]). Here, we restrict the condition to $\gamma < 1$ because we need $1 > \beta \geq \gamma$.

5.2.3 Rate of convergence of the mean square error

Here, we study the rate of converge of the mean square error denoted by $a_n(x) := \mathbb{E} \left((q_n(x) - q^*(x))^2 \right)$.

Théorème 5.2.5. *Under hypothesis **A1**, **A2**, **A3** and **A4**, the mean square error $a_n(x)$ of the algorithm (5.3) satisfies the following inequality : $\forall (\gamma, \beta, \epsilon)$ such that $0 < \gamma \leq \beta < 1$ and $1 > \epsilon > 1 - \beta$, $\forall n \geq N_0 + 1$ where $N_0 = 2^{\frac{1}{\epsilon - (1 - \beta)}}$,*

$$a_n(x) \leq \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_{N_0})) C_1 + \sum_{k=N_0+1}^n \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_k)) d_k + C_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right) ,$$

where for $j \in \mathbb{N}^*$, $\kappa_j = \sum_{i=1}^j i^{-\epsilon-\gamma}$ and

$$d_n = C_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right) + 2\sqrt{C_1} M(x) C_3(d) \gamma_n \left(\frac{k_n}{n}\right)^{\frac{1}{d}+1} + \gamma_n^2 \frac{k_n}{n} .$$

Sketch of proof : The idea of the proof is to establish the recursive inequality on $a_n(x)$ (following [72]), that is for $n \geq N_0$,

$$a_{n+1}(x) \leq a_n(x)(1 - c_{n+1}) + d_{n+1}$$

where for all $n \in \mathbb{N}^*$, $0 < c_n < 1$ and $d_n > 0$. We conclude by using Lemma 5.5.7. In this purpose we begin by expanding the square

$$\begin{aligned} (q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 &= (q_n(x) - q^*(x))^2 + \gamma_{n+1}^2 \left[(1 - 2\alpha) \mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} + \alpha^2 \right] \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} \\ &\quad - 2\gamma_{n+1}(q_n(x) - q^*(x)) \left(\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)}. \end{aligned}$$

Taking the expectation conditionally to \mathcal{F}_n , and using the Bayes formula, we get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right) &\leq \mathbb{E}_n \left((q_n(x) - q^*(x))^2 \right) + \gamma_{n+1}^2 P_n \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) P_n \left[F_{Y B_n^{k_{n+1}}(x)}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x)) \right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

where $P_n = \mathbb{P}_n(X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x))$ as in Lemma 5.5.1 and $B_n^{k_{n+1}}(x)$ is the ball of \mathbb{R}^d centred in x and of radius $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}$. We rewrite this inequality to make appear two different errors :

- 1) First, the quantity $F_{Y B_n^{k_{n+1}}(x)}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x))$ represents the *bias error* (made because the sample is biased). Using **A1**, we get

$$\left| F_{Y B_n^{k_{n+1}}(x)}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x)) \right| \leq M(x) \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}.$$

and by **A3**, $|q_n(x) - q^*(x)| \leq \sqrt{C_1}$. Thus,

$$\begin{aligned} -2\gamma_{n+1}(q_n(x) - q^*(x)) P_n \left[F_{Y B_n^{k_{n+1}}(x)}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x)) \right] \\ \leq 2\gamma_{n+1} \sqrt{C_1} M(x) P_n \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}. \end{aligned}$$

- 2) The second quantity, $F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x))$ represents the *on-line learning error* (made by using a stochastic algorithm). Thanks to Assumption **A4** we get

$$(q_n - q^*) [F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x))] \geq C_2(x, \alpha) [q_n(x) - q^*(x)]^2.$$

Taking now the expectation of the inequality (5.5), we get

$$\begin{aligned} a_{n+1}(x) &\leq a_n(x) - 2\gamma_{n+1} C_2(x, \alpha) \mathbb{E} \left[(q_n(x) - q^*(x))^2 P_n \right] + \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}(P_{n+1}) \\ &\quad + 2\gamma_{n+1} M(x) \sqrt{C_1} \mathbb{E}(\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} P_n). \end{aligned}$$

This inequality reveals a problem : thanks to Lemmas 5.5.1 and 5.5.6 (and so thanks to assumption **A2**) we can deal with the two last terms, but we are not able to compute $\mathbb{E} \left[(q_n(x) - q^*(x))^2 P_n \right]$. To solve this problem, we use a truncated parameter ϵ_n . Instead of writing a recursive inequality on $a_n(x)$ we write such inequality with the quantity $b_n(x) := \mathbb{E} \left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{P_n > \epsilon_n} \right]$. Choosing $\epsilon_n = (n+1)^{-\epsilon}$, we have to tune an other parameter but thanks to **A3** and concentration inequalities (see lemma 5.5.4), it is easy to deduce a recursive inequality on $a_n(x)$ from the one on $b_n(x)$, for $n \geq N_0$.

Comments on the parameters. We choose $0 < \beta < 1$ for the same reasons as in Theorem 5.2.4. About γ , the inequality is true on the entire area $0 < \gamma < 1$ as soon as $\gamma \leq \beta$ (which is unusual, as you can see in [51] for example). We will nevertheless see in the sequel

that this is not because the inequality is true that $a_n(x)$ converges to 0. We will discuss later *good* choices for (γ, β) .

Compromise between the two errors. We can easily see the compromise we have to do on β to deal with the two previous errors. Indeed,

- The *bias error* gives the term

$$\exp\left(-2C_2(x, \alpha)(x) \sum_{k=N_0+1}^n \frac{1}{k^{\epsilon+\gamma}}\right),$$

of the inequality. This term decreases to 0 if and only if $\gamma + \epsilon < 1$ which implies $\beta > \gamma$. Then β has to be chosen not too small.

- The *on-line learning error* gives the term $(k_n/n)^{1/d+1} = n^{(1-\beta)(1+1/d)}$ in the remainder. For the remainder to decrease to 0 with the faster rate, we then need that β is as small as possible compared to 1. Then β has to be chosen not too big.

From this theorem, we can get the rate of convergence of the mean square error. In that purpose, we have to study the order of the remainder d_n in n to exhibit dominating terms. d_n is the sum of three terms. The exponential one is always negligence as soon as n is big enough because $1 > \epsilon$. The two other are powers of n . Comparing their exponent, we can find the dominating term in function of γ and β . Actually, there exists a rank $N_1(x, d)$ and some constants C_5 and $C_6(x, d)$ such that, for $n \geq N_0 + 1$,

- if $\beta \leq 1 - d\gamma$, we get

$$d_n \leq C_5 n^{-2\gamma+\beta-1}.$$

- if $\beta > 1 - d\gamma$, we get

$$d_n \leq C_6(x, d) n^{-\gamma+(1+\frac{1}{d})(\beta-1)}.$$

Copying that in the Theorem 5.2.5, we deduce the following result.

Corollaire 5.2.6. *Under assumptions of Theorem 5.2.5, there exists ranks $N_4(x, \alpha, d)$ and constants $C_7(x, \alpha, d)$ and $C_8(x, \alpha)$ such that $\forall n \geq N_4(x, \alpha, d)$,*

- when $\beta > 1 - d\gamma$ and $1 - \beta < \epsilon < \min\left(1 - \gamma, \left(1 + \frac{1}{d}\right)(1 - \beta)\right)$,

$$a_n(x) \leq \frac{C_7(d, x, \alpha, \epsilon, \gamma)}{n^{-\epsilon+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}}.$$

- When $\beta \leq 1 - d\gamma$, and $1 - \epsilon < \min(1 - \beta + \gamma, 1 - \gamma)$,

$$a_n(x) \leq \frac{C_8(x, \alpha)}{n^{\gamma-\beta+1-\epsilon}}.$$

Remarque 5.2.7. *For other values of γ and β , the derived inequalities do not imply the convergence to 0 of $a_n(x)$ this is why we do not present them.*

From this corollary we can derive *optimal* choices for (β, γ) , that is parameters for which our upper-bound on the mean square error decreases with the fastest rate.

Corollaire 5.2.8. *Under the same assumptions than in Theorem 5.2.5, the optimal parameters are $\gamma = \frac{1}{1+d}$ and $\beta = \gamma + \eta_\beta$ where $\eta_\beta > 0$ is as small as possible. With these parameters, there exists a constant $C_9(x, \alpha, d)$ such that $\forall n \geq N_4(x, \alpha, d)$,*

$$a_n(x) \leq \frac{C_9(x, \alpha, d)}{n^{\frac{1}{1+d} - \eta}}$$

where $\eta = \frac{\eta_\epsilon}{2} + \eta_\beta$ and $\eta_\epsilon = 1 - \beta - \epsilon$.

Comments on the constant $C_9(x, \alpha, d)$. Like all the other constants of this paper, we know the explicit expression of $C_9(x, \alpha, d)$. An example of values of this constant is given in Subsection 3.1.

We can notice that the constant $C_9(x, \alpha, d)$ depends on x only through $C_g(x)$ and $M(x)$. Nevertheless, often in practice, $C_g(x)$ and $M(x)$ do not really depend on x (see for example Subsection 3.1). In these cases (or when we can easily find a bound of $C_g(x)$ and $M(x)$ which do not depend on x), our result is uniform in x . Then, it is easy to deal with the integrated mean square error and conclude that

$$\int_X a_n(x) f_X(x) dx \leq \frac{C_9(\alpha, d)}{n^{\frac{1}{1+d} - \eta}}.$$

When α increases to 1, we try to estimate extremal quantile. $C_2(x, \alpha)$ becomes smaller and then $C_9(x, \alpha, d)$ increases. The bound gets worst. We can easily understand this phenomenon because when α is big, we have a small probability to sample on the right of the quantile, and the algorithm is then less powerful.

Let us now comment the dependency on the dimension d . The constant $C_9(x, d, \alpha)$ decreases when the dimension d increases. Nevertheless, this decreasing is too small to balance the behaviour of the rate of convergence which is in $n^{\frac{-1}{1+d}}$. This is an example of the curse of dimensionality.

Comment on the rank $N_4(x, \alpha, d)$. This rank is the maximum of four ranks. There are two kinds of ranks. The ranks $(N_i)_{i \neq 0}$ depend on constants of the problem but are reasonably small, because the largest of them is the rank after which exponential terms are smaller than power of n terms, or smaller power of n terms are smaller than bigger power of n terms. They are then often inferior to N_0 in practice. We only need this rank to find optimal parameters (and at this stage our reasoning is no more non-asymptotic).

The rank N_0 is completely different. It was introduced in the first theorem because we could not deal with $a_n(x)$ directly. In fact it is the rank after which the deviation inequality, allowing us to use $b_n(x)$, is true. It depends on the gap between ϵ and $1 - \beta$. The optimal ϵ to obtain the rate of convergence of the previous corollary is $\epsilon = 1 - \beta + \eta_\epsilon$ with η_ϵ as small as possible. The constant η_ϵ appears on the rank N_0 and also on the rate of convergence (let us suppose that $N_4 = N_0$ which is the case most of time)

$$\forall n \geq N_0 = \exp\left(2\eta_\epsilon^{-1}\right), \quad a_n(x) = \mathcal{O}\left(n^{\frac{-1}{1+d} + \frac{\eta_\epsilon}{2} + \eta_\beta}\right).$$

Then the smaller is η_ϵ , the faster is the rate of convergence, but also the larger is the rank after which inequalities are true.

Let us give an example. For a budget of $N = 1000$ calls to the code, one may choose $\eta_\epsilon = 0.3$ for the inequality to be theoretically true for $n = N$. The Table 5.1 gives the theoretical precision for different values of d and compares it with the ideal case where $\eta_\epsilon = 0$.

d	1	2	3
$\eta_\epsilon=0.3$	0.088	0.28	0.5
$\eta_\epsilon=0$	0.031	0.1	0.17

Table 5.1: Expected precision for the MSE when $N = 1000$

We can observe that, when $\eta_\epsilon > 0$, the precision increases with the dimension faster than when $\eta_\epsilon = 0$. Moreover, as soon as $\frac{1}{1+d} < \eta_\epsilon/2$ ($d = 6$ for our previous example), the result does not allow to conclude that a_n decreases to 0 with this choice of η_ϵ .

Nonetheless, simulations (see next part) seem to show that this difficulty is only an artifice of our proof (we needed to introduce ϵ_n because we do not know how to compute $\mathbb{E}((q_n - q^*)P_n)$, but it does not really exist when we implement the algorithm). In practice, the optimal rate of convergence for optimal parameters is reached early (see Section 3).

5.3 Numerical simulations

In this part we present some numerical simulations to illustrate our results. We consider simplistic examples so as to be able to evaluate clearly the strengths and the weaknesses of our algorithm. To begin with, we deal with dimension 1. We study two stochastic codes.

5.3.1 Dimension 1- square function

The first example is the very regular code

$$g(X, \epsilon) = X^2 + \epsilon$$

where $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$ and $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. We try to estimate the quantile of level $\alpha = 0.95$ for $x = 0.5$ and initialize our algorithm to $q_1 = 0.3$. Let us check that our assumptions are fulfilled in this case. We have $\mathcal{L}(g(x, \epsilon)) = \mathcal{U}([-\frac{1}{2} + x^2; \frac{1}{2} + x^2])$. Then

$$f_{(X,Y)}(u, v) = \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2}+u^2, \frac{1}{2}+u^2]}(v).$$

Moreover, the code function g takes its values in the compact set $[L_Y, U_Y] = [-\frac{1}{2}; \frac{3}{2}]$. Let us study assumption **A1**. Let B be an interval containing x , denoted $B = [x - a, x + b]$ ($a > 0$, $b > 0$), then

$$\begin{aligned} |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| &\leq \left| \frac{\int_{-\infty}^t \int_B f_{(X,Y)}(z, y) dy dz}{\int_B f_X(z) dz} - \int_{-\infty}^t f_{(X,Y)}(x, y) dy \right| \\ &\leq \frac{\int_{-\frac{1}{2}}^t \int_{x-a}^{x+b} \left| \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2}+z^2, \frac{1}{2}+z^2]} - \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2}+x^2, \frac{1}{2}+x^2]} \right| (y) dz dy}{\mu(B)}. \end{aligned}$$

Now, we have to distinguish the cases in function of the localization of t . There are lots of cases, but computations are nearly the same. That is why we will develop only one case here. When $t \in [-\frac{1}{2}; x^2 - \frac{1}{2}]$, we have

$$\begin{aligned}
 |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| &\leq \frac{\int_{x-a}^{x+b} \int_{-\frac{1}{2}}^t \left| \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2}+z^2; \frac{1}{2}+z^2]} - \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2}+z^2; \frac{1}{2}+z^2]} \right| (y)}{a+b} \\
 &= \frac{\int_{x-a}^{x+b} \left(\mathbb{1}_{z \geq x}(0) + \mathbb{1}_{z \leq x}(t - z^2 + \frac{1}{2}) \mathbb{1}_{z \geq \sqrt{t+\frac{1}{2}}} \right) dz}{a+b} \\
 &= \frac{\int_{x-a}^x (t + \frac{1}{2} - z^2) dz}{b+a}.
 \end{aligned}$$

There are again two different cases. Since $t \in [-\frac{1}{2}; x^2 - \frac{1}{2}]$, we always have $(t + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \leq x$. But the position of $(t + \frac{1}{2})^{1/2}$ relative to $(x - a)$ is not always the same. Then, if $t \in [-\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}(x - a)^2]$, we get

$$\begin{aligned}
 |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| &\leq \frac{\int_{x-a}^{x+b} (t - z^2 + \frac{1}{2}) dz}{b+a} \\
 &\leq (t + \frac{1}{2})a - \frac{x^3}{3} + \frac{(x-a)^3}{3} \\
 &\leq (x-a)^2 a - x^2 a + a^2 x - \frac{a^3}{3} \\
 &\leq -a^2 x + \frac{2a^3}{3} \\
 &\leq 0 + r_B \times 1^2 \times \frac{2}{3},
 \end{aligned}$$

as $0 < a < 1$. Finally, in this case, **A1** is true with $M(x) = 2/3$. We can compute exactly in the same way for the other cases and we always find an $M(x) \leq 2/3$. The assumption **A2** is also satisfied, taking $C_{input} = 1$. We have already explained that assumption **A3** is true for $[L_Y, U_Y] = [-1/2, 3/2]$. Finally assumption **A4** is also satisfied with $C_g(x) = 1$ and $C_2(x, \alpha) = 0.02$.

Almost sure convergence

Let us first deal with the almost sure convergence. We plot in Figure 5.1, for $(\beta, \gamma) \in [0, 1]^2$, the relative error of the algorithm. Best parameters are clearly in the area $\beta > \gamma \geq 1/2$. We can even observe that for $\beta \approx 1$, $\beta \leq \gamma$ or $\gamma < 1/2$, the algorithm does not converge almost surely (or very slowly). This is in accordance with our theoretical results. Nevertheless, we can observe a kind of continuity for γ around $1/2$: in practice, the convergence becomes really slow only when γ is significantly far away from $1/2$.

Mean Square Error (MSE)

Let us study the best choice of β et γ in terms of L^2 -convergence. We plot in Figures 5.2, the mean square error in function of γ and β (we estimate the MSE by a Monte Carlo method of 100 iterations).

Simulations confirm that the theoretical optimal area $\gamma = 0.5$ and $\beta = \gamma + \eta_\beta$ gives the smallest MSE. Nevertheless, it seems that in practice we can relax the condition that *the gap η_β between β and γ is as small as possible*. Indeed, when η_β is reasonably big, simulations show that we are still in the optimal area.

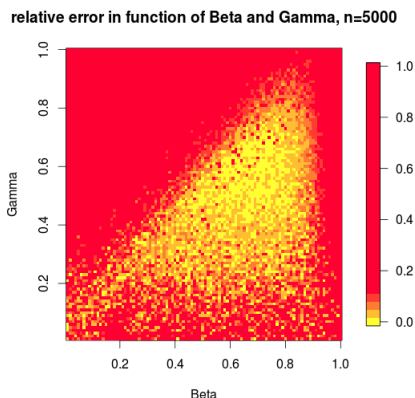


Figure 5.1: Relative error for $n = 5000$ in function of β and γ

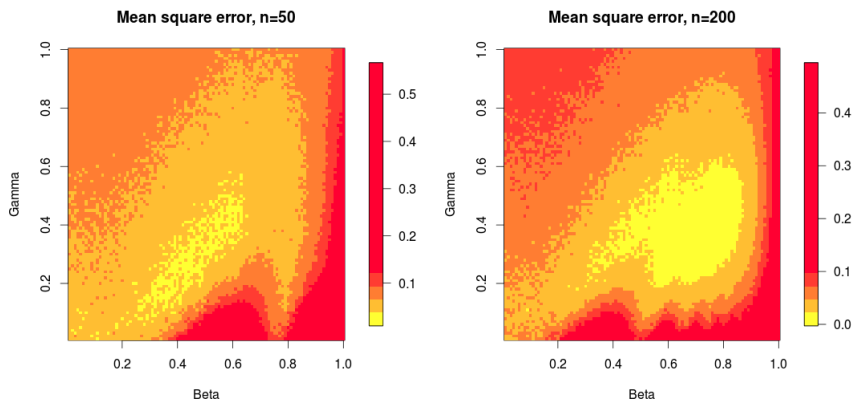


Figure 5.2: Mean square error in function of β and γ for the square function

Theoretical bound

In this case, we have at hand all the parameters to compute the theoretical bound of our theorems. In particular, in corollary 5.2.8, we get

$$a_n(x) \leq \frac{C_9(x, d, \alpha)}{n^{\frac{1}{1+d}-\eta}}.$$

Table 5.2 summarizes the value of the constants needed to compute the theoretical bound in this case.

Constant	α	$M(x)$	C_{input}	$C_g(x)$	$C_2(x, \alpha)$	$U_Y - L_Y$
Value	0.95	$\frac{2}{3}$	1	1	0.02	2
Constant	$\sqrt{C_1}$	$C_3(d)$	$C_4(d)$	$C_5(x, d)$	$C_6(x, d)$	$C_9(x, d, \alpha)$
Value	2.95	7.39	2	1.95	12	180

Table 5.2: Constant values

For $N = 1000$, we obtain the bound $a_N(x) \leq 5.8$ which is over-pessimistic compared to the practical results. We can then think to a way to improve this bound. First of all, the

constant $C_2(x, \alpha)$ is in fact not so small. Indeed, we have to take a margin in the proof, for the case where q_n goes out of $[L_Y, U_Y]$. This happens only with a very small probability. If we do not take this case into account, we have $C_2(x, \alpha) = 1$. Then $C_9(x, \alpha, d) \approx 3.7$ and then, for $N = 1000$, the bound is 0.11. Practical results are still better (we can observe that for $n = 50$ only, we have a MSE inferior to 0.05 !), but the gap is less important.

5.3.2 Dimension 1 - absolute value function

Let us see what happens when the function g is less smooth with respect to the first variable. We study the code

$$g(X, \epsilon) = |X| + \epsilon ,$$

where $X \sim \mathcal{U}([-1, 1])$ and $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. We want to study the conditional quantile in $x = 0$ (the point for which the differentiability fails). Assumptions can be checked as above. Since the almost surely convergence is true and gives really same kind of plots than the previous case, we only study the convergence of the MSE. In that purpose, we plot in Figure 5.3 the MSE (estimated by 100 iterations of Monte Carlo simulations) in function of γ and β , for $n=300$ (the discontinuity constraints us to make more iterations to have a sufficient precision) and $q_1 = 0.3$. Conclusions are the same than in the previous example concerning the best parameters. Nevertheless, we can observe that the lack of smoothness implies some strange behaviour around $\gamma = 1$.

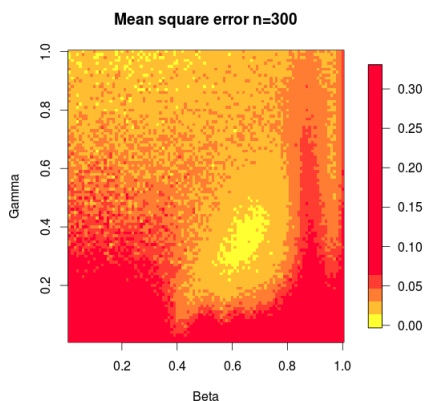


Figure 5.3: MSE in function of β and γ for absolut value function

5.3.3 Dimensions 2 and 3

In dimension d , we showed that theoretical optimal parameters are $\gamma = \frac{1}{1+d}$ and $\beta = \gamma + \eta$. To see what happens in practice, we still plot Monte Carlo estimations (200 iterations) of the MSE in function of γ and β .

Dimension 2

In dimension 2, we study two codes :

$$g_1(X, \epsilon) = ||X||^2 + \epsilon \text{ and } g_2(X, \epsilon) = X_1^2 + X_2 + \epsilon ,$$

where $X = (X_1, X_2) \sim \mathcal{U}([-1, 1]^2)$ and $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. In each case, we choose $n = 400$ and want to study the quantile in the input point $x = (0, 0)$ and initialize our algorithm in

$q_1 = 0.3$. In Figure 5.4, we can see that $\beta = 1$ and $\gamma = 1$ are still really bad parameters. As in our theoretical results, $\gamma = \frac{1}{1+d} = \frac{1}{3}$ seems to be the best choice. Nevertheless, even if it is clear that $\beta < \gamma$ is a bad choice, the experiments seems to show that best parameter β is strictly superior to γ , more superior than in theoretical case, where we take β as close as possible of γ . As we said before, in practice, N_0 seems not to be the true limit rank. Indeed, with only $n = 400$ iterations, in this case, the MSE, in the optimal parameters case reaches 0.06.

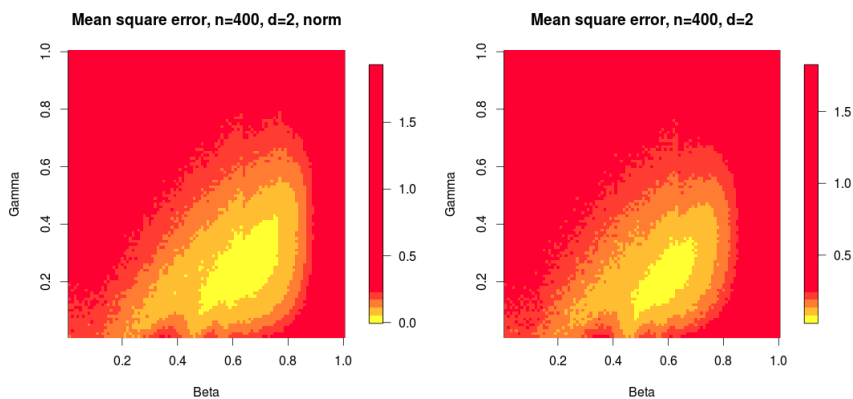


Figure 5.4: Mean square error in function of β and γ

Dimension 3

In dimension 3, we study the two codes

$$g_1(X, \epsilon) = \|X\|^2 + \epsilon \text{ and } g_2(X, \epsilon) = X_1^2 + X_2 + \frac{X_3^3}{2} + \epsilon ,$$

where $X = (X_1, X_2, X_3) \sim \mathcal{U}([-1, 1]^3)$ and $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. In each case, we choose $n = 500$ and want to study the quantile in the input point $(0, 0, 0)$. The interpretation of Figure 5.5 are the same than in dimension 2. The scale is not the same, the convergence is slower again but with $n = 500$ we nevertheless obtain a MSE of 0.10.

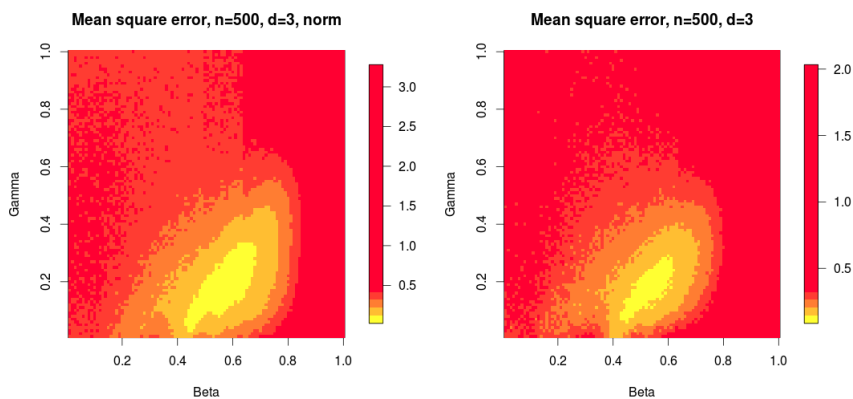


Figure 5.5: Mean square error in function of β and γ

5.4 Conclusion and perspectives

In this paper, we proposed a sequential method for the estimation of a conditional quantile of the output of a stochastic code where inputs lie in \mathbb{R}^d . We introduced a combination of k -nearest neighbours and Robins-Monro estimator. The algorithm thus elaborated had then two parameters to tune : the number of neighbours $k_n = \lfloor n^\beta \rfloor$ and the learning rate $\gamma_n = n^{-\gamma}$. Obtaining a bias-variance decomposition of the risk, we showed that our algorithm is convergent for $\frac{1}{2} < \gamma < \beta < 1$ and we studied its mean square error non-asymptotic rate of convergence. Moreover, we proved that we have to choose $\gamma = \frac{1}{1+d}$ and $\beta = \gamma + \eta_\beta$ ($\eta_\beta > 0$) to get the best rate of convergence. Numerical simulations have showed that our algorithm with theoretical optimal parameters is really powerful to estimate a conditional quantile, even in dimension $d > 1$.

The theoretical guarantees are shown under strong technical assumptions, but our algorithm is a general methodology to solve the problem. Relaxing the conditions will be the object of a future work. Moreover, the proof that we propose constrained us to use an artefact parameter ϵ which implies that the non-asymptotic inequality is theoretically true for big n , even if simulations confirm that this problem does not exist in practice. A second perspective is then to find a better way to prove this inequality for smaller n .

Finally, it is a very interesting future work to write non-asymptotic lower-bound for the mean square error of our algorithms.

5.5 Appendix 1 : Technical lemmas and proofs

5.5.1 Technical lemmas and notation

For sake of completeness, we start by recall and prove some well-known facts on order statistics.

Lemma 5.5.1. *When X has a density, denoting $P_n = \mathbb{P}(X \in kNN_{n+1}(x)|X_1, \dots, X_n)$, we have the following properties*

- 1) $P_n = F_{\|X-x\|} \left(\|X-x\|_{(k_{n+1}, n)} \right)$
- 2) $P_n \sim \beta(k_{n+1}, n - k_{n+1} + 1)$
- 3) $\mathbb{E}(P_n) = \frac{k_{n+1}}{n+1}$.
- 4) $\mathbb{E}(P_n^2) = \frac{2k_{n+1}n - k_{n+1}^2 + 3k_{n+1} + k_{n+1}n^2}{(n+1)^2(n+2)}$

where we denote $F_{\|X-x\|}$ the cumulative distribution function of the random vector $\|X-x\|$, $\|X-x\|_{(k_{n+1}, n)}$ the k_{n+1} order statistic of the sample $(\|X_1-x\|, \dots, \|X_n-x\|)$ and $\beta(k_{n+1}, n - k_{n+1} + 1)$ the beta distribution of parameters k_n and $n - k_{n+1} + 1$.

Proof. Conditionally to X_1, \dots, X_n , the event $\{X \in kNN_{n+1}(x)\}$ is equivalent to the event $\{\|X-x\| \leq \|X-x\|_{(k_{n+1}, n)}\}$. Then,

$$\begin{aligned} P_n &= \mathbb{P}(X \in kNN_{n+1}(x)|X_1 \dots X_n) \\ &= \mathbb{P}_X \left(\|X-x\| \leq \|X-x\|_{(k_{n+1}, n)} | X_1 \dots X_n \right) \\ &= F_{\|X-x\|} \left(\|X-x\|_{(k_{n+1}, n)} \right) . \end{aligned}$$

Since X has a density, the cumulative distribution function $F_{\|X-x\|}$ is continuous. Indeed, using the sequential characterization we get for a sequence (t_n) converging to t

$$\begin{aligned} F_{\|X-x\|}(t_n) &= \mathbb{P}(X \in B_d(x, t_n)) \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} f(z) \mathbb{1}_{B_d(x, t_n)}(z) \, dz. \end{aligned}$$

Since f is integrable, the Lebesgue theorem allows us to conclude that

$$\lim_n \int_{\mathbb{R}^d} f(z) \mathbb{1}_{B_d(x, t_n)}(z) \, dz = \int_{\mathbb{R}^d} \lim_n f(z) \mathbb{1}_{B_d(x, t_n)}(z) \, dz = \mathbb{P}(X \in B_d(x, t)),$$

so the cumulative distribution function is continuous. Then thanks to classical result on statistics order and quantile transform (see [35]), we get

$$P_n = F_{\|X-x\|} \left(\|X-x\|_{(k_{n+1}, n)} \right) \sim U_{(k_{n+1}, n)} \sim \beta(k_{n+1}, n - k_{n+1} + 1),$$

where we denoted $U_{(k_{n+1}, n)}$ the k_{n+1} statistic order of a independent sample of size n distributed like a uniform law on $[0, 1]$. \square

Let us now recall some deviation results.

Lemma 5.5.2. *We denote $\mathcal{B}(n, p)$ the binomial distribution of parameters n and p , for $n \geq 1$ and $p \in [0, 1]$. Then, if $Z \sim \mathcal{B}(n, p)$, we get*

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(\frac{Z}{n} < \frac{p}{2} \right) &\leq \exp \left(-\frac{3np}{32} \right), \\ \mathbb{P} \left(\frac{Z}{n} > 2p \right) &\leq \exp \left(-\frac{3np}{8} \right). \end{aligned}$$

Proof. Let (Z_i) be an independent sample of Bernoulli of parameter p and let

$$Z = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Z_i.$$

We apply the Bernstein's inequality (see Theorem 8.2 of [38]) to conclude that

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Z - p < -\epsilon p) &\leq \exp \left(-\frac{3np\epsilon^2}{8} \right), \\ \mathbb{P}(Z - p > \epsilon p) &\leq \exp \left(-\frac{3np\epsilon^2}{8} \right). \end{aligned}$$

The results follow by taking $\epsilon = \frac{1}{2}$ in the first case and $\epsilon = 1$ in the second case. \square

We now give some technical lemma useful to prove our main results.

Lemma 5.5.3. *Suppose $\beta \geq \gamma$. Then, for $C \geq 3$, we get*

$$\mathbb{P} \left(\sum_n \gamma_n \mathbb{1}_{X_n \in kNN_n(x)} \leq C \right) = 0.$$

Proof. First, it is a well known result (see [35]) that if $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$, then $X \stackrel{\mathcal{L}}{=} F^{-1}(U)$. Since F is non-decreasing, we get

$$\mathbb{1}_{U_n \in kNN_n(x)} = \mathbb{1}_{F^{-1}(U_n) \in kNN_n(F(x))} \text{ a.s.}$$

So that, it is enough to show the result for $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$.

Let x be a real number in $[0, 1]$. Let ϵ be a positive real number. Let n_0 be an integer such that

$$\sum_{n \geq n_0} \exp\left(-\frac{3k_n}{16}\right) \leq \epsilon. \quad (5.6)$$

Let n_1^x be the integer such that if $x \in \{0, 1\}$, $n_1^x = 1$ and if $x \in]0, 1[$, for $n \geq n_1^x$,

$$\begin{cases} \frac{k_n}{2n} + x \leq 1, \\ x - \frac{k_n}{2n} \geq 0. \end{cases}$$

We denote $N := \max(n_0, n_1^x)$. We set

$$\Omega := \left\{ \forall n \geq N, \sum_{j=1}^n \mathbb{1}_{|X_j - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \leq k_n \right\}.$$

On this event, for every $n \geq N$, there are at most k_n elements X_i such that $|X_i - x|$ is inferior to $\frac{k_n}{4n}$. Thus, if an element satisfies $|X_j - x| \leq \frac{k_n}{4n}$, it belongs to the k_n -nearest neighbours of x . Then,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\bar{\Omega}) &\leq \sum_{n \geq N} \mathbb{P}\left(\sum_{j=1}^n \mathbb{1}_{|X_j - x| \leq \frac{k_n}{4n}} > k_n\right) \\ &=: \sum_{n \geq N} \mathbb{P}(Z_n > k_n) \\ &= \sum_{n \geq N} \mathbb{P}\left(\frac{\mathcal{B}(n, p)}{n} > \frac{k_n}{n}\right). \end{aligned} \quad (5.7)$$

where, since $n \geq n_1^x$,

$$\begin{aligned} p &= \mathbb{P}\left(|X - x| \leq \frac{k_n}{4n}\right) \\ &= \begin{cases} \mathbb{P}\left(-\frac{k_n}{n} + x \leq X \leq \frac{k_n}{n} + x\right) & \text{if } x \in]0, 1[\\ \mathbb{P}\left(X \leq \frac{k_n}{4n}\right) & \text{if } x = 0 \\ \mathbb{P}\left(X \leq 1 - \frac{k_n}{4n}\right) & \text{if } x = 1 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{k_n}{2n} & \text{if } x \in]0, 1[\\ \frac{k_n}{4n} & \text{otherwise} \end{cases} \\ &\leq \frac{k_n}{2n}. \end{aligned}$$

Then, Equation (5.7) gives

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}(\bar{\Omega}) &\leq \sum_{n \geq N} \mathbb{P} \left(\sum_{j=1}^n \mathbb{1}_{|X_j - x| \leq \frac{k_n}{4n}} > k_n \right) \\
 &\leq \mathbb{P} \left(\frac{\mathcal{B} \left(n, \frac{k_n}{2n} \right)}{n} > \frac{k_n}{n} \right) \\
 &\leq \exp \left(-\frac{3k_n}{16} \right) \leq \epsilon .
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

where we used the second inequality of Lemma 5.5.2 and the Equation (5.6). But, as we noticed above, on the event Ω , we have

$$\mathbb{1}_{X_n \in kNN_n(x)} \geq \mathbb{1}_{|X_n - x| \leq \frac{k_n}{4n}} .$$

Finally,

$$\mathbb{P} \left(\Omega \cap \sum_{n \geq N} \gamma_n \mathbb{1}_{X_n \in kNN_n(x)} \leq C \right) \leq P \left(\sum_{n \geq N} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_n - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \leq C \right) . \tag{5.9}$$

Let now $(I_k)_k$ be a partition of $[|N, +\infty|]$ such that

$$\forall k \geq 1, \sum_{n \in I_k} \gamma_n \frac{k_n}{4n} \in [2C, 2C + 1] .$$

Such a partition exists since, as $\beta \geq \gamma$, the sum $\sum_n \gamma_n \frac{k_n}{n}$ is divergent. Then,

$$\text{Var} \left[\sum_{n \in I_k} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_k - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \right] \leq \mathbb{E} \left[\sum_{n \in I_k} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_k - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \right] \leq 2C + 1 .$$

The Chebyshev's inequality gives

$$\mathbb{P} \left(\sum_{n \in I_k} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_k - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \leq C \right) \leq \frac{2C + 1}{C^2} \leq \frac{7}{9} < 1 ,$$

since $C \geq 3$.

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P} \left(\bigcap_k \left\{ \sum_{n \in I_k} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_n - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \right\} \leq C \right) &= 0 . \\
 \mathbb{P} \left(\sum_{n \geq N} \gamma_n \mathbb{1}_{|X_n - x| \leq \frac{k_n}{4n}} \leq C \right) &= 0 .
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Thanks to (5.7), (5.9) and (5.10), we get

$$\mathbb{P} \left(\sum_{n \geq N} \gamma_n \mathbb{1}_{X_n \in kNN_n(x)} \leq C \right) \leq \mathbb{P}(\bar{\Omega}) + 0 \leq \epsilon ,$$

which holds for all $\epsilon > 0$. □

Lemma 5.5.4. *Denoting A_n the event $\{X_1, \dots, X_n \mid P_n > \epsilon_n\}$ where $\epsilon_n = \frac{1}{(n+1)^\epsilon}$ and the parameter ϵ satisfies $1 > \epsilon > 1 - \beta$, we have for $n \geq 1$,*

$$\mathbb{P}(A_n^C) \leq \exp\left(-\frac{3(n+1)^{1-\epsilon}}{8}\right).$$

Proof. Thanks to the Lemma 5.5.1, we obtain

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A_n^C) &= \mathbb{P}(\beta(k_{n+1}, n - k_{n+1}) \geq \epsilon_n) \\ &= I_{\epsilon_n}(k_{n+1}, n - k_{n+1}), \end{aligned}$$

where we denote I_ϵ the incomplete β function. A classical result (see [1]) allows us to write this quantity in terms of the binomial distribution

$$\mathbb{P}(A_n^C) = \mathbb{P}(\mathcal{B}(n, \epsilon_n) \geq k_{n+1}).$$

Thanks to Lemma 5.5.2, we know that

$$\mathbb{P}(\mathcal{B}(n+1, \epsilon_n) \geq k_{n+1}) \leq \exp\left(-\frac{3(n+1)\epsilon_{n+1}}{8}\right) \leq \exp\left(-\frac{3(n+1)^{1-\epsilon}}{8}\right),$$

as soon as $k_{n+1}/(n+1) \geq 2\epsilon_n$, which is true as soon as $n \geq 2^{1/(\epsilon-(1-\beta))}$ because $\epsilon > 1 - \beta$. \square

Lemma 5.5.5. *Under hypothesis of Theorem 5.2.4, $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}$ converges almost surely to 0.*

Proof. Let u be a positive number.

$$\begin{aligned} p_u &:= \mathbb{P}(X \in \mathcal{B}(x, u)) = \int_{\mathcal{B}(x, u)} f(t) dt \\ &\geq \mu_X(\mathcal{B}(x, u)) = C_1 \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \\ &= C_{input} C_4(d) u^d =: q_u. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Let Z be a random variable of law $\mathcal{B}(n, p_u)$. Since $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} > u$ implies that there are at the most k_{n+1} elements of the sample which satisfy $X \in \mathcal{B}(x, q_u)$, we get :

$$\mathbb{P}(\|X - x\|_{(k_{n+1})} > u) = \mathbb{P}(Z < k_{n+1}).$$

Thanks to equation (5.11), and denoting \tilde{Z} a random variable of law $\mathcal{B}(n, q_u)$, we have

$$\mathbb{P}(\|X - x\|_{(k_{n+1})} > u) \leq \mathbb{P}(\tilde{Z} < k_{n+1}).$$

Lemma 5.5.2 implies that $\mathbb{P}(\|X - x\|_{(k_{n+1})} > u)$ is the general term of a convergent sum. Indeed, when n is large enough, then $k_{n+1}/n < q_u/2$ because k_{n+1}/n converges to 0 ($\beta < 1$). The Borel-Cantelli Lemma then implies that $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}$ converges almost surely to 0. \square

Lemma 5.5.6. *With the same notation as above,*

$$\mathbb{E}(P_n \mid \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}) \leq C_3(d) \left(\frac{k_{n+1}}{n+1}\right)^{1+\frac{1}{d}}.$$

Proof. Let us denote \tilde{F} and \tilde{f} the cumulative and density distribution function of the law of $\|X - x\|$.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\|X - x\|_{(k_{n+1},n)} P_n) &= \mathbb{E} \left(\|X - x\|_{(k_{n+1},n)} \tilde{F} \left(\|X - x\|_{(k_{n+1},n)} \right) \right) \\ &= \int y \tilde{F}(y) f_{\|X-x\|_{(k_{n+1},n)}}(y) dy, \end{aligned}$$

with

$$f_{\|X-x\|_{(k_{n+1},n)}}(y) = \frac{n!}{(k_{n+1} - 1)!(n - k_{n+1})!} \tilde{F}(y)^{k_{n+1}-1} (1 - \tilde{F}(y))^{n-k_{n+1}} \tilde{f}(y).$$

Then we get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\|X - x\|_{(k_{n+1},n)} P_n) &= \int y \tilde{F}(y)^{k_{n+1}} (1 - \tilde{F}(y))^{n-k_{n+1}} \tilde{f}(y) \frac{n!}{(k_{n+1} - 1)!(n - k_{n+1})!} \\ &= \frac{k_{n+1}}{n+1} \mathbb{E} \left(\|X - x\|_{(k_{n+1}+1, n+1)} \right). \end{aligned}$$

We denote $U_{|\cdot|}$ the upper bound of the support of $\|X - x\|$, and write

$$\mathbb{E}(\|X - x\|_{(k_{n+1}+1, n+1)}) = \int_0^{U_{|\cdot|}} \mathbb{P}(\|X - x\|_{(k_{n+1}+1, n+1)} > u) du.$$

Using same arguments that in Lemma 5.2.4, denoting $C_{10}(d) = \sqrt[d]{\frac{2(k_{n+1}+1)}{(n+1)C_{input}C_4(d)}}$, we get

$$\begin{aligned} I &:= \int_0^{U_{|\cdot|}} \mathbb{P}(\|X - x\|_{(k_{n+1}+1, n+1)} > u) du = \int_0^{C_{10}(d)} \mathbb{P}(\mathcal{B}(n+1, q_u) < k_{n+1} + 1) du \\ &\quad + \int_{C_{10}(d)}^{U_{|\cdot|}} \mathbb{P}(\mathcal{B}(n+1, q_u) < k_{n+1} + 1) du \\ &\leq \int_0^{C_{10}(d)} 1 du + \int_{C_{10}(d)}^{U_{|\cdot|}} \exp \left(-\frac{3(n+1)C_{input}C_4(d)u^d}{32} \right) du, \end{aligned}$$

where we use Lemma 5.5.2 in the second integral because $u > C_{10}(d)$ implies $\frac{k_{n+1}+1}{n+1} < \frac{q_u}{2}$. Then, we obtain

$$\begin{aligned}
I &\leq C_{10}(d) + \int_{C_{11}(d)}^{+\infty} \exp\left(-\frac{3(n+1)C_{input}C_4(d)u^d}{32}\right) du \\
&\leq C_{10}(d) + \int_0^{+\infty} \frac{u^{d-1}}{C_{10}(d)^{d-1}} \exp\left(-\frac{3(n+1)C_{input}C_4(d)u^d}{32}\right) du \\
&= C_{10}(d) + \frac{C_{11}(d)}{C_{10}(d)^d} \frac{32}{3(n+1)dC_{input}C_4(d)} \left[-\exp\left(-\frac{3(n+1)C_{input}C_4(d)u^d}{32}\right)\right]_0^{+\infty} \\
&= C_{10}(d) \left(1 + \frac{3(n+1)dC_{input}C_4(d)}{32C_{10}(d)^d}\right) \\
&= \sqrt[d]{\frac{2(k_{n+1}+1)}{(n+1)C_{input}C_4(d)}} \left(1 + \frac{16}{3d(k_{n+1}+1)}\right) \\
&= \sqrt[d]{\frac{k_{n+1}}{n+1}} \left[\sqrt[d]{\frac{2}{C_{input}C_4(d)}} \sqrt[d]{\frac{k_{n+1}+1}{k_{n+1}}} \left(1 + \frac{16}{3d(k_{n+1}+1)}\right) \right] \\
&\leq \sqrt[d]{\frac{k_{n+1}}{n}} \sqrt[d]{\frac{4}{C_{input}C_4(d)}} \left(1 + \frac{8}{3d}\right) \\
&=: C_3(d) \sqrt[d]{\frac{k_{n+1}}{n+1}},
\end{aligned}$$

because for $n \geq 1$, we get $k_n \geq 1$. □

Lemma 5.5.7. *Let (b_n) be a real sequence. If there exist sequences $(c_n)_{n \geq 1} \in [0, 1]^{\mathbb{N}}$ and $(d_n)_{n \geq 1} \in]0, +\infty[^{\mathbb{N}}$ such that*

$$\forall n \geq N_0, b_{n+1} \leq b_n(1 - c_{n+1}) + d_{n+1},$$

then for all $n \geq N_0 + 1$,

$$\forall n, b_n \leq \exp\left(-\sum_{k=1}^n N_0 + 1c_k\right) b_{N_0} + \sum_{k=N_0+1}^n \exp\left(-\left(\sum_{j=1}^n c_j - \sum_{j=1}^k c_j\right)\right) d_k.$$

Proof. This inequality appears in [72] and references therein. It can be proved by induction using that $\forall x \in]0, +\infty[, \exp(x) \geq 1 + x$. □

Let us first prove the following consequence of Assumption **A3**.

Lemma 5.5.8. *Under assumption **A3**, if $\beta \geq \gamma$, then for all x and for all $n \geq 1$,*

$$q_n(x) \in [L_Y - (1 - \alpha), U_Y + \alpha], a.s.$$

Proof. Suppose that $q_n(x)$ leaves the compact set $[L_Y, U_Y]$ by the right at step N_0 . By definition, $q_{N_0-1} \leq U_Y$ and consequently $q_{N_0} \leq U_Y + \alpha\gamma_{N_0}$. At next step, since $q_{N_0} > U_Y$, we have $Y_{N_0+1} \leq q_{N_0}$ and then

$$q_{N_0+1} \leq U_Y + \alpha\gamma_{N_0} - (1 - \alpha)\gamma_{N_0+1} \mathbb{1}_{X_{N_0+1} \in kNN_{N_0+1}(x)}.$$

Then, the algorithm either does not move (if $X_{N_0+1} \notin kNN_{N_0+1}(x)$) or comes back in direction of $[L_Y, U_Y]$ with a step of $(1 - \alpha)\gamma_{N_0+1}$. Then, if

$$\sum_{n \geq 0} \gamma_n \mathbb{1}_{X_n \in kNN_n(x)} = +\infty \text{ a.s.},$$

the algorithm almost surely comes back to the compact set $[L_Y, U_Y]$. Thanks to Lemma 5.5.3, we know that, since $\beta \geq \gamma$, the previous sum diverges almost surely. A similar result holds when the algorithm leaves the compact set by the left and finally we have shown that almost surely,

$$q_n(x) \in [L_Y - (1 - \alpha), U_Y + \alpha] =: [L_{q_n}, U_{q_n}].$$

□

5.5.2 Proof of Theorem 5.2.4 : almost sure convergence

To prove this theorem, we adapt the classical analysis of the Robbins-Monro algorithm (see [14]). In the sequel we do not write $q_n(x)$ but q_n to make the notation less cluttered.

Martingale decomposition

In this sequel, we still denote $H(q_n, X_{n+1}, Y_{n+1}) := (\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n - \alpha}) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)}$, $\mathcal{F}_n = \sigma(X_1, \dots, X_n, Y_1, \dots, Y_n)$ and \mathbb{P}_n and \mathbb{E}_n the probability and expectation conditionally to \mathcal{F}_n . We introduce

$$\begin{aligned} h_n(q_n) &:= \mathbb{E}(H(q_n, X_{n+1}, Y_{n+1}) | \mathcal{F}_n) \\ &= \mathbb{P}_n(Y_{n+1} \leq q_n \cap X_{n+1} \in kNN_n(x)) - \alpha \mathbb{P}_n(X_{n+1} \in kNN_n(x)) \\ &= P_n \left[\left(F_{Y^{kNN_{n+1}(x)}}(q_n) - F_{Y^x}(q^*) \right) \right]. \end{aligned}$$

Then,

$$T_n = q_n + \sum_{j=1}^n \gamma_j h_{j-1}(q_{j-1}) = q_0(x) - \sum_{j=1}^n \gamma_j \xi_j,$$

with $\xi_j = H(q_{j-1}, X_j, Y_j) - h_{j-1}(q_{j-1})$ is a martingale. It is bounded in $\mathbb{L}^2(\mathbb{R})$. Since

$$\sup_n |\xi_n| \leq \alpha + (1 + \alpha) = 1 + 2\alpha,$$

the Burkholder inequality gives the existence of a constant C such that

$$\mathbb{E}(|T_n|^2) \leq \mathbb{E} \left(\left(\sum_{j=1}^n \gamma_j \xi_j \right)^2 \right) \leq C \mathbb{E} \left(\left| \sum_{j=1}^n (\gamma_j \xi_j)^2 \right|^2 \right) \leq C(1 + 2\alpha) \sum_{j=1}^n \gamma_j^2 < \infty.$$

The sequence (q_n) converges almost surely

First, let us prove that

$$\mathbb{P}(q_n \rightarrow \infty) + \mathbb{P}(q_n \rightarrow -\infty) = 0. \quad (5.12)$$

Let us suppose that this probability is positive (we name Ω_1 the non-negligible set where $q_n(\omega)$ diverges to $+\infty$ and the same arguments would show the result when the limit is $-\infty$). Let ω be in Ω_1 . We have $q_n(\omega) \leq q^*$ for only a finite number of n .

Let us show that on an event $\Omega \subset \Omega_1$ with positive measure, for n large enough, $h_n(q_n(\omega)) > 0$. First, we know that P_n follows a Beta distribution. This is why $\forall n$, $\mathbb{P}(P_n = 0) = 0$. Then, the Borel-Cantelli Lemma gives that

$$\mathbb{P}(\exists N \forall n \geq N P_n > 0) = 1.$$

As Ω_1 has a positive measure, we know that there exists $\Omega_2 \subset \Omega_1$ with positive measure such that $\forall \omega \in \Omega_2$, $q_n(\omega) \rightarrow +\infty$ and for all n large enough, $P_n(\omega) > 0$. Since

$$h_n(q_n(\omega)) = P_n \left(F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - \alpha \right) ,$$

we have now to show that on $\Omega \subset \Omega_2$ of positive measure,

$$F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - \alpha > 0 .$$

As $q_n(\omega)$ diverges to $+\infty$, we can find D such that for n large enough, $q_n(\omega) > D > q^*$. Then,

$$\begin{aligned} F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - \alpha &= F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - F_{Y^x}(q^*) \\ &= F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(D) + F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(D) - F_{Y^x}(D) \\ &\quad + F_{Y^x}(D) - F_{Y^x}(q^*) . \end{aligned}$$

First, $F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(q_n(\omega)) - F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(D) \geq 0$ because a cumulative distribution function is non-decreasing. Then, we set $\eta = F_{Y^x}(D) - F_{Y^x}(q^*)$ which is a finite value. To deal with the last term, we use our assumption **A1**.

$$F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(D) - F_{Y^x}(D) \geq -M(x) \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} .$$

We know, thanks to Lemma 5.5.5, that $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}$ converges almost surely to 0. Then, there exists a set $\Omega_3 \subset \Omega_1$ of probability strictly non-negative such that for all ω in Ω_3 , the previous reasoning is true. And for $\epsilon < \frac{\eta}{L}$, there exists rank $N(\omega)$ such that if $n \geq N$,

$$F_{Y^{B_n^{k_{n+1}(x)}}}(D) - F_{Y^x}(D) \geq 0 - L\epsilon + \eta > 0 . \tag{5.13}$$

Finally, for $\omega \in \Omega_3$ (set of strictly non-negative measure), we have shown that after a certain rank, $h_n(q_n(\omega)) > 0$. This implies that on Ω_3 of positive measure,

$$\lim_n \left[q_n(\omega) + \sum_{j=1}^n \gamma_{j-1} h_{j-1}(q_{j-1}(\omega)) \right] = +\infty ,$$

which is absurd because in the previous part we proved that T_n is almost surely convergent. Then q_n does not diverge to $+\infty$ or $-\infty$.

Now, we will show that (q_n) converges almost surely. In all the sequel of the proof, we reason ω by ω like in the previous part. To make the reading more easy, we do not write ω and Ω any more. Thanks to Equation (5.12) and to the previous subsection, we know that, with probability positive, there exists a sequence (q_n) such that

$$\left\{ \begin{array}{l} (a) \ q_n + \sum_{j=1}^n \gamma_{j-1} h_{j-1}(q_{j-1}) \text{ converges to a finite limit} \\ (b) \ \liminf q_n < \limsup q_n . \end{array} \right.$$

Let us suppose that $\limsup q_n > q^*$ (we will find a contradiction, the same argument would allow us to conclude in the other case). Let us choose c and d satisfying $c > q^*$ and $\liminf q_n < c < d < \limsup q_n$. Since the sequence (γ_n) converges to 0, and since (T_n) is a Cauchy sequence, we can find a deterministic rank N and two integers n and m such that $N \leq n < m$ implies

$$\begin{cases} (a) \gamma_n \leq \frac{(d-c)}{3(1-\alpha)} \\ (b) \left| q_m - q_n - \sum_{j=n}^{m-1} \gamma_j h(q_{j-1}) \right| \leq \frac{d-c}{3} . \end{cases}$$

We choose m and n so that

$$\begin{cases} (a) N \leq n < m \\ (b) q_n < c, q_m > d \\ (c) n < j < m \Rightarrow c \leq q_j \leq d . \end{cases} \quad (5.14)$$

This is possible since beyond N , the distance between two iterations will be either

$$\alpha \gamma_n \leq \frac{\alpha(d-c)}{3(1-\alpha)} < (d-c) ,$$

because $\alpha < \frac{3}{5}$ or

$$(1-\alpha)\gamma_n \leq \frac{1}{3}(d-c) < (d-c) .$$

Moreover, since c and d are chosen to have an iteration inferior to c and an iteration superior to b , the algorithm will necessarily go through the segment $[c, d]$. We then take n and m the times of enter and exit of the segment. Now,

$$\begin{aligned} q_m - q_n &\leq \frac{d-c}{3} + \sum_{j=n}^{m-1} \gamma_{j+1} h_j(q_j) \\ &\leq \frac{d-c}{3} + \gamma_{n+1} h_n(q_n) , \end{aligned}$$

because $n < j < m$, we get $q^* < c < q_j$ and we have already shown that in this case, $h_j(q_j) > 0$. We then only have to deal with q_n . If $q_n > q^*$, we can apply the same result and then

$$q_n - q_n \leq \frac{d-c}{3} ,$$

which is in contradiction with (b) of equation (5.14). When $q < q^*$,

$$\begin{aligned} q_m - q_n &\leq \frac{d-c}{3} + \gamma_n h(q_{n-1}) \\ &\leq \frac{d-c}{3} + \gamma_n(1-\alpha) \\ &\leq \frac{d-c}{3} + \frac{d-c}{3} < (d-c) , \end{aligned}$$

which is still a contradiction with (b) of (5.14). We have shown that the algorithm converges almost surely.

The algorithm converges almost surely to q^*

Again we reason by contradiction. Let us name q the limit such that $\mathbb{P}(q \neq q^*) > 0$. With positive probability, we can find a sequel (q_n) which converges to q such that

$$\begin{cases} (a) & q^* < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \infty \\ (b) & \epsilon_1 < q < \epsilon_2, \end{cases}$$

(or $-\infty < \epsilon_1 < \epsilon_2 < q^*$ but arguments are the same in this case). Then, for n large enough, we get

$$\epsilon_1 < q_n < \epsilon_2.$$

Finally, on the one hand, (T_n) and (q_n) are convergent, and we also know that the sum $\sum \gamma_{j+1}h(q_j)$ converges almost surely. Let us then show that on the other hand, $h_n(q_n) = P_n(F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n) - \alpha)$ is lower bounded. First we know thanks to Lemma 5.5.4, that for $1 < \epsilon < 1 - \beta$ and $\epsilon_n = \frac{1}{(n+1)^\epsilon}$,

$$\mathbb{P}(P_n \leq \epsilon_n) \leq \exp\left(-\frac{3(n+1)^{1-\epsilon}}{8}\right).$$

This is the general term of a convergent sum. Therefore, the Borel-Cantelli Lemma gives

$$\mathbb{P}(\exists N \forall n \geq N P_n > \epsilon_n) = 1.$$

Moreover, as we have already seen in Equation (5.13), since $q_n > \epsilon_1 > q^*$,

$$F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n) - \alpha \geq 0 - M(x)\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} + F_{Y^x}(\epsilon_1) - F_{Y^x}(q^*).$$

Then, when n is large enough so that

$$\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} \leq \frac{F_{Y^x}(\epsilon_1) - F_{Y^x}(q^*)}{2M(x)}$$

holds, we have

$$F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n) - \alpha \geq \frac{F_{Y^x}(\epsilon_1) - F_{Y^x}(q^*)}{2}.$$

Finally there exists a set Ω of positive probability such that, $\forall \omega \in \Omega$

$$\sum_{k=1}^n \gamma_{k+1}h_k(q_k) \geq \frac{F_{Y^x}(\epsilon_1) - F_{Y^x}(q^*)}{2} \sum_{k=1}^n \gamma_{k+1}P_k \geq \sum_{k=1}^n \frac{1}{(n+1)^{\gamma+\epsilon}},$$

which is a contradiction (with the one hand point) because the sum is divergent ($\gamma + \epsilon < 1$).

5.5.3 Proof of Theorem 5.2.5 : Non-asymptotic inequality on the mean square error.

Let x be fixed in $[0, 1]$. We want to find an upper-bound for the mean square error $a_n(x)$ using Lemma 5.5.7. In the sequel, we will need to study $q_n(x)$ on the event A_n of the Lemma 5.5.4. Then, we begin to find a link between $a_n(x)$ and the mean square error on this event.

$$\begin{aligned} a_n(x) &= \mathbb{E}\left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{A_n}\right] + \mathbb{E}\left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{A_n^C}\right] \\ &\leq \mathbb{E}\left[(q_n - q^*)^2 \mathbb{1}_{A_n}\right] + C_1 \mathbb{P}(A_n^C) \\ &\leq \mathbb{E}\left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{A_n}\right] + C_1 \exp\left(-\frac{3(n+1)^{1-\epsilon}}{8}\right), \\ &\leq \mathbb{E}\left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{A_n}\right] + C_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right), \end{aligned} \tag{5.15}$$

thanks to Lemma 5.5.4 and for $n \geq N_0$.

Let us now study the sequence $b_n(x) := \mathbb{E} \left[(q_n(x) - q^*)^2 \mathbb{1}_{A_n} \right]$. First, for $n \geq 0$,

$$b_{n+1}(x) \leq \mathbb{E} \left[(q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right].$$

But,

$$\begin{aligned} (q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 &= (q_n(x) - q^*(x))^2 + \gamma_{n+1}^2 \left[(1 - 2\alpha) \mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} + \alpha^2 \right] \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) \left(\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)}. \end{aligned}$$

Taking the expectation conditional to \mathcal{F}_n , we get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right) &\leq \mathbb{E}_n \left((q_n(x) - q^*(x))^2 \right) + \gamma_{n+1}^2 \mathbb{P}_n \left(X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x) \right) \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) \left[\mathbb{P}_n \left(Y_{n+1} \leq q_n(x) \cap X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x) \right) \right. \\ &\quad \left. \times \mathbb{P}_n \left(X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x) \right) F_{Y^x}(q^*) \right]. \end{aligned}$$

Using the Bayes formula, we get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right) &\leq \mathbb{E}_n \left((q_n(x) - q^*(x))^2 \right) + \gamma_{n+1}^2 P_n \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) P_n \left[F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x)) \right], \end{aligned}$$

Let us split the double product into two terms representing the two errors we made by iterating our algorithm.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right) &\leq (q_n(x) - q^*(x))^2 + \gamma_{n+1}^2 P_{n+1} \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) P_{n+1} \left[F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x)) \right] \quad (5.16) \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) P_n \left[F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x)) \right]. \end{aligned}$$

We now use our hypothesis. By **A1**,

$$\left| F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x)) \right| \geq M(x) \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)},$$

and by **A3**,

$$|q_n(x) - q^*(x)| \leq \sqrt{C_1}.$$

Thus,

$$-2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x)) P_n \left[F_{Y^{B_n^{k_{n+1}}(x)}}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q_n(x)) \right] \leq 2\gamma_{n+1} \sqrt{C_1} M(x) P_n \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}.$$

On the other hand, thanks to **A4** we know that,

$$(q_n - q^*) \left[F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x)) \right] \geq C_2(x, \alpha) [q_n(x) - q^*(x)]^2.$$

Coming back to Equation (5.16), we get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n \left((q_{n+1}(x) - q^*(x))^2 \right) &\leq (q_n(x) - q^*(x))^2 (\mathbb{1}_{A_n} + \mathbb{1}_{\bar{A}_n}) + \gamma_{n+1}^2 P_n \\ &\quad - 2\gamma_{n+1} (q_n(x) - q^*(x))^2 C_2(x, \alpha) P_n + 2\gamma_{n+1} M(x) \sqrt{C_1} \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} P_n. \end{aligned}$$

To conclude, we take the expectation

$$\begin{aligned} b_{n+1}(x) &\leq C_1 \mathbb{P}(A_n^C) + b_n(x) - 2\gamma_{n+1} C_2(x, \alpha) \mathbb{E} \left[P_n (q_n(x) - q^*)^2 \right] \\ &\quad + \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}(P_n) + 2\gamma_{n+1} \sqrt{C_1} M(x) \mathbb{E} \left[P_n \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} \right]. \end{aligned}$$

But, by definition of A_n , we get

$$\begin{aligned} -2\gamma_{n+1}C_2(x, \alpha)\mathbb{E} \left[P_{n+1} (q_n(x) - q^*)^2 \right] &\leq -\gamma_{n+1}\epsilon_n C_2(x, \alpha)\mathbb{E} \left[(q_n(x) - q^*(x))^2 \mathbb{1}_{A_n} \right] \\ &= -2\gamma_{n+1}\epsilon_n C_2(x, \alpha)b_n(x); . \end{aligned}$$

Finally,

$$b_{n+1}(x) \leq b_n(x) (1 - 2C_2(x, \alpha)\gamma_{n+1}\epsilon_n) + e_{n+1} ,$$

with

$$e_{n+1} := C_1\mathbb{P}(A_n^C) + \gamma_{n+1}^2\mathbb{E}(P_n) + 2\gamma_{n+1}\sqrt{C_1}M(x)\mathbb{E} \left[P_n ||X - x||_{(k_{n+1}, n)} \right] .$$

Now using Lemmas 5.5.6, 5.5.4 and 5.5.1 we get for $n \geq N_0$ with

$$e_n \leq d_n := C_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right) + 2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)\gamma_n \left(\frac{k_n}{n} \right)^{\frac{1}{d}+1} + \gamma_n^2 \frac{k_n}{n} .$$

The conclusion holds thanks to Lemma 5.5.7, for $n \geq N_0 + 1$,

$$b_n(x) \leq \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_{N_0})) b_{N_0}(x) + \sum_{k=N_0+1}^n \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_k)) d_k . \quad (5.17)$$

But thanks to Assumption **A3**, we have already shown that $b_{N_0}(x) \leq a_{N_0}(x) \leq C_1$. To conclude, we re-inject Equation (5.17) in Equation (5.15) and obtain for $n \geq N_0 + 1$,

$$\begin{aligned} a_n(x) &\leq \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_{N_0})) C_1 + \sum_{k=N_0+1}^n \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_k)) d_k \\ &\quad + C_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right) . \end{aligned}$$

5.5.4 Proof of Corollary 5.2.6 : Rate of convergence

In this part, we will denote

$$T_n^0 := C_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right) , \quad T_n^1 := \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_{N_0}))$$

and

$$T_n^2 := \sum_{k=N_0+1}^n \exp(-2C_2(x, \alpha)(\kappa_n - \kappa_k)) d_k .$$

We want to find a simpler expression for those terms to better see their order in n . First, considering T_n^1 we see that $a_n(x)$ can converge to 0 only when the sum

$$\sum_{k \geq 1} \frac{1}{k^{\gamma+\epsilon}} = +\infty .$$

This is why we must first consider $\epsilon \leq 1 - \gamma$. As $\epsilon < 1 - \beta$, we have to take $\beta > \gamma$.

Remarque 5.5.9. *The frontier case $\epsilon = 1 - \gamma$ is possible but the analysis shows that it is a less interesting choice than $\epsilon < 1 - \gamma$ (there is a dependency in the value of $C_2(x, \alpha)$ but the optimal rate is the same as the one in the case we study). In the sequel, we only consider $\epsilon < 1 - \gamma$.*

Let us upper-bound T_n^1 . As $x \mapsto 1/x^{\epsilon+\gamma}$ is decreasing, we get

$$\begin{aligned} T_n^1 &= \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{k=N_0+1}^n \frac{1}{k^{\epsilon+\gamma}}\right) \\ &\leq \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \int_{N_0+1}^{n+1} \frac{1}{t^{\epsilon+\gamma}} dt\right) \\ &\leq \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\epsilon-\gamma} - (N_0+1)^{1-\epsilon-\gamma}}{(1-\epsilon-\gamma)}\right). \end{aligned}$$

Then, T_n^1 (just like T_n^0) is exponentially small when n grows up. To deal with the second term T_n^2 we first study the order in n of d_n . d_n is composed of three terms :

$$d_n \leq C_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right) + 2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)n^{-\gamma+(\beta-1)(1+\frac{1}{d})} + n^{-2\gamma+\beta-1}.$$

The first one is negligible (exponentially decreasing). Let us compare the two others which are powers of n . Comparing their exponents, we get that there exists constants C_5 and $C_6(d)$ (their explicit form is given in the Appendix) such that

- if $\beta \leq 1 - d\gamma$, then for $n \geq N_0 + 1$,

$$d_n \leq C_5(x, d)n^{-2\gamma+\beta-1},$$

- if $\beta > 1 - d\gamma$, then for $n \geq N_0 + 1$,

$$d_n \leq C_6(x, d)n^{-\gamma+(1+\frac{1}{d})(\beta-1)}.$$

Remarque 5.5.10. *Let us detail how one can find C_5 (it is the same reasoning for C_6). If $\beta \leq 1 - d\gamma$, we know that when n will be big enough, the dominating term of d_n will be the one in $n^{-2\gamma+\beta-1}$. Then, it is logical to search a constant $C_5(x, d)$ such that $\forall n \geq N_0 + 1$,*

$$d_n \leq \frac{C_5(x, d)}{n^{2\gamma-\beta+1}}.$$

Such a constant has to satisfy, for all $n \geq N_0 + 1$,

$$C_5(x, d) \geq C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{2\gamma-\beta+1} + \frac{2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)}{n^{-\gamma+(1-\beta)/d}} + 1.$$

Since $\beta \leq 1 - d\gamma$, the map $x \mapsto \frac{2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)}{n^{-\gamma+(1-\beta)/d}}$ is positive and decreasing. Then its maximum is reached for $n = N_0 + 1$. Moreover, the map $x \mapsto C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{2\gamma-\beta+1}$ is also positive and is decreasing on an $[A, +\infty[$. It also has a maximum. The previous inequality is then true for

$$C_5(x, d) := \max_{n \geq N_0+1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{2\gamma-\beta+1} + \frac{2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)}{(N_0+1)^{-\gamma+(1-\beta)/d}} + 1.$$

Let us study the two previous cases.

Study of T_n^2 when $\beta > 1 - d\gamma$:

To upper-bound these sums, we use arguments from [22], which studies the stochastic algorithm to estimate the median on an Hilbert space. The main arguments are comparisons between sums and integrals. Indeed, for $n \geq N_0 + 2$ and $n \geq N_3$ where N_3 is such that

$$\forall n \geq N_3, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor \geq N_0 + 1,$$

$$\begin{aligned} T_n^2 &= C_6(x, d) \sum_{k=N_0+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{j=k+1}^n \frac{a}{j^{\epsilon+\gamma}}\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} + \frac{C_6(x, d)}{n^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} \\ &= C_6(x, d) \sum_{k=N_0+1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{j=k+1}^n \frac{a}{j^{\epsilon+\gamma}}\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} \\ &\quad + C_6(x, d) \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{j=k+1}^n \frac{a}{j^{\epsilon+\gamma}}\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} + \frac{C_6(x, d)}{n^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} \\ &=: S_1 + S_2 + S_3. \end{aligned}$$

First, the function $x \mapsto x^{-\epsilon-\gamma}$ is decreasing on $]0, +\infty[$ then

$$\begin{aligned} S_2 &\leq C_6(x, d) \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \int_{k+1}^{n+1} \frac{1}{x^{\epsilon+\gamma}} dx\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}} \\ &= C_6(x, d) \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \\ &\quad \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(k+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}}. \end{aligned}$$

Then, taking, $1 - \beta < \epsilon < \min((1 - d\gamma), (1 + \frac{1}{d})(1 - \beta))$, we have since $k \geq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1$

$$\begin{aligned} S_2 &\leq C_6(x, d) \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \left(\frac{2}{n}\right)^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon} \\ &\quad \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(k+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{1}{k^{\gamma+\epsilon}}. \end{aligned}$$

Now, since for $k \geq 1$,

$$\left(\frac{1}{k}\right)^{\epsilon+\gamma} \leq \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\epsilon+\gamma},$$

we get

$$\begin{aligned} S_2 &\leq C_6(x, d) \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \left(\frac{2}{n}\right)^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon} 2^{\epsilon+\gamma} \\ &\quad \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}^{n-1} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(k+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{1}{(k+1)^{\gamma+\epsilon}}. \end{aligned}$$

Since the function $x \mapsto \exp\left(2C_2(x, \alpha) \frac{n^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right)$ is decreasing on $\left[\frac{2C_2(x, \alpha)}{\gamma+\epsilon}, +\infty\right]$, we also define the integer $N_1(x, \alpha)$ the rank such that

$$\forall n \geq N_1(x, \alpha), \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2C_2(x, \alpha)}{\epsilon + \gamma}.$$

For $n \geq N_1(x, \alpha)$ we get

$$\begin{aligned} S_2 &\leq C_6(x, d) \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{2^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)+\gamma}}{n^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon}} \\ &\quad \times \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^{n-1} \int_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 2}^n \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{x^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{1}{x^{\gamma+\epsilon}} dx \\ &\leq \frac{C_6(x, d)}{2C_2(x, \alpha)} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \frac{(n+1)^{1-\gamma-\epsilon}}{1-\gamma-\epsilon}\right) \frac{2^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)+\gamma}}{n^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon}} \\ &\quad \times \left[\exp\left(2C_2(x, \alpha) \frac{n^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right) - \exp\left(2C_2(x, \alpha) \frac{(\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 2)^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right) \right] \\ &\leq \frac{C_6(x, d)}{2C_2(x, \alpha)} \frac{2^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)+\gamma}}{n^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon}} =: \frac{C_7(x, d, \alpha)}{2} \frac{1}{n^{-\epsilon+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}}. \end{aligned}$$

Let us now deal with the term S_1 . As $k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, we have

$$\sum_{j=k+1}^n \frac{1}{j^{\epsilon+\gamma}} \geq \frac{n}{2} \frac{1}{n^{\epsilon+\gamma}}.$$

Then,

$$\begin{aligned} S_1 &= C_6(x, d) \sum_{k=N_0+1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{j=k+1}^n \frac{a}{j^{\epsilon+\gamma}}\right) \frac{1}{k^{\gamma+(1-\beta)(1+\frac{1}{d})}} \\ &\leq C_6(x, d) \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \exp(-C_2(x, \alpha) n^{1-\epsilon-\gamma}) \frac{1}{k^{\gamma+(1-\beta)(1+\frac{1}{d})}} \\ &\leq C_6(x, d) \exp(-C_2(x, \alpha) n^{1-\epsilon-\gamma}) \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{1}{k^{\gamma+(1-\beta)(1+\frac{1}{d})}}. \end{aligned}$$

Thanks to the exponential term, S_1 is insignificant compared to S_2 whatever is the behaviour of the sum $\sum_k k^{-\gamma-(1-\beta)(1+\frac{1}{d})}$, and so is T_1^n . Then, denoting $N_2(d, x)$ the rank after which we have

$$S_3 + S_1 + T_n^1 + T_n^0 \leq \frac{C_7(x, \alpha, d)}{2n^{(1+\frac{1}{d})(1-\beta)-\epsilon}},$$

we get, in the case where $\beta > 1 - \gamma$ and $1 - \beta < \epsilon < \min((1 - \gamma), (1 + \frac{1}{d})(1 - \beta))$, for $n \geq \max(N_0, N_1(x, \alpha), N_2(d, x))$

$$a_n(x) \leq \frac{C_7(x, \alpha, d)}{n^{-\epsilon+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)}}.$$

Study of T_n^2 when $\beta \leq 1 - d\gamma$:

Using the same arguments, we conclude that for $1 - \beta < \epsilon < \min(1 - \beta + \gamma, 1 - \gamma)$ and $n \geq \max(N_0, N_1(x, \alpha), N_2(d, x))$ (see Appendix for precise definitions of these ranks), there exists a constant $C_8(x, \alpha, d)$ such that the mean square error satisfies

$$a_n(x) \leq \frac{C_8(x, \alpha, d)}{n^{\gamma-\beta+1-\epsilon}}.$$

5.5.5 Proof of Corollary 5.2.8 : choice of best parameters β and γ

Let us now optimize the rate of convergence obtained in previous theorem. When $\beta \geq \gamma$ and $\beta \leq 1 - d\gamma$, the rate of convergence is of order $n^{-\gamma+\beta-1+\epsilon}$. To optimize it, we have to choose ϵ as small as possible. Then, we take $\epsilon = 1 - \beta + \eta$. The rate becomes $n^{-\gamma+\eta}$. Then, we have also to choose γ as small as possible. In this area, there is only one point in which γ is the smallest, this is the point $(\gamma, \beta) = (\frac{1}{1+d}, \frac{1}{1+d})$. Since we have to take $\beta > \gamma$, the best couple of parameters, in this area, is $(\frac{1}{1+d}, \frac{1}{1+d} + \eta\beta)$. These parameters follow a rate of convergence of $n^{\frac{-1}{1+d}+\eta}$.

When we are in the second area, the same kind of arguments allows us to conclude to the same optimal point with the same rate of convergence.

In Figure 5.6, we use the numerical simulations of Section 3 to illustrate the previous discussion.

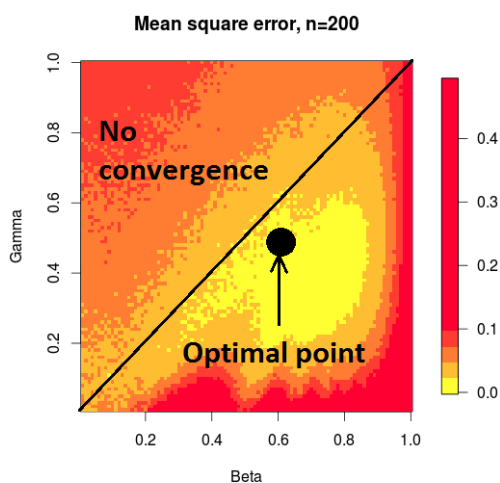


Figure 5.6: Theoretical behaviour of the MSE in function of β and γ

We have finally shown that

$$a_n(x) \leq \frac{C_9(x, \alpha, d)}{n^{\frac{1}{1+d}-\eta}},$$

where the constant is the minimal constant between $C_7(x, \alpha, d)$ and $C_8(x, \alpha, d)$ computed with optimal parameters $(\gamma, \beta, \epsilon)$.

5.6 Appendix 2 : Recap of the constants

Let us sum up all the constants we need in this paper.

5.6.1 Constants of the model

We denote :

- $M(x)$ the constant of continuity of the model, that is

$$\forall B \in \mathcal{B}_x, \forall t \in \mathbb{R}, |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| \leq M(x)r_B .$$

- C_{input} is the positive lower bound of the density of the inputs law f_X .
- $C_g(x)$ is the positive lower bound of the density of the law of $g(x, \epsilon)$.

5.6.2 Compact support

We denote :

- $[L_Y, U_Y]$ the compact in which are included the values of g .
- $[L_X, U_X]$ the compact in which is included the support of the distribution of X .
- $[L_{q_n}, U_{q_n}] := [L_Y - (1 - \alpha), U_Y + \alpha]$ the segment in which q_n can take its values ($\forall x$).
- $U_{|\cdot|}$ the upper bound of the compact support of the distribution of $\|X - x\|$ ($\forall x$).

5.6.3 Real constants

We denote :

- $\sqrt{C_1} := U_Y + \alpha - L_Y$. C_1 is the uniform in ω and x bound of $(q_n(x) - q^*(x))^2$.
- $C_2(x, \alpha) := \min\left(C_g(x), \frac{1-\alpha}{U_Y + \alpha - L_Y}\right)$ is the constant such that

$$[F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q^*(x))] [q_n(x) - q^*(x)] \geq C_2(x, \alpha) (q_n(x) - q^*(x))^2 .$$

- $C_3(d) := \sqrt[d]{2} \left(1 + \frac{8}{3d} + \frac{1}{\sqrt[d]{C_{input} C_4(d)}}\right)$.
- $C_4(d) := \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}$.
- $C_5(x, d) := \max_{n \geq N_0 + 1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{2\gamma-\beta+1} + \frac{2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d)}{(N_0 + 1)^{-\gamma+(1-\beta)/d}} + 1$.
- $C_6(x, d) := \max_{n \geq N_0 + 1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{\gamma+(1+\frac{1}{d})(1-\beta)} + 2\sqrt{C_1}M(x)C_3(d) + \frac{1}{(N_0 + 1)^{\gamma-\frac{1}{d}(1-\beta)}}$.
- $C_5^{optim} := \max_{n \geq N_0 + 1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{(\frac{1}{1+d}+\eta_\beta)-\eta_\epsilon}\right) (N_0 + 1)^{\frac{1}{1+d}-\eta_\beta+1} + 1 + \frac{1}{(N_0 + 1)^{-\frac{1}{1+d}+\frac{1}{d}(1-\frac{1}{1+d}-\eta_\beta)}}$.

- $C_6^{optim}(x, d) := \frac{\max_{n \geq N_0+1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8} n^{\left(\frac{1}{1+d} + \eta_\beta\right) - \eta_\epsilon}\right) n^{\left(1 + \frac{1}{d}\right) - \frac{1}{d(1+d)} - \eta_\beta \left(1 + \frac{1}{d}\right)} + 2\sqrt{C_1} M(x) C_3(d) + 1}{(N_0 + 1)^{-\frac{1}{d} + \frac{1}{d(1+d)} + \frac{1}{1+d} + \frac{\eta_\beta}{d}}}$
- $C_7(x, \alpha, d) := \frac{2^{\left(1 + \frac{1}{d}\right)(1-\beta) + \gamma} C_6(x, d)}{C_2(x, \alpha)}$.
- $C_8(x, \alpha) := \frac{2^{2\gamma - \beta + 1} C_5(x, d)}{C_2(x, \alpha)}$.
- $C_9(x, \alpha, d) := \min\left(\frac{2^{1 + \frac{1}{d} - \frac{1}{d(1+d)} - \eta_\beta \left(1 + \frac{1}{d}\right)} C_5^{optim}(x, d)}{C_2(x, \alpha)}, \frac{2^{\frac{1}{1+d} - \eta_\beta + 1} C_6^{optim}(x, d)}{C_2(x, \alpha)}\right)$.
- $C_{10}(d) := \sqrt[d]{\frac{2(k_n+1)}{(n+1)C_{input}C_4(d)}}$.

5.6.4 Integer constants

We denote :

- $N_0 := 2^{\frac{1}{\epsilon - (1-\beta)}}$.
- $N_1(x, \alpha)$ is the rank such that $n \geq N_1(x, \alpha)$ implies

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2C_2(x, \alpha)}{\epsilon + \gamma}.$$

- $N_2(x, \alpha, d)$ is the integer such that $\forall n \geq N_2(x, \alpha, d)$,
 - a) If $\beta \leq 1 - d\gamma$,

$$S_3 + S_1 + T_n^1 + T_n^0 \leq \frac{C_7(x, \alpha, d)}{2n^{\left(1 + \frac{1}{d}\right)(1-\beta) - \epsilon}},$$

where $T_n^1 := \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{k=N_0+1}^n k^{-\gamma-\epsilon}\right)$, $T_n^0 := C_1 \exp\left(\frac{-3n^{1-\epsilon}}{8}\right)$,

$$S_3 := \frac{C_6(x, d)}{n^{\gamma + \left(1 + \frac{1}{d}\right)(1-\beta)}} \text{ and } S_1 := C_6(x, d) \exp(-2C_2(x, \alpha) n^{1-\epsilon-\gamma}) \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} k^{-\gamma - (1-\beta)(1+1/d)}.$$

- b) If $\beta > 1 - d\gamma$,

$$S_3 + S_1 + T_n^1 + T_n^0 \leq \frac{C_8(x, \alpha, d)}{2n^{\gamma - \beta + 1 - \epsilon}},$$

where $T_n^1 := \exp\left(-2C_2(x, \alpha) \sum_{k=N_0+1}^n k^{-\gamma-\epsilon}\right)$, $T_n^0 := C_1 \exp\left(\frac{-3n^{1-\epsilon}}{8}\right)$,

$$S_3 := \frac{C_5}{n^{2\gamma - \beta + 1}} \text{ and } S_1 := C_5 \exp(-2C_2(x, \alpha) n^{1-\epsilon-\gamma}) \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} k^{-\gamma - (1-\beta)(1+1/d)}.$$

- N_3 is the rank such that $\forall n \geq N_3$, $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor \geq N_0 + 1$.
- $N_4(x, \alpha, d) := \max(N_0 + 2, N_1(x, \alpha), N_2(x, \alpha, d), N_3)$.

Chapter 6

Estimation de superquantile dans les codes stochastiques

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous proposons une procédure séquentielle pour estimer le superquantile de la sortie d'un code stochastique coûteux. La méthode d'estimation est basée sur le même double algorithme que dans le Chapitre 4. Pour gérer en plus la stochasticité du code, nous utilisons, comme dans le Chapitre 5, la méthode des k -plus proches voisins. Dans la suite, nous supposons que, pour tout x dans le support de la loi d'entrée X , la loi de $Y^x \mathbb{1}_{Y^x > 0}$ admet un moment d'ordre 1. Nous étudions alors l'algorithme

$$\begin{cases} q_0(x) \in \mathbb{R} \\ Q_0(x) \in \mathbb{R} \\ q_{n+1}(x) = q_n(x) - \gamma_{n+1}^q \left(\mathbb{1}_{Y_{n+1} \leq q_n(x)} - \alpha \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^q(x)} \\ Q_{n+1}(x) = Q_n(x) + \gamma_{n+1}^Q \left(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n(x)} - Q_n(x) \right) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^Q(x)}, \end{cases} \quad (6.1)$$

où

- $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ est un échantillon indépendant de même loi que (X, Y) .
- (γ_n^q) et (γ_n^Q) sont les pas de descente de gradient correspondant respectivement à l'estimateur du quantile $q_n(x)$ et l'estimateur du superquantile $Q_n(x)$. Nous considérons toujours le cas où $\gamma_n^q = n^{-\gamma^q}$ et $\gamma_n^Q = n^{-\gamma^Q}$ avec γ^q et γ^Q deux éléments de $]0, 1]$.
- $kNN_n^q(x)$ et $kNN_n^Q(x)$ sont les ensembles des respectivement k_n^q et k_n^Q voisins de x parmi (X_1, \dots, X_{n+1}) au sens de la norme euclidienne. On considère toujours le cas où $k_n^q = \lfloor n^{\beta^q} \rfloor$ et $k_n^Q = \lfloor n^{\beta^Q} \rfloor$ avec β^q et β^Q deux éléments de $]0, 1[$.

Nous avons donc cette fois-ci, quatre paramètres à choisir. Ce chapitre est construit de la manière suivante. Dans une première partie, nous étudierons les paramètres pour lesquels le double algorithme est fortement consistant. Nous étudierons aussi le comportement non-asymptotique des estimateurs. Pour cela, nous donnerons une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique. Nous discuterons aussi du choix des paramètres pour obtenir l'algorithme le plus performant. Pour illustrer nos résultats, nous présenterons des simulations numériques en Partie 2. Enfin, nous discuterons de la qualité de nos résultats et verrons

comment il pourrait être possible de les améliorer en Partie 3. Toutes les preuves de ce chapitre sont reportées en Partie 4. Nous réutiliserons aussi une grande partie des lemmes techniques du Chapitre 5.

6.2 Résultats principaux

Dans cette partie, nous étudions la convergence presque-sûre de l'algorithme (6.1). Nous proposons aussi une étude non-asymptotique de sa vitesse de convergence en moyenne quadratique. Comme nous l'avons remarqué dans le Chapitre 4, l'étude du comportement de l'estimateur du superquantile dépend complètement du comportement de l'estimateur du quantile. Nous allons donc avoir besoin de beaucoup d'éléments techniques du Chapitre 5. Pour éviter les répétitions, nous nous y reporterons directement.

6.2.1 Notations et hypothèses

Dans ce chapitre, il y a aussi beaucoup de constantes. Pour simplifier les notations, nous conservons le noms des constantes du Chapitre 5 pour celles qui sont communes. Pour les autres nous conserverons le même type de notations mais en remplaçant C par D et N par M pour ne pas confondre d'un chapitre à l'autre. Nous résumons en appendice les valeurs de toutes les constantes de ce chapitre.

Nous aurons besoin des hypothèses suivantes. On notera que ces hypothèses sont les mêmes que celles du Chapitre 5. Le lecteur pourra donc se rapporter au chapitre précédent pour des commentaires ou des interprétations de ces hypothèses.

Hypothèse A1 Pour tout x dans le support de la loi de X , il existe une constante $M(x)$ pour laquelle l'inégalité suivante est vérifiée

$$\forall B \in \mathcal{B}_x, \forall t \in \mathbb{R}, |F_{Y^B}(t) - F_{Y^x}(t)| \leq M(x)r_B .$$

Hypothèse A2 La loi des entrées est à densité minorée par une constante $C_{input} > 0$ sur son support. Nous avons déjà vu que cela implique que la loi des entrées est à support compact. Nous notons alors L_X la borne inférieure et U_X la borne supérieure de ce support.

Hypothèse A3 La fonction g du code est à valeurs dans un compact $[L_Y, U_Y]$.

Nous avons déjà vu dans le Chapitre 5 (voir Lemme 5.5.8 du Chapitre 5), que sous cette hypothèse, et dès lors que $\beta^q \geq \gamma^q$,

$$\sqrt{C_1} := \max(U_Y - L_Y + (1 - \alpha), U_Y + \alpha - L_Y) = U_Y - L_Y + \alpha ,$$

est une borne presque-sûre de $|\theta_n(x) - \theta^*(x)|$.

Lemma 6.2.1. *Sous l'hypothèse A3 et pour n'importe quel choix de γ^Q et β^Q , la constante $R^Q := \max(|U_Y|, |L_Y|)$ borne presque-sûrement (Q_n) dès lors que l'on choisit $|Q_0| \leq R^Q$.*

Proof. Cela se montre rapidement par récurrence. On choisit $|Q_0| \leq R^Q$. On suppose $|Q_n| \leq R^Q$. Nous avons alors

- Soit $X_{n+1} \notin kNN_{n+1}^Q(x)$ et dans ce cas $|Q_{n+1}| \leq |Q_n| \leq R^Q$.

- Soit $X_{n+1} \in kNN_{n+1}^Q(x)$ et dans ce cas on se retrouve dans le cas non-conditionnel, et il suffit d'appliquer le raisonnement de la Remarque 4.2.1 du Chapitre 4.

□

De plus, il est immédiat que sous nos hypothèses, $Q \in [L_Y, U_Y]$. Ainsi, dans la suite, nous noterons $\sqrt{D_1} := U_Y - L_Y$ une borne presque-sûre uniforme en x de $|Q_n - Q|$.

Hypothèse A4 Pour tout x , la loi $g(x, \epsilon)$ est à densité bornée par une constante $C_g(x) > 0$ sur son support.

On rappelle que cette hypothèse implique l'inégalité fondamentale suivante (voir Lemme 5.4) : il existe une constante $C_2(x, \alpha)$, telle que

$$\forall q_n(x), [F_{Y^x}(q_n(x)) - F_{Y^x}(q(x))] [q_n(x) - q(x)] \geq C_2(x, \alpha) [q_n(x) - q(x)]^2. \quad (6.2)$$

Nous avons beaucoup discuté de cette inégalité dans le Chapitre 3. C'est grâce à elle que tout notre raisonnement récursif pour établir une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique de l'estimateur du quantile fonctionne. Cette hypothèse nous sera donc utile lorsque nous voudrions utiliser une inégalité sur le risque quadratique du quantile pour en établir une sur le superquantile. On notera en revanche que pour l'étude du superquantile à proprement parler, nous n'aurons pas besoin d'une hypothèse aussi forte. On pourrait se contenter de supposer que la densité est bornée. Nous noterons d'ailleurs sa borne $\|f_x\|_\infty$ dans la suite.

6.2.2 Convergence presque-sûre

Dans cette sous-partie, nous nous intéressons aux conditions sur les paramètres pour que l'algorithme (6.1) soit fortement consistant.

Théorème 6.2.2. *Sous les hypothèses A1, A2 et A3, dès lors que*

$$\frac{1}{2} < \gamma^q \leq \beta^q < 1 \text{ et } \frac{1}{2} < \gamma^Q \leq \beta^Q \leq 1$$

et si x et g sont tels que la loi de $Y^x \mathbb{1}_{Y^x > 0}$ admet un moment d'ordre 2, alors l'algorithme (6.1) est fortement consistant.

La preuve de la forte consistance de l'estimateur du quantile a déjà été faite dans le Chapitre 5 (voir Théorème 5.2.4). En effet, l'hypothèse sur γ^q garantit cette propriété. L'hypothèse sur γ^Q sert à établir la convergence de l'estimateur du superquantile. La preuve est disponible en Partie 5. Nous allons seulement en donner une heuristique ici. Comme nous l'avons vu à plusieurs reprises, pour démontrer ce genre de résultat, il faut faire apparaître une martingale bornée dans L^2 . Nous allons donc poser, pour la filtration $\mathcal{F}_n := \sigma((X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$,

$$h_n(q_n, Q_n) := \mathbb{E} \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^Q(x)} | \mathcal{F}_n \right] = \left[G_{kNN_{n+1}^Q}(q_n) - Q_n \right] P_n$$

$$\xi_{n+1} = (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}^Q(x)} - h_n(q_n, Q_n),$$

où l'on a noté $G_A(t) := \mathbb{E}(Y \mathbb{1}_{Y > t} | X \in A)$ pour un réel t et un ensemble $A \subset \text{Supp}(X)$.

La partie technique de la preuve consiste alors à montrer que presque-sûrement,

$$Q_n = \frac{1}{S_n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_{k+1} \frac{\Delta_{k+1}}{P_k} + \sum_{k=1}^{n-1} \Delta_{k+1} G_{kNN_{k+1}^q}(q_{k+1}),$$

où $S_n = \sum_{k=1}^n \Delta_k$ est une suite qui diverge vers $+\infty$ grâce à l'hypothèse $\beta^Q \geq \gamma^Q$. Cette égalité est très intéressante parce qu'elle fait apparaître deux sommes. La seconde est celle qui a la plus grande importance. C'est une somme de Césaro qui converge vers Q puisque sous nos hypothèses $G_{kNN_k^q}(q_k)$ converge vers $G_x(q) = Q$. La première somme est un terme de reste; c'est une somme de Kronecker qui converge vers 0 notamment grâce à notre hypothèse d'existence de moment d'ordre 2 qui permet de garantir que

$$\sup_n \mathbb{E}(\xi_{n+1}^2 | \mathcal{F}_n) < +\infty,$$

et grâce au fait que $\sum_n (\gamma_n^Q)^2 < +\infty$.

Le résultat précédent nous confirme qu'il est cohérent d'utiliser l'algorithme (6.1) pour estimer le superquantile. Nous nous intéressons maintenant à son comportement non-asymptotique.

6.2.3 Inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique

Dans cette partie, nous allons déployer le même raisonnement que dans les parties précédentes, pour obtenir une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique. Nous proposerons ensuite d'étudier quels termes sont dominants pour trouver comment paramétrer au mieux notre algorithme. Commençons par établir une inégalité de récurrence sur $a_n(x)$.

Théorème 6.2.3. *Sous les hypothèses **A1**, **A2**, **A3** et **A4**, le risque quadratique $a_n(x)$ de la seconde coordonnées de l'algorithme (6.1) satisfait l'inégalité suivante : pour tout $0 < \gamma^Q < 1$, $0 < \beta^Q < 1$, et $1 > \epsilon > 1 - \beta^Q$ et pour $n \geq N_0 + 1$, il existe des constantes D_1 , $C_3(d)$ et D_2 et D_3 (on pourra trouver leur valeur en annexes) telles que*

$$a_n(x) \leq D_1 \exp \left(-2 \sum_{k=N_0+1}^n \gamma_k \epsilon_k \right) + \sum_{k=N_0+1}^n \exp(-2(\kappa_n - \kappa_k)) d_k + D_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right).$$

$$\text{avec } \forall j \in \mathbb{N}^*, \kappa_j = \sum_{i=1}^j i^{-\epsilon-\gamma} \text{ et}$$

$$d_n = D_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right) + 2\gamma_{n+1} \sqrt{D_1} |U_Y| M(x) C_3(d) \left(\frac{k_n}{n} \right)^{1+\frac{1}{d}} \\ + 2\gamma_{n+1} \|f_x\|_\infty \sqrt{D_1} D_3 \mathbb{E}(P_{n-1} | q_{n-1} - q|) + D_2 \gamma_{n+1}^2 \frac{k_n}{n}.$$

La preuve de ce théorème est différée en Section 4. Elle repose sur le même raisonnement que dans les chapitres précédents. Nous mettrons d'ailleurs en avant les changements par rapport au cas non-conditionnel du Chapitre 4. On notera de plus que seule la seconde partie de l'hypothèse **A4** est nécessaire pour montrer ce théorème.

Le théorème précédent fait apparaître $|q_n - q|$ qui représente l'erreur faite en approximant le quantile par son estimateur séquentiel. La seule chose que nous connaissons sur cet estimateur est son risque quadratique. En utilisant les résultats du Chapitre 5, à savoir l'ordre du risque quadratique de q_n lorsqu'on choisit des paramètres optimaux dans la première coordonnées de l'algorithme, on obtient le corollaire suivant

Corollaire 6.2.4. *Sous les hypothèses du théorème précédent et en choisissant les paramètres optimaux $\gamma^q = \frac{1}{1+d}$ et $\beta^q = \gamma^q + \eta_\beta$ pour estimer la première coordonnée q_n , le risque quadratique de la seconde coordonnée Q_n vérifie, pour tout $n \geq M_4(x, d, \alpha)$,*

- *En zone A, c'est à dire si $\beta \geq 1 - d\gamma$ et $\beta \leq 2\gamma + \frac{d}{1+d}$ ou si $\beta < 1 - d\gamma$ et si $\beta \leq (d + 2 + 2/d) [(1 + d)(1 + 2/d)]$, alors il existe une constante $D_{10}(x, \alpha, d)$ telle que*

$$a_n(x) \leq \frac{D_{10}(x, d, \alpha)}{n^{\frac{1-\beta}{2} + \frac{1}{2(1+d)} - \frac{\eta}{2} - \epsilon}}.$$

- *En zone B, c'est à dire si $\beta \geq 1 - d\gamma$ et $\beta \geq 2\gamma + \frac{d}{1+d}$, alors il existe une constante $D_{11}(x, \alpha, d)$ telle que*

$$a_n(x) \leq \frac{D_{11}(x, d, \alpha)}{n^{\gamma - \beta + 1 - \epsilon}}.$$

- *En zone C, c'est à dire si $\beta > 1 - d\gamma$ et si $\beta \geq (d + 2 + 2/d) [(1 + d)(1 + 2/d)]$, alors il existe une constante $D_{12}(x, \alpha, d)$ telle que*

$$a_n(x) \leq \frac{D_{12}(x, d, \alpha)}{n^{-\epsilon + (1+1/d)(1-\beta)}}.$$

Corollaire 6.2.5. *Sous les hypothèses du Corollaire 6.2.4, les paramètres optimaux pour la deuxième coordonnée de l'algorithme (6.1) sont l'ensemble des couples (γ^Q, β^Q) pour lesquels $\beta^Q = 1 - \frac{1}{(1+d)(1+2/d)}$ et $\gamma \in [\frac{1}{(1+d)(2+d)} - \eta/(2+d); 1 - \frac{1}{(1+d)(1+2/d)}]$. De plus, pour un tel choix de paramètre, il existe un rang $M_4(x, \alpha, d)$ et une constante $D_{14}(x, \alpha, d)$ explicitement connus (voir annexes) tels que pour tout $n \geq M_3(x, \alpha, d)$,*

$$a_n(x) \leq \frac{D_{14}(x, \alpha, d)}{n^{\frac{1}{(1+d)(2+d)} - \eta'}}.$$

où $\eta' > 0$ aussi petit que l'on souhaite.

Ce corollaire donne donc les paramètres *théoriques* qui conduisent au meilleur comportement de la borne non-asymptotique sur le risque quadratique. Nous pouvons cependant remarquer que ce résultat n'est pas complètement satisfaisant en pratique. Lorsque l'on s'intéresse au comportement du segment optimal lorsque la dimension d augmente, on se rend vite compte qu'il va y avoir un problème. En effet, le Corollaire 6.2.5 indique qu'il est équivalent de choisir un γ n'importe où dans l'intervalle optimal mais comme on peut le voir sur la Figure 6.1, lorsque la dimension d augmente, ce segment optimal grandit. Ses bords s'approchent des bords hauts et bas du carré $[0, 1]^2$. Mais nous savons que les valeurs extrêmes de γ ne sont pas un bon choix. L'intuition concernant γ pousserait donc plutôt à prendre une valeur au milieu de l'intervalle optimal. Plus embêtant encore, lorsque d grandit, la zone optimale se rapproche du bord droit du carré $[0, 1]^2$. Or, nous savons très bien que $\beta = 1$ est un mauvais choix de paramètre.

Nous allons revenir sur ce problème dans la Section 4 de ce chapitre et en donner une explication. D'abord, dans la section suivante, nous allons montrer des simulations numériques. Nous appliquons l'algorithme à différents exemples et comparons les résultats à ce que nos Théorèmes annoncent.

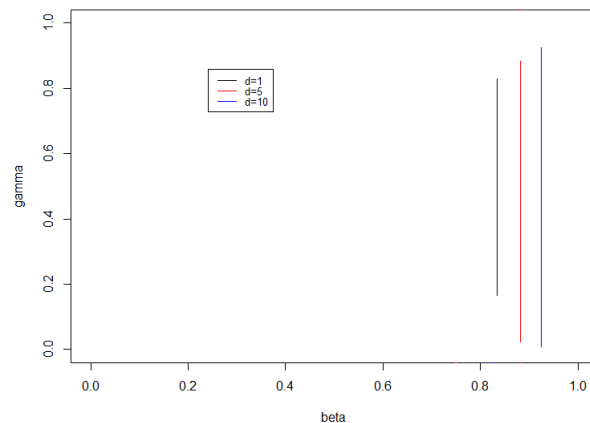


Figure 6.1: Segment optimal pour $d=1, 5$ et 10

6.3 Simulations numériques

Dans cette partie, nous allons reprendre le plan et les exemples du chapitre précédent.

6.3.1 Dimension 1- fonction carré

On commence par étudier le code stochastique très régulier

$$g(X, \epsilon) = X^2 + \epsilon$$

où $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$ et $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. Nous estimons le superquantile pour $x = 0.5$. Nous avons déjà démontré dans le Chapitre 5 que les hypothèses de nos théorèmes sont vérifiées ici. Pour vérifier la convergence presque-sûre, nous avons tracé l'erreur relative de l'algorithme en fonction de γ et de β pour $0 < \gamma < \beta < 1$, pour $n = 5000$ sur la Figure 6.2. Comme l'indique la légende, plus la couleur est claire et plus l'erreur relative est petite. La zone $\frac{1}{2} < \gamma < \beta < 1$ est clairement mise en avant avec cette simulation.

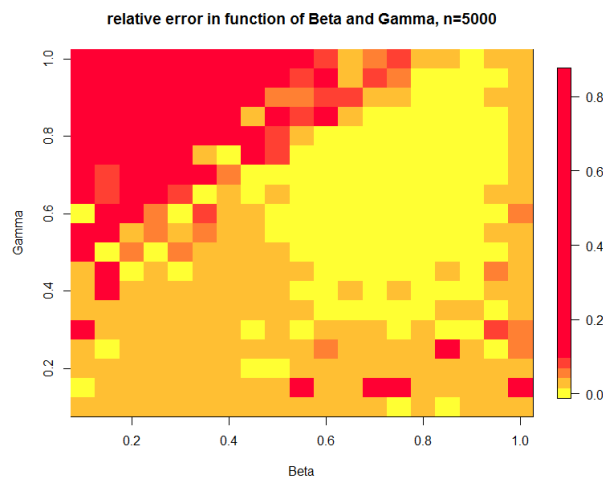


Figure 6.2: Erreur relative en fonction de β et γ - dimension 1 - fonction carré

On étudie maintenant l'erreur quadratique (MSE). La Figure 6.3, montre la MSE empirique (calculée par méthode de Monte Carlo avec 200 échantillons) en fonction de β et γ , pour $n = 50$. Encore une fois, comme l'indique la légende, plus la couleur est claire et plus la MSE est petite. Pour comparer les résultats théoriques, nous avons aussi tracé en noir les frontières des zones A , B et C et en noir foncé le segment optimal. Dans cet exemple, nous sommes en dimension 1. Les simulations semblent plutôt en accord avec les résultats théoriques. On remarque cependant que la zone où l'erreur quadratique est très faible semble plus étendue que la zone théoriquement optimale. Nous y reviendrons par la suite.

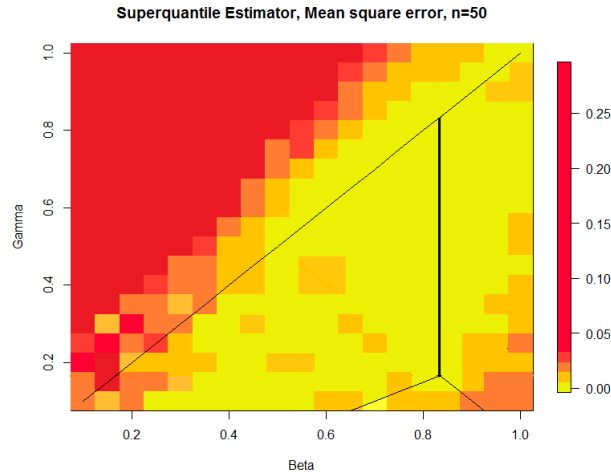


Figure 6.3: MSE en fonction de β et γ - dimension 1 - fonction carré

Dimension 1 - fonction valeur absolue

Nous étudions maintenant le code

$$g(X, \epsilon) = |X| + \epsilon$$

avec $X \sim \mathcal{U}([-1, 1])$ et $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. Ce code est moins régulier par rapport à sa première variable. Nous cherchons à estimer le superquantile pour $x = 0$, point où la fonction $g(\cdot, \epsilon)$ n'est pas dérivable.

Encore une fois, on pourra se reporter au chapitre précédent pour vérifier les hypothèses des théorèmes. Comme pour l'exemple précédent, la Figure 6.4 étudie la convergence p.s et la Figure 6.5 étudie le risque quadratique. Les conclusions sont très semblables à l'exemple précédent.

6.3.2 Dimension 2 et 3

Voyons ce qu'il se passe lorsque nous augmentons la dimension. En dimension 2, nous étudions les deux codes suivants

$$g_1(X, \epsilon) = \|X\|^2 + \epsilon \text{ et } g_2(X, \epsilon) = x_1^2 + x_2 + \epsilon,$$

où $X = (x_1, x_2) \sim \mathcal{U}([-1, 1]^2)$ et $\epsilon \sim \mathcal{U}([-0.5, 0.5])$. Dans tous les cas, on choisit $n = 200$ et on cherche à estimer le superquantile en $x = (0, 0)$. Puisque les conditions sur les paramètres pour la convergence presque-sûre ne dépendent pas de la dimension, nous n'étudierons pas cette convergence (les résultats sont très semblables aux précédents). Nous nous concentrons

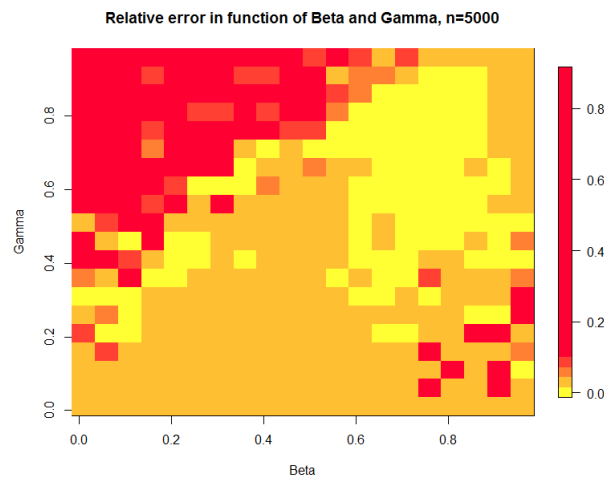


Figure 6.4: Erreur relative en fonction de β et γ -dimension 1 - fonction valeur absolue

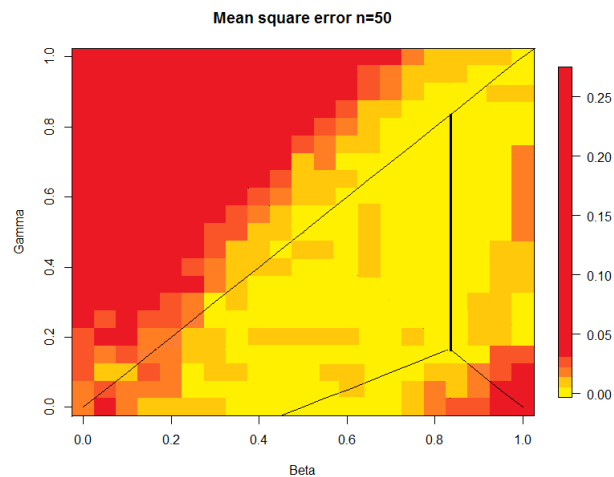


Figure 6.5: MSE en fonction de β et de γ -dimension 1- fonction valeur absolue

plutôt sur l'étude du risque quadratique. Sur la Figure 6.6 on trace toujours de la même manière, la MSE empirique en fonction de β et de γ . Dans cet exemple, on commence à observer le problème que nous avons soulevé dans la partie précédente. Il semble en effet que la dimension soit encore assez petite pour que l'on soit quasiment en accord avec les résultats théoriques. Mais on constate qu'il vaut mieux prendre γ au milieu du segment optimal, parce que les bords de ce segment (et particulièrement le bas ici) ne se comportent pas très bien. Par ailleurs, il semble que la zone optimale soit en réalité plus grande que ce segment : elle semble s'étendre à la gauche de ce dernier.

Cette observation se confirme et s'accroît lorsque la dimension augmente. La Figure 6.7 en est une bonne illustration pour le code

$$g_1(X, \epsilon) = \|X\|^2 + \epsilon$$

en dimension 3.

La remarque finale de la Section 2 se confirme donc sur les simulations numériques : il semble que le segment que nous avons identifié théoriquement comme optimal ne soit

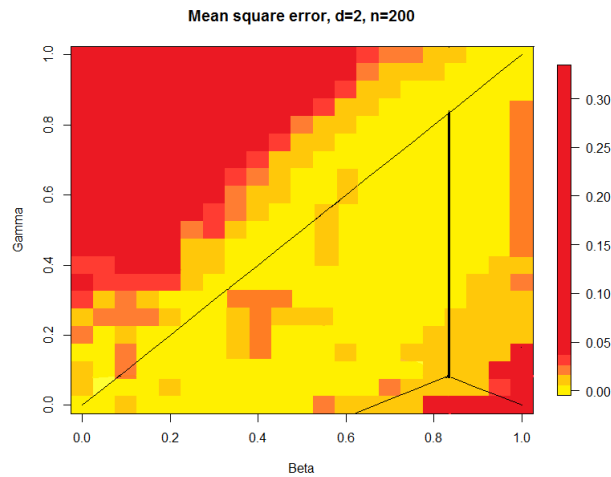


Figure 6.6: MSE en fonction de β et γ - dimension 2 - fonction norme

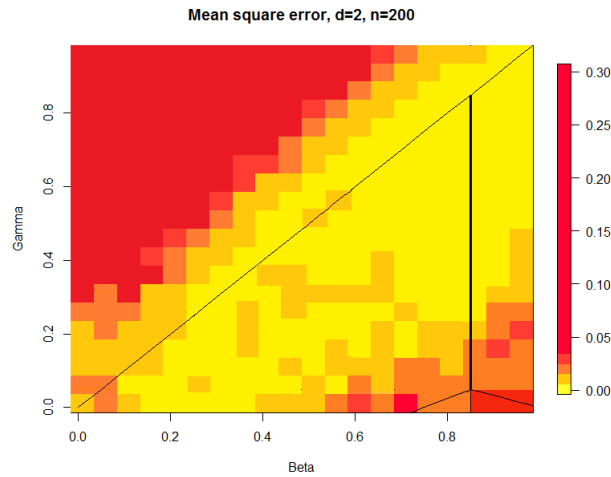


Figure 6.7: MSE en fonction de β et γ - dimension 3 - fonction norme

qu'un morceau de la réelle zone optimale. Un peu plus ennuyeux, il semble même que les extrémités de ce segment ne fasse pas partie de la *vraie* zone optimale. Lorsque la dimension d est très petite, cela semble négligeable. En revanche, plus la dimension d est grande et plus le problème apparaît clairement. Dans le section suivante, nous allons tenter d'apporter une explication à ce problème.

6.4 Pourquoi le Corollaire 6.2.5 n'est-il pas optimal ?

6.4.1 Explications théoriques

Si on reprend la preuve des Corollaires 6.2.4 et 6.2.5, et qu'on compare avec les résultats du Chapitre 4, on constate que la seule inégalité qui peut être trop brutale, est celle de Cauchy-Schwartz utilisée pour majorer $\mathbb{E}(P_n | q_n - q)$. Nous avons utilisé cette inégalité parce que nous ne pouvions pas faire autrement, dans le mesure où nous ne connaissons pas la dépendance entre q_n et P_n . Vu la construction de l'algorithme, il semble clair que ces deux variables

aléatoires ne sont pas indépendantes. En revanche l'intuition nous donne envie de penser que leur dépendance est relativement faible. Quoi qu'il en soit, nous n'avons trouvé aucun moyen de la quantifier. Cela nous a donc poussé à utiliser l'inégalité de Cauchy-Schwartz, qui nous a malheureusement fait perdre une précision importante dans notre inégalité sur le risque quadratique de Q_n . Pour bien comprendre, voyons ce qu'il se serait passé, si P_n et Q_n avaient été indépendants. Cette partie ne sert qu'à fixer les idées, nous ne calculerons donc pas les constantes précises, nous nous attacherons seulement à l'ordre de grandeur en n pour exhiber les meilleurs paramètres dans ce cas. Le reste d_n était composé de quatre termes :

0) Le terme de déviation qui est exponentiellement décroissant et que nous considérons comme négligeable.

1) Le terme qui correspond à l'erreur de localisation est

$$R_1 \sim n^{-\gamma-(1-\beta)(1+\frac{1}{d})}.$$

2) Le terme qui correspond au reste classique d'un algorithme stochastique est

$$R_2 \sim n^{\beta-1-2\gamma}.$$

3) Le terme qui correspond à l'erreur faite en approximant q par q_n . Ce est majoré à l'aide de l'inégalité de Cauchy-Schwartz. En utilisant les résultats du Chapitre 5, on montre qu'il est de la forme

$$R_3 \sim n^{-\frac{1}{2}+\frac{\beta}{2}-\frac{1}{2(1+d)}+\frac{\eta}{2}-\gamma}.$$

C'est donc ce seul dernier terme R_3 qui est impacté par l'inégalité *trop grossière* de Cauchy-Schwartz. Si P_n et Q_n était indépendant, on aurait

$$\mathbb{E}(P_n | q_n - q|) = \mathbb{E}(P_n)\mathbb{E}(|q_n - q|) \leq \mathbb{E}(P_n)\mathbb{E}[(q_n - q)^2]$$

et donc, par les résultats sur la loi Beta,

$$R_3 \sim n^{-1+\beta-\frac{1}{2(1+d)}+\frac{\eta}{2}-\gamma}.$$

Si on reprend la preuve des Corollaires 6.2.4 et 6.2.5 avec ce nouvel ordre pour T_3 on arriverait alors à la conclusion suivante.

Proposition 6.4.1. *On considère l'algorithme (θ_n) dépendant de deux paramètres β et γ dont le risque quadratique a_n vérifie l'inégalité suivante pour tout $n \geq 1$, pour tout $0 < \gamma < \beta < 1$ et pour tout $1 > \epsilon > 1 - \beta$*

$$a_n \leq \exp\left(-2 \sum_{k=1}^n \frac{1}{k^{\gamma+\epsilon}}\right) a_0 + \sum_{k=1}^n \exp\left(-2 \sum_{j=k+1}^n \frac{1}{j^{\epsilon+\gamma}}\right) d_k + C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right).$$

avec

$$d_n = \exp\left(\frac{-3n^{1-\epsilon}}{8}\right) + n^{-\gamma-(1-\beta)(1+\frac{1}{d})} + n^{\beta-1-2\gamma} + n^{-\frac{1}{2}+\frac{\beta}{2}-\frac{1}{2(1+d)}+\frac{\eta}{2}-\gamma}.$$

Alors le meilleur choix pour paramétrer cet algorithme est de prendre le couple (β, γ) dans le triangle plein délimité par $\beta > \gamma$, $\beta < \frac{2+d}{2(1+d)}$ et $\gamma > \frac{1}{2(1+d)}$. De plus, avec un tel choix de paramètres, on trouve qu'à partir d'un certain rang,

$$a_n = \mathcal{O}\left(n^{-\frac{1}{2(1+d)} + \eta'}\right),$$

pour un $\eta' > 0$ aussi petit que l'on souhaite.

Esquisse de preuve : Pour démontrer cette proposition, on reprend exactement la même trame de preuve que pour la partie précédente, en changeant simplement l'ordre de R_3 . Nous allons ici donner seulement une heuristique des changements. Pour plus de détails, le lecteur pourra se reporter à la Section 6.

Cette modification de puissance va bien entendu changer complètement la donne. Si on reprend la preuve des corollaires, on va déjà avoir une modification des zones de dominances A (zone où domine R_3), B (zone où domine R_2) et C (zone où domine R_1). Cette différence est accentuée lorsque la dimension d augmente, comme on peut le voir sur la Figure 6.8. Ces graphes nous montrent les différentes zones lorsque $d = 1$ pour la première ligne (les zones obtenues avec l'inégalité de Cauchy-Schwartz sont indicées par N et les zones sous hypothèses d'indépendances sont indicées par O) et lorsque $d = 5$ pour la seconde ligne.

Sur ces figures, on peut constater que la frontière entre les zones A_N et C_N ne se comporte pas du tout comme celle entre les zones A_0 et C_0 qui est la frontière optimale repérée dans ce chapitre. En effet, horizontalement (dans le sens des β), elle diminue vers $1/2$ au lieu de croître vers 1. Verticalement, elle s'allonge comme dans le cas précédent mais beaucoup moins rapidement (les calculs montrent que la croissance est de l'ordre de d pour le cas indépendant contre un ordre en d^2 pour l'autre cas). En fait, dans le cas de la non-indépendance, comme on utilise une inégalité trop forte sur le terme R_3 , c'est celui-ci qui domine sur la zone la plus étendue. Ce problème est accentué lorsque la dimension augmente. On note aussi une grosse différence concernant la frontière entre la zone A et la zone B. Dans le cas indépendant, il y a toujours un morceau de zone B_N sous la zone A_N . Cela agrandit la zone B considérablement et permet une meilleure optimisation dans cette zone.

6.4.2 Simulations numériques

Nous reprenons les simulations des codes précédemment introduits : en dimension 1 pour le code "fonction carré" et en dimension 2 et 3 pour les codes "normes". Cette fois-ci, nous superposons la zone théorique optimale sous l'hypothèse d'indépendance (c'est le triangle en noir foncé), comme on peut le voir sur la Figure 6.9. On peut alors constater que la frontière droite de la zone optimale (même en dimension 2 et 3) est complètement incluse dans une zone où le risque quadratique est très faible. Il faut faire augmenter d de manière très significative pour que l'extrémité du bas se retrouve dans une zone où le risque est grand. On peut d'ailleurs aussi noter que ce segment frontière a maintenant l'air d'être un peu trop décalé sur la gauche. On peut apercevoir nettement que lorsque la dimension d augmente, le segment recule vers la gauche et laisse sur sa droite une zone où le risque quadratique est très faible. Il y a en revanche un souci pour les frontières à gauche de la zone optimale. Il semble que la zone soit trop étendue dans cette direction pour coller avec les simulations (cela se voit bien en dimension 1).

6.4.3 Bilan

Dans cette partie, nous avons mis en avant une limite des résultats que nous avons obtenus en Section 2. Nous avons en effet expliqué pourquoi ces résultats n'étaient pas optimaux. Cela

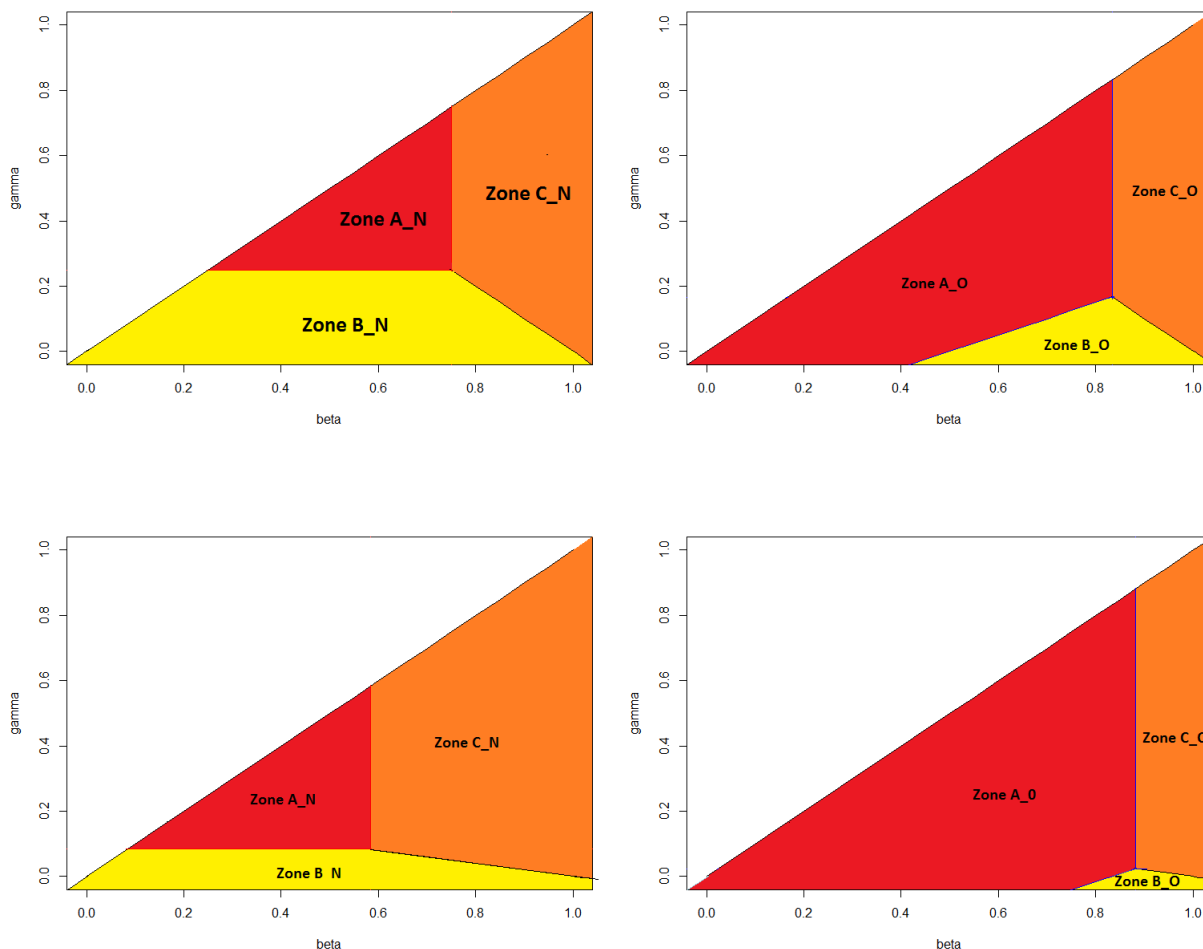


Figure 6.8: Zones de dominance en fonction de la dimension d

vient principalement du fait que nous ne savons pas caractériser explicitement la dépendance entre q_n et P_n . Les simulations numériques présentées dans ces deux parties permettent de bien mettre en avant qu'il existe bel et bien une dépendance entre ces deux variables aléatoire, puisque l'on voit qu'aucune des deux conclusions n'est pleinement en accord avec les simulations : à certains endroits les résultats de la Section 2 sont plus pertinents et à d'autre, ce sont ceux de la présente section. Le bon résultat théorique, si on arrivait à le démontrer serait donc probablement un compromis entre les deux résultats précédemment développés.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit un algorithme stochastique permettant de simuler de manière simultanée le quantile et le superquantile de la sortie d'un code stochastique. Cet algorithme est l'adaptation au cas conditionnel de l'algorithme du Chapitre 4. Nous avons donné des conditions sur les paramètres pour que l'algorithme soit fortement consistant. Nous nous sommes ensuite penchés sur l'étude non-asymptotique du risque quadratique des

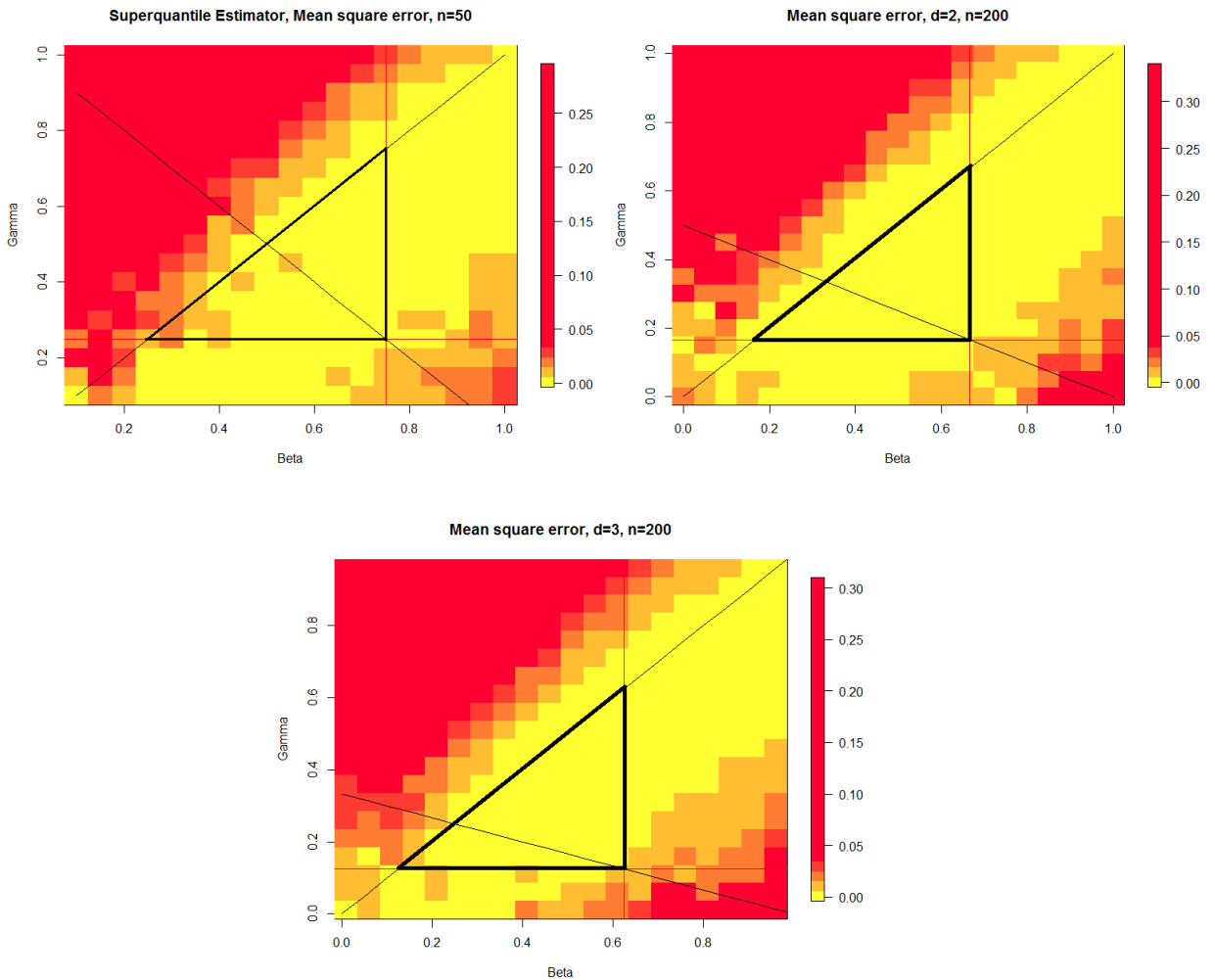


Figure 6.9: MSE en fonction de β et γ

estimateurs. Nous avons démontré une inégalité non-asymptotique sur l'erreur quadratique et en avons déduit des paramètres *optimaux* pour régler l'algorithme. Bien que ces paramètres donnent un comportement intéressant de l'algorithme, les simulations numériques nous ont permis de constater que notre inégalité n'est pas optimale. Cette non-optimalité est de plus renforcée lorsque la dimension des entrées d augmente. En étudiant les inégalités de nos preuves, nous avons pu mettre en évidence que cet obstacle venait de notre ignorance concernant la dépendance de q_n avec P_n . On pourra d'ailleurs noter que c'est déjà ce problème qui nous force à considérer b_n au lieu de a_n dans nos preuve et fait donc apparaître un terme de déviation dans nos inégalités. C'est donc aussi ce problème qui fait apparaître le rang N_0 à partir duquel nos inégalités sont vraies. Nous n'avons jusqu'ici pas réussi à contourner ce problème pour obtenir un résultat optimal dans le cas du superquantile. Une perspective de travaux dans la continuité de cette thèse pourrait donc consister à mieux comprendre la dépendance entre ces deux variables aléatoires. Si nous connaissions explicitement cette dépendance, nous trouverions alors l'ordre exacte de R_3 et pourrions conclure en utilisant la méthodologie développée précédemment.

6.6 Preuves

Dans cette partie, nous donnons les démonstrations de tous les résultats de ce chapitre. Nous utiliserons la plupart des lemmes techniques du Chapitre 5.

6.6.1 Preuve de la consistance forte : Théorème 6.2.2

Proof. Nous devons seulement démontrer la convergence de l'estimateur du superquantile. Pour cela, nous allons adapter au cas conditionnel, la preuve de [8]. Puisqu'il n'y a pas d'ambiguïté dans cette preuve, nous omettrons les indices Q . Soit (V_n) la suite définie par $\forall n \geq 0, V_n := \gamma_n P_n$ où $P_n := \mathbb{P}(X \in kNN_n(x) | \mathcal{F}_n)$. Nous commençons par introduire le lemme technique suivant

Lemma 6.6.1. *Si $\beta^Q \geq \gamma^Q$, alors la série $\sum_{n \geq 0} V_n$ diverge presque-sûrement.*

Proof. Cela découle du Lemme 5.5.3 et de l'hypothèse **A2**. □

Nous allons maintenant décomposer Q_n en deux sommes, comme nous l'avons expliqué précédemment. Pour cela, on définit par récurrence la suite $(\Delta_n)_n$ de la manière suivante

$$\Delta_{n+1} = \Delta_n \frac{V_{n+1}}{V_n} \frac{V_0}{V_0 - V_{n+1}}, \quad n \geq 0, \quad \Delta_0 = 1,$$

où $\beta_0 := \sup_{n \geq 1} V_n + 1$. On a alors

$$V_n = V_0 \frac{\Delta_n}{S_n}, \quad n \geq 0, \quad \text{avec } S_n = \sum_{k=0}^n \Delta_k.$$

Puisque, sous nos hypothèses, la série $\sum_n V_n$ est presque-sûrement divergente, on peut montrer (voir [8]) que S_n diverge aussi presque-sûrement vers $+\infty$.

Pour faire apparaître une martingale, pour la filtration $\mathcal{F}_n := \sigma((X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n))$, on pose

$$\begin{aligned} h_n(q_n, Q_n) &:= \mathbb{E} \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_n^Q(x)} | \mathcal{F}_n \right] = \left[G_{kNN_n^Q}(q_n) - Q_n \right] P_n \\ \xi_{n+1} &= (Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_n^Q(x)} - h_n(q_n, Q_n). \end{aligned}$$

Nous itérons alors le produit suivant

$$\begin{aligned} S_{n+1} Q_{n+1} &= S_{n+1} Q_n - S_{n+1} \gamma_{n+1} (Q_n - Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n}) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_n(x)} \\ &= S_n Q_n + Q_n \Delta_{n+1} - S_{n+1} \gamma_{n+1} P_n [h_n(q_n, Q_n) + \xi_{n+1}] \\ &= S_n Q_n + Q_n (\Delta_{n+1} - \gamma_{n+1} S_{n+1} P_n) - S_{n+1} \gamma_{n+1} P_n G_{kNN_n(x)}(q_n) - S_{n+1} \gamma_{n+1} \xi_{n+1} \\ &= S_n Q_n + \Delta_{n+1} G_{kNN_n(x)}(q_n) + \frac{\Delta_{n+1}}{P_n} \xi_{n+1}. \end{aligned}$$

Finalement, on obtient

$$Q_n = \frac{1}{S_n} \sum_{k=0}^{n-1} \xi_{k+1} \frac{\Delta_{k+1}}{P_k} + \sum_{k=1}^{n-1} \Delta_{k+1} G_{kNN_k^q}(q_k).$$

Nous avons donc deux sommes à étudier. La seconde est celle qui domine et qui va donner la limite. C'est une somme de Césaro. Il nous suffit donc seulement de montrer que

$$G_{kNN_n(x)}(q_n) \longrightarrow G_x(q) = Q,$$

pour conclure. Cela est vrai, puisque grâce à notre hypothèse **A1**,

$$\begin{aligned} \left| G_{kNN_n(x)}(q_n) - G_x(q) \right| &\leq \left| G_{kNN_n(x)}(q_n) - G_x(q_n) \right| + |G_x(q_n) - G_x(q)| \\ &\leq \left| \int_{q_n}^{U_Y} y(f_x(y) - f_{kNN_n(x)}(y)) dy \right| + \left| \int_{\min(q_n, q)}^{\max(q_n, q)} y f_x(y) dy \right| \\ &\leq |U_Y| |F_x(q_n) - F_{kNN_n(x)}(q_n)| + \|f_x\|_\infty \max(q_n, q) [\max(q_n, q) - \min(q_n, q)] \\ &\leq |U_Y| M(x) \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)} + \|f_x\|_\infty \max(q_n, q) [\max(q_n, q) - \min(q_n, q)] \end{aligned} \quad (6.3)$$

Chacun des termes tend bien vers 0 presque-sûrement, puisque d'une part (q_n) converge vers q presque sûrement et d'autre part, $\|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}$ converge presque-sûrement vers 0 par le Lemme 5.5.5 (impliqué par l'hypothèse **A2**).

Voyons maintenant comment montrer que la seconde somme converge vers 0 presque-sûrement. Il s'agit d'une somme de Kronecker. Pour montrer sa convergence presque-sûre vers 0, il suffit donc de montrer que

$$N_n^\gamma = \sum_{k=0}^n \xi_k \gamma_k$$

est presque-sûrement convergente. On remarque d'abord que c'est une martingale (elle est construite à partir d'incrémentes de martingales). De plus,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\xi_{n+1}^2 | \mathcal{F}_n \right] &= P_n \mathbb{E} \left[(Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n} - Q_n)^2 | \mathcal{F}_n \cap \{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)\} \right] - P_n^2 \left[G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n) - Q_n \right]^2 \\ &\leq P_n \mathbb{E}_Y \left[(Y \mathbb{1}_{Y > q_n} - Q_n)^2 | X \in kNN_{n+1}(x) \right]. \end{aligned}$$

Or, sous nos hypothèses, nous avons déjà vu que Q_n est presque-sûrement borné (grâce à l'hypothèse **A3**). De plus, nous savons que P_n suit une loi Beta, il est donc majoré par 1. Finalement, le comportement de ce moment d'ordre 2 dépend complètement de $\mathbb{E} \left[Y^2 \mathbb{1}_{Y > q_n} | X \in kNN_n(x) \right]$ (et du moment moment d'ordre). Par un raisonnement identique à celui appliqué dans les équations (6.3), et donc grâce à l'hypothèse **A1**, on montre facilement que

$$\mathbb{E} \left[Y^2 \mathbb{1}_{Y > q_n} | X \in kNN_{n+1}(x) \right] \longrightarrow \mathbb{E} \left[(Y^x)^2 \mathbb{1}_{Y^x > q} \right].$$

Puisque q_n est borné presque sûrement (grâce à l'hypothèse **A3**) et puisque $Y^x \mathbb{1}_{Y^x > 0}$ admet un moment d'ordre 2, nous pouvons donc conclure que

$$\sup_{n \geq 1} \mathbb{E} \left[\xi_{n+1}^2 | \mathcal{F}_n \right] < +\infty \text{ p.s.}$$

Ainsi, puisque $1/2 < \gamma \leq 1$,

$$\langle N^\gamma \rangle_\infty = \sum_{n \geq 1} \gamma_n^2 \mathbb{E}(\xi_n^2 | \mathcal{F}_{n-1}) < \infty,$$

ce qui achève la démonstration. □

6.6.2 Preuves des théorèmes sur le risque quadratiques

Preuve de l'inégalité de récurrence sur $a_n(x)$: Théorème 6.2.3

Proof. Pour la même raison que dans le Chapitre 5, nous devons introduire

$$b_n(x) = \mathbb{E} \left((Q_n - Q_\alpha)^2 \mathbb{1}_{P_n > \epsilon_n} \right)$$

où $\epsilon_n = (n+1)^{-\epsilon}$ avec $1 > \epsilon > 1 - \beta$ (on notera $\overline{b_n(x)}$ la quantité avec l'événement complémentaire dans l'indicatrice). Nous avons donc, pour $n \geq N_0$,

$$a_n(x) = b_n(x) + \overline{b_n(x)} \leq b_n(x) + D_1 \exp \left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8} \right),$$

d'après le Lemme 5.5.4 (et donc l'hypothèse **A2**). Ainsi, nous allons chercher une inégalité de récurrence sur $b_n(x)$ de la forme habituelle

$$b_{n+1}(x) \leq (1 - c_{n+1})b_n(x) + d_{n+1}.$$

Comme $b_{n+1}(x) \leq a_{n+1}(x)$, nous commençons par développer le carré suivant

$$\begin{aligned} (Q_{n+1}(x) - Q)^2 &= (Q_n(x) - Q)^2 - 2\gamma_{n+1}^Q \left(Q_n(x) - Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} < q_n(x)} \right) (Q_n(x) - Q) \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)} \\ &\quad + \left(\gamma_{n+1}^Q \right)^2 \left(Q_n(x) - Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n(x)} \right)^2 \mathbb{1}_{X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)}. \end{aligned}$$

Comme il n'y a pas ambiguïté, pour simplifier les notations, nous omettrons dans la suite les indices Q et les fonctions de (x) . En prenant l'espérance conditionnelle de l'expression précédente et en appliquant la formule de Bayes, nous obtenons

$$\mathbb{E} \left((Q_{n+1} - Q)^2 | \mathcal{F}_n \right) = (Q_n - Q)^2 - 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q) P_n \left[Q_n - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n) \right] + \gamma_{n+1}^2 R_n P_n,$$

où l'on a noté

$$R_n = \mathbb{E} \left[(Q_n - Y_{n+1} \mathbb{1}_{Y_{n+1} > q_n})^2 | \mathcal{F}_n \cap X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x) \right].$$

Il est alors intéressant de comparer cette équation avec ce que nous obtenions dans le cas non-conditionnel. Dans le Chapitre 4, nous avons fait la même manipulation. Mais le terme de double produit faisait directement apparaître $(Q_n - Q)^2$ parce qu'il n'y avait pas l'indicatrice. On voit ici très bien en quoi la nécessité de localiser, dans le cas conditionnel, va compliquer les choses. Par ailleurs, pour gérer le terme de reste, dans le cas non-conditionnel, nous allions chercher la variance de la loi tronquée. Ici, nos hypothèses de supports compacts nous permettent de faire une majoration plus rapide, qui permet au final, d'aboutir à la même conclusion. En effet, nous savons que Q_n reste presque-sûrement dans l'intervalle $[L_Y, U_Y]$. Nous savons aussi que $\mathcal{L}(Y \mathbb{1}_{Y > q_n} | X \in kNN_n(x))$ a un support inclus dans le compact $[\min(0, L_Y), \max(U_Y, 0)]$. Presque-sûrement, nous avons donc, sachant que $X \in kNN_{n+1}(x)$,

$$(Q_n - Y \mathbb{1}_{Y > q_n})^2 \leq D_2 := \max \left((L_Y - \max(0, U_Y))^2, (U_Y - \min(L_Y, 0))^2 \right).$$

Ainsi, nous avons, presque-sûrement, $R_n \leq D_2$. Nous obtenons alors

$$\mathbb{E} \left((Q_{n+1} - Q)^2 | \mathcal{F}_n \right) \leq (Q_n - Q)^2 - 2\gamma_{n+1} (Q_n - Q) P_n \mathbb{E} \left[\left(Q_n - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n) \right) | \mathcal{F}_n \right] + D_2 \gamma_{n+1}^2.$$

Nous allons maintenant étudier le double produit pour faire apparaître nos différents termes d'erreurs. Pour cela, nous écrivons que

$$(Q_n - G_{kNN_{n+1}(x)}) = (Q_n - Q) + (G_x(q) - G_x(q_n)) + (G_x(q_n) - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n)).$$

Cette décomposition fait apparaître les trois erreurs suivantes

- 1) La première est simplement l'erreur commise en approximant Q par l'algorithme stochastique de manière générale. C'est ce terme qui va faire apparaître le terme $c_n = P_n \gamma_n$ dans l'équation de récurrence puisque le double produit sur cette erreur donne $-2\gamma_{n+1} P_n (Q_n - Q_\alpha)^2$.
- 2) Le second terme représente l'erreur que nous faisons en approchant q par q_n . Toujours par le même raisonnement, on a

$$\begin{aligned} -2\gamma_{n+1} P_n (Q_n - Q_\alpha) (G_x(q_\alpha) - G_x(q_n)) &\leq 2\gamma_{n+1} P_n \sqrt{D_1} |\mathbb{E}(Y(\mathbb{1}_{Y>q_\alpha} - \mathbb{1}_{Y>q_n})|X = x)| \\ &\leq 2\gamma_{n+1} P_n \sqrt{D_1} \max(q_n, q) \|f_x\|_\infty |q_n - q_\alpha| \\ &\leq 2\gamma_{n+1} P_n \sqrt{D_1} D_3 \|f_x\|_\infty |q_n - q_\alpha|, \end{aligned}$$

avec $D_3 := \max(|U_{q_n}|, |L_{q_n}|)$.

- 3) Enfin, le dernier terme correspond à l'erreur de localisation. C'est à dire celle que l'on fait en approximant la loi cible de Y^x par la loi de $Y|X \in kNN_n(x)$. L'hypothèse **A1** va (par le raisonnement que nous avons vu plusieurs fois) permettre d'écrire

$$\begin{aligned} -2\gamma_{n+1} P_n (G_x(q_n) - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n)) (Q_n - Q_\alpha) &\leq | -2\gamma_{n+1} P_n (G_x(q_n) - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n)) (Q_n - Q_\alpha) | \\ &\leq 2\gamma_{n+1} P_n \sqrt{D_1} |G_x(q_n) - G_{kNN_{n+1}(x)}(q_n)| \\ &\leq 2\gamma_{n+1} P_n \sqrt{D_1} |U_Y|M(x) \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}. \end{aligned}$$

Ce terme interviendra dans le reste d_n de l'inégalité que nous cherchons à écrire.

Finalement, en prenant l'espérance et en reportant les précédentes expressions, on trouve

$$\begin{aligned} \mathbb{E}((Q_n - Q)^2) &\leq \mathbb{E}((Q_n - Q)^2) - 2\gamma_{n+1} \mathbb{E}(P_n (Q_n - Q)^2) + 2\gamma_{n+1} \|f_x\|_\infty \sqrt{D_1} D_3 \mathbb{E}(P_n |q_n - q|) \\ &\quad + 2\gamma_{n+1} \sqrt{D_1} |U_Y|M(x) \mathbb{E}(P_n \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}) + D_2 \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}(P_n). \end{aligned}$$

On peut alors déduire une inégalité récursive sur $b_n(x)$ de la manière suivante

$$\begin{aligned} b_{n+1}(x) &\leq a_{n+1}(x) \\ &\leq \mathbb{E}((Q_n - Q)^2 (\mathbb{1}_{P_n > \epsilon_n} + \mathbb{1}_{P_n \leq \epsilon_n})) - 2\gamma_{n+1} \mathbb{E}(P_n (Q_n - Q)^2 \mathbb{1}_{P_n > \epsilon_n}) \\ &\quad + 2\gamma_{n+1} \|f_x\|_\infty \sqrt{D_1} D_3 \mathbb{E}(P_n |q_n - q|) + 2\gamma_{n+1} \sqrt{D_1} |U_Y|M(x) \mathbb{E}(P_n \|X - x\|_{(k_n, n)}) + D_2 \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}(P_n) \\ &\leq b_n(x) (1 - 2\gamma_{n+1} \epsilon_n) + D_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right) + 2\gamma_{n+1} \sqrt{D_1} |U_Y|M(x) \mathbb{E}(P_n \|X - x\|_{(k_{n+1}, n)}) \\ &\quad + 2\gamma_{n+1} \|f_x\|_\infty \sqrt{D_1} D_3 \mathbb{E}(P_n |q_n - q|) + D_2 \gamma_{n+1}^2 \mathbb{E}(P_n). \end{aligned}$$

Nous venons donc d'établir une inégalité de récurrence sur $b_n(x)$. Pour que la forme de cette équation soit plus manipulable, nous utilisons les lemmes techniques du chapitre

précédent pour majorer les espérances de la précédente inégalité. Les lemmes 5.5.6 et 5.5.1 permettent en effet d'obtenir

$$b_{n+1}(x) \leq b_n(x) (1 - 2\gamma_{n+1}\epsilon_n) + D_1 \exp\left(-\frac{3(n+1)^{1-\epsilon}}{8}\right) + 2\gamma_{n+1}\sqrt{D_1}|U_Y|M(x)C_3(d)\left(\frac{k_{n+1}}{n+1}\right)^{1+\frac{1}{d}} \\ + 2\gamma_{n+1}\|f_x\|_\infty\sqrt{D_1}D_3\mathbb{E}(P_n|q_n - q|) + D_2\gamma_{n+1}^2\frac{k_{n+1}}{n+1}.$$

On peut donc conclure, en raisonnant par récurrence, que pour $n \geq N_0 + 1$,

$$a_n(x) \leq D_1 \exp\left(-2\sum_{k=N_0+1}^n \gamma_k \epsilon_k\right) + \sum_{k=N_0+1}^n \exp\left(-2\sum_{i=k}^n \gamma_i \epsilon_i\right) d_k + D_1 \exp\left(-\frac{3n^{1-\epsilon}}{8}\right).$$

avec

$$d_k = D_1 \exp\left(-\frac{3k^{1-\epsilon}}{8}\right) + 2\gamma_k\sqrt{D_1}|U_Y|M(x)C_3(d)\left(\frac{k_k}{k}\right)^{1+\frac{1}{d}} \\ + 2\gamma_k\|f_x\|_\infty\sqrt{D_1}D_3\mathbb{E}(P_{k-1}|q_{k-1} - q|) + D_2\gamma_k^2\frac{k_k}{k}.$$

C'est la conclusion de la Proposition 6.2.3. □

Preuve du Corollaire 6.2.4

Proof. On constate facilement que nous connaissons tous les ordres en n des éléments du reste d_n sauf celui qui dépend du risque quadratique de q_n . Dans la suite, on notera à nouveau $a_n(q)$ et $q_n(Q)$ les deux risques quadratiques. Malheureusement, nous ne savons pas comment sont corrélés P_n et q_n (c'est d'ailleurs ce qui nous a forcé à travailler avec $b_n(x)$ plutôt que $a_n(x)$). Il va donc nous falloir appliquer l'inégalité de Cauchy-Schwarz sur le produit P_n fois $|q_n - q|$. Nous avons vu que cela nous fait perdre une précision qui n'est pas négligeable. L'inégalité de Cauchy-Schwarz donne donc

$$\mathbb{E}(P_n|q_n - q_\alpha|) \leq \sqrt{\mathbb{E}(P_n^2)\mathbb{E}((q_n - q_\alpha)^2)}.$$

Le moment d'ordre 2 de P_n est donné par le Lemme 5.5.1. En fait, il vérifie pour tout $n \geq N_0$,

$$\mathbb{E}(P_{n-1}^2) \leq D_{13}\frac{k_n}{n} \leq 2D_{13}(n-1)^{\beta-1}.$$

Concernant le risque quadratique de q_n , on reprend notre résultat final du Chapitre 5, à savoir que pour $n \geq N_4(x, \alpha, d)$, il existe une constante $C_9(x, \alpha, d)$ telle que

$$\mathbb{E}((q_n - q)^2) \leq \frac{C_9(x, \alpha, d)}{n^{\frac{1}{1+d}-\eta}},$$

pour $\eta = \frac{\eta_\beta}{d} - \eta_\epsilon$ et $\eta_\epsilon = \epsilon - (1 - \beta)$.

En utilisant notre récurrence habituelle, on peut donc montrer que pour $n \geq N_3 + 2$,

$$\begin{aligned}
 a_n(Q) &\leq \exp\left(-2 \sum_{k=N_0+1}^n k^{-\epsilon-\gamma}\right) D_1 + \sum_{k=N_0+1}^{N_4} \exp\left(-2 \sum_{j=k+1}^n k^{-\epsilon-\gamma}\right) d_k \\
 &+ \sum_{k=N_4+1}^{n-1} \exp\left(-2 \sum_{j=k+1}^n k^{-\epsilon-\gamma}\right) d_k + d_n + C_1 \exp\left(\frac{-3}{8} n^{1-\epsilon}\right) \\
 &:= T_n^1 + T_n^3 + T_n^2 + T_n^4 + T_n^0.
 \end{aligned}$$

Pour traiter du terme T_n^2 , il nous faut maintenant chercher dans quelle zone sera dominant quel terme de d_k . Pour simplifier les notations, nous allons noter, pour $n \geq N_3$,

$$\begin{aligned}
 2\gamma_{n+1} \sqrt{D_1} |U_Y| MD(x) C_3(d) \left(\frac{k_n}{n}\right)^{1+\frac{1}{d}} &\leq \frac{D_6(d, x)}{n^{(1-\beta)(1+\frac{1}{d})+\gamma}} := R_1 \\
 D_2 \gamma_{n+1}^2 \left(\frac{k_n}{n}\right) &\leq \frac{D_5}{n^{1-\beta+2\gamma}} := R_2
 \end{aligned}$$

$$2\|f_x\|_\infty \sqrt{2D_1 D_{13} C_9(x, \alpha, d) D_3 \gamma_{n+1} n^{\beta/2-1/2-1/2(1+d)+\eta/2}} \leq \frac{D_4}{n^{1/2-\beta/2+1/2(1+d)-\eta/2+\gamma}} := R_3.$$

On remarque qu'à la constante près, les termes R_1 et R_2 sont les mêmes que dans l'étude du Chapitre 5. Ainsi, nous savons déjà que lorsque $\beta \geq 1 - d\gamma$, R_2 domine sur R_1 . C'est le contraire lorsque $\beta \leq 1 - d\gamma$. On comparant les ordres de R_2 et de R_3 dans la zone $\beta \geq 1 - d\gamma$ et ceux de R_1 et de R_3 dans la zone $\beta \leq 1 - d\gamma$, on peut alors montrer que

- Si $\beta \geq 1 - d\gamma$, alors si $\beta > 2\gamma + \frac{d}{1+d}$, c'est R_2 le terme dominant et si $\beta \leq 2\gamma + \frac{d}{1+d}$ alors c'est R_3 .
- Si $\beta \leq 1 - d\gamma$, alors si $\beta > \frac{d+2+2/d}{(1+d)(1+2/d)}$ c'est R_1 qui domine, et si $\beta \leq \frac{d+2+2/d}{(1+d)(1+2/d)}$ alors c'est R_3 .

La Figure résume les zones précédemment définie avec leur type dans le cas particulier où $d = 1$.

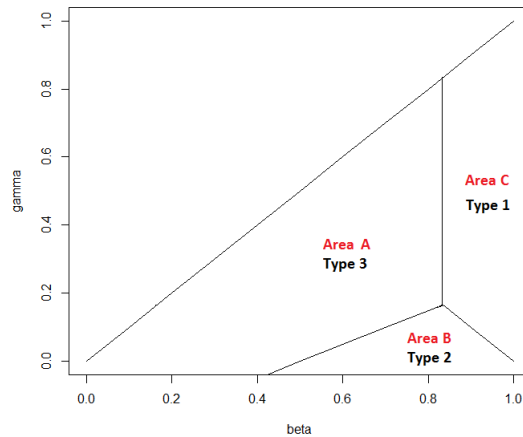


Figure 6.10: Zones et termes dominants

On sait alors qu'il existe des constantes $D_7(x, d, \alpha)$, $D_8(x, d, \alpha)$ et $D_9(x, d, \alpha)$ telles que

- Si on est dans la zone A (lorsque R_3 domine), alors

$$d_n \leq \frac{D_7(x, \alpha, d)}{n^{1/2-\beta/2+1/2(1+d)-\eta/2+\gamma}}.$$

- Si on est dans la zone B (lorsque R_2 domine), alors

$$d_n \leq \frac{D_8(x, d, \alpha)}{n^{2\gamma-\beta+1}}.$$

- Si on est dans la zone C (lorsque R_1 domine), alors

$$d_n \leq \frac{D_9(d, x, \alpha)}{n^{\gamma+(1+1/d)(1-\beta)}}.$$

Ainsi, lorsque nous sommes en zone A, on peut développer les calculs comme dans les chapitres précédents. On a

$$\begin{aligned} T_n^1 + T_n^3 &\leq \exp\left(-2\frac{n^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right) \\ &\times \left[\exp\left(2\frac{(N_0+1)^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right) - \left(\frac{D_6}{N_0^{(1+1/d)(1-\beta)}} + \frac{D_5}{N_0^{2\gamma+1-\beta}} + D_6D_1\right) \exp\left(2\frac{N_3^{1-\epsilon-\gamma} - N_0^{1-\epsilon-\gamma}}{1-\epsilon-\gamma}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

qui converge donc exponentiellement vite vers 0 puisque $1 - \epsilon - \gamma > 0$ car $\beta > \gamma$. Ce terme et celui du reste provenant de l'inégalité de déviation T_n^0 seront donc négligeables. Il reste alors le terme

$$T_n^4 = d_n = \frac{D_4(x, d, \alpha)}{(n-1)^{1/2-\beta/2+1/2(1+d)-\eta/2+\gamma}}.$$

qui converge plus vite que le terme le plus important T_n^2 . Pour gérer ce terme, nous allons comme d'habitude devoir découper la somme en deux parties et donc s'assurer que $n \geq M_1(x, d, \alpha)$ le rang à partir duquel on a

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor \geq N_4(x, d, \alpha) + 1.$$

Nous allons aussi devoir utiliser le rang M_2 à partir duquel on peut faire notre comparaison série-intégrale habituelle, c'est à dire le rang à partir duquel

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2}{\gamma + \epsilon}.$$

Ainsi, pour $n \geq (N_3(x, d, \alpha), M_1(x, d, \alpha), M_2)$, on obtient comme avant,

$$\begin{aligned} T_n^2 &:= S_1 + S_2 \\ &\leq \exp\left(\frac{-1}{n^{1-\epsilon-\gamma}}\right) \sum_{k=2}^n D_4(x, d, \alpha) \frac{1}{(k-1)^{\frac{1-\beta}{2} + \frac{1}{2(1+d)} + \gamma - \frac{\eta}{2}}} \\ &\quad + \frac{D_{10}(x, d, \alpha)}{2} \frac{1}{n^{\frac{1-\beta}{2} + \frac{1}{2(1+d)} - \frac{\eta}{2} - \epsilon}}. \end{aligned}$$

Finalement, en posant $M_3(x, d, \alpha)$ le rang à partir duquel

$$T_n^0 + T_n^1 + T_n^3 + S_1 \leq \frac{D_{10}(x, d, \alpha)}{2} \frac{1}{n^{\frac{1-\beta}{2} + \frac{1}{2(1+d)} - \frac{\eta}{2} - \epsilon}},$$

on obtient le résultat pour la zone A.

Les calculs sont exactement les mêmes pour les deux autres zones. Nous ne les détaillerons donc pas à nouveau.

Preuve du Corollaire 6.2.5

On peut alors faire l'optimisation des trois zones. Dans la zone A par exemple, on a montré que

$$a_n \leq \frac{D_{10}(x, \alpha, d)}{n^{1/2 - \beta/2 + 1/2(1+d) - \eta/2 - \epsilon}}.$$

Pour que la décroissance soit la plus rapide possible, il faut choisir un ϵ le plus petit possible pour avoir une vitesse la plus rapide possible. On choisit donc $\epsilon = 1 - \beta + \eta_\epsilon$ où $\eta_\epsilon > 0$ est aussi petit que possible. La vitesse est alors en $n^{-\frac{1}{2(1+d)} + \frac{\eta}{2} + \frac{1-\beta}{2} + \eta_\epsilon}$. On choisit donc β le plus grand possible, ce qui signifie, dans cette zone $\beta = 1 - \frac{1}{(1+d)(1+2/d)}$. La vitesse est alors en $n^{-\frac{1}{(1+d)(2+d) - \eta_\epsilon - \frac{\eta}{2}}}$ quelque soit γ dans le segment $[\frac{1}{(1+d)(2+d)} - \eta/(2+d); 1 - \frac{1}{(1+d)(1+2/d)}]$. Dans la zone A, on trouve donc que les couples de paramètres optimaux sont les points du segment vertical servant de frontière entre la zone A et la zone C. Avec ces paramètres, on sait de plus que

$$a_n(x) = \mathcal{O}\left(n^{-\frac{1}{(1+d)(2+d)} + \eta_\epsilon + \frac{\eta}{2}}\right).$$

De la même manière, on étudie ce qu'il se passe dans les deux autres zones. On conclut que ce segment frontière est le segment des paramètres optimaux globaux avec la vitesse précédemment annoncée. La Figure 6.11 résume le comportement que nous venons de décrire. Concernant la constante $D_{10}(x, \alpha, d)$, il suffit de prendre $\min(D_7(x, \alpha, d), D_8(x, \alpha, d), D_9(x, \alpha, d))$ lorsque l'on calcule ces constantes avec les paramètres du segment optimal qui les rendent les plus petites. □

6.6.3 Preuve de la Proposition 6.4.1 : cas indépendant

Proof. La preuve de cette proposition est exactement la même que celles ci-dessus. On commence par identifier les zones de dominance. Ici,

- 1) La zone où domine R_3 est la zone A. C'est le triangle plein entre les droites $\beta = \gamma$, $\gamma = \frac{1}{2(1+d)}$ et $\beta = \frac{2+d}{2(1+d)}$.
- 2) La zone où domine R_2 est la zone B. C'est le quadrilatère plein entre les droites $\beta = \gamma$, $\gamma = \frac{1}{2(1+d)}$, $\beta = 1 - d\gamma$ et $\gamma = 0$.
- 3) La zone où domine R_1 est la zone C. c'est la quadrilatère plein entre les droites $\beta = \gamma$, $\beta = \frac{2+d}{2(1+d)}$, $\beta = 1$ et $\beta = 1 - d\gamma$.

Ainsi, dans chaque zone, à partir d'un certain rang et à une constante près, d_k se comporte comme le terme dominant dans la zone en question. Il reste alors à effectuer l'optimisation dans chacune des zones. En zone A, les calculs usuels permettent de dire que l'ordre de a_n est en $n^{\epsilon - \frac{1}{2(1+d)} + \frac{\eta}{2} - 1 + \beta}$. Il nous faut donc choisir ϵ le plus petit possible, à savoir $\epsilon = 1 - \beta + \eta_\epsilon$.

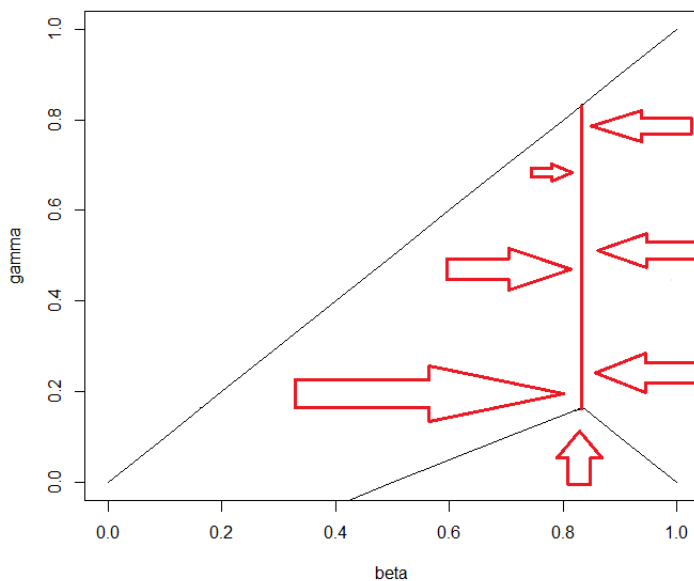


Figure 6.11: Segment des paramètres optimaux

La vitesse devient alors en $n^{-\frac{1}{2(1+d)} + \frac{\eta}{2} - \eta\epsilon}$ et ne dépend plus de β ni de γ . Ainsi, dans la zone A, la vitesse optimale est atteinte pour tout élément de la zone A. Elle est de plus de l'ordre annoncé dans le Proposition. Lorsque nous sommes en zone B, on peut montrer, toujours avec les mêmes calculs que a_n sera de l'ordre de $n^{-\gamma+\beta-1+\epsilon}$. On choisit donc ϵ petit et on se retrouve avec un ordre en $n^{-\gamma+\eta\epsilon}$. On choisit alors γ le plus grand possible. Dans cette zone, γ est maximal et vaut $1/(2(1+d))$ sur tout le segment frontière entre la zone B et la zone A. En prenant un couple de paramètres sur ce segment, on obtient alors un risque quadratique de l'ordre de $n^{-\frac{1}{2(1+d)} - \eta\epsilon}$. Le même raisonnement identifie les paramètres optimaux de la zone C sur la frontière entre la zone A et la zone C et conduit à la même vitesse. \square

6.7 Annexes

Résumons toutes les constantes de ce chapitre.

6.7.1 Constantes réelles

Les constantes C_i sont les constantes qui ont été définies et utilisées dans le Chapitre 5.

Les constantes réelles propres à ce chapitre sont

- $\sqrt{D_1} = U_Y - L_Y$ est la borne uniforme en ω et en x de $|Q_n(x) - Q(x)|$.
- $D_2 = \max((L_Y - \max(0, U_Y))^2, (U_Y - \min(0, L_Y))^2)$.
- $D_3 = \max(|L_Y - (1 - \alpha)|, |U_Y + \alpha|)$.
- $D_4(d, x, \alpha) = 2\|f_x\|_\infty D_3 \sqrt{2D_1 D_{13} C_9(x, \alpha, d)}$.
- $D_5 = D_2$.

- $D_6(x, d) = 2\sqrt{D_1}|U_Y|M(x)C_3(d)$.
- $$D_7(d, \alpha, x) = \frac{D_6(x, d)}{N_3^{(1-\beta)(1/2+1/d)}} + \frac{D_5}{N_3^{(16\beta)/2+\gamma-1/(2(1+d))+\eta/2}} + D_4(x, d, \alpha)$$

$$+ \max_{n \geq N_3+1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{(1-\beta)/2+1/(2(1+d))-\eta/2+\gamma}.$$
- $$D_8(x, d, \alpha) = \frac{D_6(d, x)}{n^{-\gamma+(1-\beta)/d}} + D_5 + \frac{D_4(x, d, \alpha)}{(N_3)^{-\gamma-(1-\beta)/2+1/(2(1+d))+\eta/2}} + \max_{n \geq N_0+1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{2\gamma-\beta+1}.$$
- $$D_9(x, \alpha, d) = D_6(x, d) + \frac{D_5}{N_3^{\gamma-(1-\beta)/d}} + \frac{D_4(d, x, \alpha)}{N_3^{-(1-\beta)(1/2+1/d)+1/(2(1+d))-\eta/2}}$$

$$+ \max_{n \geq N_0+1} C_1 \exp\left(-\frac{3}{8}n^{1-\epsilon}\right) n^{(1-\beta)(1+1/d)+\gamma}.$$
- $D_{10}(x, \alpha, d) := D_7(x, d, \alpha)2^{1-\beta/2+1/(2(1+d))-\eta/2-\epsilon}3^{\gamma+\epsilon}.$
- $D_{11}(x, d, \alpha) := D_8(x, d, \alpha)2^{\gamma-\beta+1-\epsilon}3^{\gamma+\epsilon}.$
- $D_{12}(x, d, \alpha) := D_9(x, d, \alpha)2^{(1+1/d)(1-\beta)-\epsilon}3^{\gamma+\epsilon}.$
- $D_{13} = \frac{2}{N_0+1} + \frac{3}{(N_0+1)^2} + 1.$
- $D_{14}(x, \alpha, d)$ est la constante valant la valeur minimale des constantes D_{10} , D_{11} et D_{12} calculée avec des paramètres de la zone optimale.

6.7.2 Constantes de rang

Les rangs (N_i) ont été définis dans le Chapitre 5. Les rangs qui apparaissent seulement dans ce chapitre 6 sont les suivants.

- $N_0 := 2^{\frac{1}{\epsilon-(1-\beta)}}.$
- $M_1(x, d, \alpha)$ est le rang à partir duquel

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor \geq N_4(x, d, \alpha) + 1.$$

- M_2 est le rang à partir duquel

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1 \geq \frac{2}{\gamma + \epsilon}.$$

- $M_3(x, d, \alpha)$ est le rang à partir duquel

- Dans la zone A ,

$$T_n^0 + T_n^1 + T_n^3 + T_n^4 + S_1 \leq \frac{D_{10}(x, d, \alpha)}{2n^{\frac{1-\beta}{2}+1/(2(1+d))-\eta/2-\epsilon}},$$

- Dans la zone B ,

$$T_n^0 + T_n^1 + T_n^3 + T_n^4 + S_1 \leq \frac{D_{11}(x, d, \alpha)}{2n^{\gamma-\beta+1-\epsilon}},$$

- Dans la zone C ,

$$T_n^0 + T_n^1 + T_n^3 + T_n^4 + S_1 \leq \frac{D_{12}(x,d,\alpha)}{2n^{-\epsilon+(1+1/d)(1-\beta)}},$$

- $M_4(x, \alpha, d) := \max(N_4(x, \alpha, d) + 2, M_1(x, d, \alpha), M_2, M_3(x, d, \alpha),)$.

Conclusion

La deuxième partie de cette thèse concernait l'estimation séquentielle à un pas de quantile et superquantile par algorithme stochastique. Nous avons vu comment utiliser la théorie des algorithmes de Robbins-Monro pour estimer ces deux quantités d'intérêt dans un cadre numérique. Pour gérer le cadre stochastique, nous avons proposé une localisation des algorithmes stochastiques de type Robbins Monro à l'aide de la méthode des k -plus proches voisins. Les algorithmes que nous avons étudiés dépendent de certains paramètres (pas de descente de gradient pour les algorithmes stochastiques dans le cadre numérique auxquels s'ajoutent le nombre de voisins dans le cadre stochastique) Tout au long de ce chapitre, nous avons donc étudié comment choisir ces paramètres pour que les algorithmes soient les plus performants possible (d'un point de vue asymptotique comme non asymptotique).

Au cours de ces études, nous avons rencontré plusieurs difficultés. dans un premier temps, il nous ait apparu qu'il était difficile de sortir de l'hypothèse **H1** de densité minorée pour étudier le comportement non-asymptotique de l'estimateur du quantile. Un travail important de cette thèse a consisté à bien comprendre et expliquer d'où venait cette difficulté. Une perspective intéressante à ce travail serait maintenant de trouver comment résoudre le problème. Dans un second temps, nous avons remarqué que la mauvaise compréhension de la dépendance entre (q_n) et (P_n) dans le cadre stochastique, nous empêchait de conclure à des inégalités non-asymptotiques optimales. Une piste de recherche pour la suite pourrait donc consister à l'étude plus précise de cette dépendance.

Enfin, même si les simulations numériques semblent montrer que les bornes supérieures que nous avons obtenues dans les Chapitres 4 et 5 sont du bon ordre en n , il serait très intéressant de confirmer cette optimalité en montrant des bornes inférieures.

Si nous nous sommes intéressés à une méthode séquentielle à un pas plutôt qu'à une méthode empirique, c'est parce que nous voulions pouvoir contrôler, pas à pas, la précision de notre algorithme. En reprenant les preuves de cette deuxième partie, on constate aisément pourquoi cela était indispensable. En effet, tous nos raisonnements reposent sur des inégalité de récurrence. Mais si on regarde les différents algorithmes de cette partie, on constate qu'il est en réalité possible de construire l'échantillon de la loi de Y en entier, avant même de commencer à faire tourner l'algorithme. En effet, notre algorithme dépend complètement de l'échantillon, mais l'échantillon ne dépend absolument pas de l'algorithme. Il semble donc que nous n'ayons pas exploité pleinement cette idée de construction d'un algorithme *pas à pas*. On pourrait alors imaginer un algorithme qui, à chaque étape n , mettrait à jour son estimateur mais déciderait aussi de la nouvelle entrée à fournir au code, en fonction de toutes les connaissances et absences de connaissances qu'il aurait sur le code, à cette étape. En clair, puisque nous ne pouvons pas faire beaucoup d'appels au code, il serait pertinent de *choisir* les entrées que nous fournissons à ce code, plutôt que de les tirer aléatoirement selon la loi de X . C'est ce type de stratégie, appelée *recherche de plan d'expérience* que nous proposons d'étudier dans la troisième partie de cette thèse.

Part III

Estimation séquentielle bayésienne et planification d'expériences

Introduction

Dans cette partie, on se place sous le modèle d'un code numérique très coûteux. Nous souhaitons estimer le quantile de sa sortie Y mais ne pouvons évaluer qu'un très petit nombre d'entrées x . Construire préalablement un échantillon de Y à partir de l'évaluation de points *tirés aléatoirement* selon la loi de X , pour utiliser les méthodes des Parties 1 et 2 ne semblent donc pas très pertinent. Il est en effet plus judicieux de *sélectionner* les points à évaluer, pour choisir ceux qui donneront l'information la plus utile pour l'estimation du quantile. Pour faire évoluer le plus précisément possible le *besoin* d'information, il semble intéressant de rechercher une méthode à un pas, c'est-à-dire une méthode qui sélectionnera les points un par un en mettant à jour l'information disponible à chaque étape. Les stratégies que nous allons étudier sont donc totalement différentes de celles développées dans les parties précédentes puisque dès lors que nous choisissons les points à évaluer au lieu de les tirer aléatoirement, nous ne construisons plus un échantillon de Y (la loi est biaisée). Il faut donc bâtir entièrement une nouvelle méthode d'estimation.

Nous avons déjà vu dans l'Introduction qu'un type de modélisation permettant la mise en place de telles stratégies séquentielles est la modélisation gaussienne. En effet, si on suppose que g est la réalisation d'un processus gaussien (noté G) centré et de fonction de covariance c connue définie positive, les formules de krigeage que nous redonnerons dans le Chapitre 7 montrent que la loi a posteriori après chaque nouvelle évaluation reste gaussienne et qu'il est facile de calculer ses paramètres.

Sous cette hypothèse gaussienne et pour construire une telle stratégie de planification, il est nécessaire de trouver, d'une part un bon estimateur séquentiel du quantile q_n et d'autre part un bon critère pour choisir le design (c'est-à-dire des points à évaluer).

Concernant le choix de l'estimateur q_n , on peut trouver deux idées différentes dans la littérature. Elles sont inspirées des deux estimateurs de la probabilité de défaillance présentés dans l'Introduction et introduits par Bect et al. dans [9]. Le premier consiste à calculer le quantile de $m_n(X)$ puisque m_n est la meilleure approximation de G à l'étape n . L'estimateur

$$q_n = q(m_n(X)) \quad (6.5)$$

est celui qu'utilise Oakley dans [74]. On peut déjà remarquer que cet estimateur n'a pas une forme analytique facilement identifiable. En revanche, si on l'approche par sa version empirique, il est facilement implémentable (et avec une complexité de calcul raisonnable). En effet, si on dispose d'un échantillon $X_{MC} = (x_{MC}^1, \dots, x_{MC}^l)$ de X (qui est différent des entrées (x_1, \dots, x_n) ne formant pas un échantillon de X), alors on peut calculer

$$q_n = m_n(X_{MC})_{(\lfloor l\alpha \rfloor + 1)}. \quad (6.6)$$

On verra dans le Chapitre 7 qu'il est même possible de trouver une forme analytique de cette version empirique : ayant à disposition \mathcal{A}_n , q_n et un nouveau couple (x_{n+1}, y_{n+1}) , il existe une formule pour calculer q_{n+1} .

La seconde idée que l'on peut avoir pour estimer ce quantile, c'est de prendre l'estimateur

$$q_n = \mathbb{E} [q(G(x)) | \mathcal{A}_n] \tag{6.7}$$

c'est à dire l'estimateur \mathcal{A}_n -mesurable de risque quadratique minimal. C'est cet estimateur qui est utilisé dans les articles [6] et [56] dont nous reparlerons ci-dessous. Le problème de cet estimateur, comme nous allons le voir, est qu'il n'en existe pas de forme analytique. Même sa version empirique nécessite des simulations Monte Carlo de processus gaussiens et la complexité de calcul en devient trop importante. On notera que d'un point de vue purement théorique, c'est encore un problème ouvert de savoir lequel de ces deux estimateurs est le plus performant.

A propos du plan d'expériences, nous avons vu dans l'Introduction qu'il existe deux types de critères pour choisir le nouveau point à évaluer : le premier utilise une fonction de confiance et le second une fonction d'amélioration. Commençons par faire un rapide état de l'art des techniques utilisant des bornes de confiance. Jala et al. proposent dans [57] une adaptation intéressante de l'algorithme GP-UCB dans le cadre de l'estimation du quantile. L'idée est la suivante : au lieu de faire une réduction globale d'incertitude sur toute la fonction en minimisant sa variance, on fait une réduction d'incertitude sur une zone restreinte où l'on sait que le quantile se trouve avec grande probabilité (c'est le même genre d'idée qu'avait eu Oakley dans [74] mais en version séquentielle). Pour cela, grâce à la Propriété 0.0.12, on construit à chaque étape n et pour tout x , des intervalles de confiance sur $G(x) | \mathcal{A}_n$. En utilisant la fonction de répartition empirique, on en déduit un intervalle de confiance pour le quantile qui est la zone de confiance précédemment citée. Cet algorithme s'appelle GPQE. Les auteurs proposent aussi une version améliorée de l'algorithme, nommée GPQE+, dans laquelle on ajoute une partie *exploration* pour accélérer la convergence. C'est-à-dire qu'à certaines étapes, on décide d'aller chercher un point ailleurs que dans la zone de confiance. Ces algorithmes semblent fonctionner très bien, et ont une complexité de calcul raisonnable. Aucune garantie théorique n'a cependant encore été montrée.

Comme nous l'avons expliqué dans l'Introduction, ce sont les critères basés sur des fonctions d'amélioration qui nous intéressent dans cette thèse. En particulier, nous souhaitons étudier l'adaptation de la méthode SUR introduite dans [9] pour estimer une probabilité de défaillance, au cas de l'estimation du quantile. Cela a déjà été fait par Arnaud et al. dans [6] et Jala et al. dans [56]. Nous allons faire un résumé de leur raisonnement qui conduit à une stratégie statistiquement performante mais dont la complexité de calcul explose lorsque la dimension des entrées augmente.

Dans ces deux papiers, le point de départ de la réflexion est le même que le notre dans cette thèse : l'estimateur du quantile qui semble le plus naturel est l'estimateur empirique. Pour un échantillon $(X_{MC}^i)_{i=1, \dots, l}$ de loi X , on voudrait construire grâce à des évaluations du code g , un échantillon $(Y_i)_{i=1, \dots, l}$ de Y et calculer

$$\hat{q}_l(g) = Y_{(\lfloor l\alpha \rfloor + 1)}.$$

Comme le code est trop coûteux, cela n'est pas possible. L'idée est alors de choisir intelligemment les points à évaluer pour construire, à chaque étape, un *méta-estimateur* q_n qui soit très proche de $\hat{q}_l(g)$, pour $n \ll l$. Les auteurs proposent de choisir pour méta-estimateur, l'estimateur (6.7), à savoir

$$q_n = \mathbb{E} (\hat{q}(G) | \mathcal{A}_n)$$

que l'on peut approcher par sa version empirique q'_n calculable via des simulations Monte Carlo de la manière suivante.

1) Pour i allant de 1 à N :

- a) On génère une trajectoire de $G|\mathcal{A}_n$ nommée G_n^i .
- b) On calcule $q^{(n,i)} = \hat{q}_l(G_n^i)$ en utilisant l'échantillon $(G_n^i(X_{MC}^j))_{j=1,\dots,l}$

2) Grâce à l'échantillon $(q^{(n,1)}, \dots, q^{(n,N)})$ distribué selon la loi a posteriori de $\hat{q}_l(G)$ on calcule la moyenne empirique

$$q'_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q^{(n,i)}.$$

On peut d'ores et déjà constater que cet estimateur est relativement coûteux. En effet, pour calculer sa version empirique (avec quantile et moyenne empiriques) à une étape fixée, il est nécessaire de simuler N trajectoires du processus gaussien $G|\mathcal{A}_n$.

En suivant le principe de la méthode SUR, les auteurs proposent donc de choisir le nouveau point à évaluer en minimisant la distance L^2 entre le méta-estimateur et l'estimateur empirique. Ainsi, le nouveau point à évaluer est

$$x_{n+1}^* = \operatorname{argmin}_{x_{n+1} \in \mathbb{X}} \gamma_{n+1}(x_{n+1}) := \mathbb{E} \left((\hat{q}_l(G) - q_{n+1})^2 | \mathcal{A}_n \right)$$

où q_{n+1} est donc calculé à partir de \mathcal{A}_n mais aussi de x_{n+1} et de son évaluation $g(x_{n+1})$ qui n'a pas été observé. Une fois encore, il est nécessaire d'avoir recours à des simulations Monte Carlo pour accéder à la quantité $\gamma_{n+1}(x_{n+1})$ pour tout x_{n+1} . Pour cela, on remarque d'abord que

$$\gamma_{n+1}(x_{n+1}) = \mathbb{E} \left[\mathbb{E} \left((\hat{q}_l(G) - q_n)^2 | \mathcal{A}_{n+1} \right) | \mathcal{A}_n \right].$$

On approche alors l'espérance conditionnelle à \mathcal{A}_n par méthode de Monte Carlo parce qu'on connaît la loi de $G(x_{n+1})|\mathcal{A}_n$ (étapes 1, 2 et 3), et l'espérance conditionnelle à \mathcal{A}_{n+1} par le raisonnement précédent (étapes a, b et c). Cela donne

- 1) Pour j allant de 1 à N' , on simule une trajectoire $G_n^{(j)}$ de la loi à posteriori de $G|\mathcal{A}_n$.
- 2) Pour tout j allant de 1 à N' , on calcule $y = G_n^{(j)}(x_{n+1})$ et
 - a) On calcule comme expliqué plus haut les éléments $q^{(n+1,i)}$ pour i allant de 1 à N mais avec les informations \mathcal{A}_n et $(G(x_{n+1}), y)$ (on rappelle que cette étape implique la simulation de N trajectoires de processus gaussien).
 - b) On calcule la moyenne empirique

$$q_{n+1}(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q^{(n+1,i)}.$$

c) On calcule la variance empirique

$$\Gamma_{n+1}(x, y) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(q^{(n+1,i)} - q'_n(x_{n+1}, y) \right)^2.$$

3) On calcule la seconde espérance conditionnelle par méthode Monte Carlo

$$\gamma_{n+1}(x_{n+1}) = \frac{1}{N'} \sum_{k=1}^{N'} \Gamma_{n+1}(x_{n+1}, y) \phi_{(m_n(x_{n+1}), s_n^2(x_{n+1}))}(y).$$

Cette méthode est statistiquement bien justifiée et elle fonctionne très bien en pratique pour les petites dimensions, comme on peut le voir dans les simulations numériques des articles [6] et [56]. Malheureusement, il apparaît clairement que la seule évaluation de ce critère en un point a une complexité de calcul énorme. Elle nécessite la simulation de N trajectoires du processus gaussien $G|\mathcal{A}_n$ puis pour chacune de ces trajectoires i , N' trajectoires du processus gaussien a posteriori $G|\mathcal{A}_n \cup (x, G_n^i(x))$. Le but étant de trouver le x_{n+1} qui minimise ce critère, il faut en plus faire cela pour tous les x_{n+1} candidats à l'évaluation. Même si l'étape 1 est commune à tous ces points x_{n+1} la complexité de calcul de la méthode SUR ainsi définie est très importante et ne peut pas être raisonnablement utilisée en dimension supérieure ou égale à 3.

Ces deux références sont, à notre connaissance, les méthodes actuellement les plus performantes dans la catégorie des critères avec fonctions d'amélioration, pour estimer le quantile dans un contexte de code numérique très coûteux. Nous avons pu voir que le problème de complexité de calcul s'expliquait en grande partie parce que l'estimateur courant (6.7) est très peu manipulable. En effet, on est obligé d'avoir recourt à des simulations coûteuses pour le calculer, même si l'on considère sa version empirique. Dans le Chapitre 7, nous proposons donc d'étudier d'avantage le second estimateur du quantile (6.6). Nous verrons qu'il existe une forme analytique de la version empirique de cet estimateur qui le rendra beaucoup plus manipulable. Cela nous permettra de proposer deux nouvelles stratégies de type SUR avec des complexités de calcul plus raisonnables. Nous appliquerons ces stratégies sur des exemples numériques pour montrer qu'elles fonctionnent bien.

Chapter 7

Estimation of percentile in numerical black box

The results of this chapter are derived from the paper "Sequential design of experiments for estimating percentiles of black-box functions" of T. Labopin-Richard and V. Picheny, submitted in the journal *Statistica Sinica*.

7.1 Introduction

In the last decades, the question of designing experiments for the efficient exploration and analysis of numerical black-box models has received a wide interest, and metamodel-based strategies have been shown to offer efficient alternatives in many contexts, such as optimization or uncertainty quantification.

We consider here the question of estimating percentiles of the output of a black-box model, with the help of Gaussian Process (GP) metamodels and sequential sampling. More precisely, let $g : \mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ denote the output of interest of the model, the inputs of which can vary within \mathbb{X} . We assume here that the multivariate input X is modelled as a random vector; then, our objective is to estimate a percentile of $g(X)$:

$$q_\alpha(g(X)) = q_\alpha(Y) = F_Y^{-1}(\alpha), \quad (7.1)$$

for a fixed level $\alpha \in]0, 1[$, where $F_U^{-1} := \inf\{\mathbf{x} : F_U(\mathbf{x}) \geq u\}$ denotes the generalized inverse of the cumulative distribution function of a random variable U . We consider here only random vectors X and functions g regular enough to have $F_Y(F_Y^{-1}(\alpha)) = \alpha$ (that is, F_Y is continuous). Since the level α is fixed, we omit the index in the sequel.

A natural idea to estimate a percentile consists in using its empirical estimator: having at hand a sample $(X_i)_{i=1,\dots,n}$ of the input law X , we run it through the computer model to obtain a sample $(Y_i)_{i=1,\dots,n}$ of the output Y . Then, denoted $Y_{(k)}$ the k -th order statistic of the previous sample, the estimator

$$q_n := Y_{(\lfloor n\alpha \rfloor + 1)}, \quad (7.2)$$

is consistent and asymptotically Gaussian under weak assumptions on the model (see [35] for more details). However, for computationally expensive models, the sample size is drastically limited, which makes the estimator (7.2) impractical. In that case, one may replace the sample $(X_i)_i$ by a sequence of well-chosen points that provide a useful information for the percentile estimation. Besides, if the points X_i are not sampled with the distribution of X , the empirical percentile (7.2) is biased, so another estimator must be used.

In [21], the authors proposed an estimator based on the variance reduction or on the controlled stratification and give asymptotic results. Nevertheless, the most usual approach of this problem is a Bayesian method which consists in assuming that g is the realization of a well-chosen Gaussian process. In this context, [74] propose a two-step strategy: first, generate an initial set of observations to train a GP model and obtain a first estimator of the percentile, then increase the set of observations by a second set likely to improve the estimator. In [57], the authors proposed a sequential method (called GPQE and GPQE+ algorithms), based on the GP-UCB algorithm of [42], that is, making use of the confidence bounds provided by the Gaussian Process model.

In this paper we propose two new algorithms with acceptable computing-time. They are based on *Stepwise Uncertainty Reduction* (SUR), a framework that has been successfully applied to closely related problem such as optimization [76], or the dual problem of percentile estimation, the estimation of a probability of exceedance [9, 29]. A first strategy has been proposed for the percentile case in [6] and [56] that rely on expensive simulation procedures. Nevertheless, finding a statistically sound algorithm with a reasonable cost of computation, even when the problem dimension increases, is still an open problem.

This chapter is organized as follow. In Section 7.2, we introduce the basics of Gaussian Process modelling, our percentile estimator and the Stepwise Uncertainty Reduction framework. Section 7.3 describes our two algorithms to estimate a percentile. Some numerical simulations to test the two methods are presented in Section 7.4, followed by concluding comments in Section 7.5. Most of the proofs are deferred to the appendix.

7.2 Gaussian Process modelling and sequential experiments

7.2.1 Model definition

We consider here the classical Gaussian Process framework in computer experiments [89, 96, 79]: we suppose that g is the realization of a GP denoted by $G(\cdot)$ with known mean μ and covariance function c .

Given an observed sample $\mathcal{A}_n = \{(\mathbf{x}_1, g_1), (\mathbf{x}_2, g_2), \dots, (\mathbf{x}_n, g_n)\}$ with all $\mathbf{x}_i \in \mathbb{X}$ and $g_i = g(\mathbf{x}_i)$, the distribution of $G|\mathcal{A}_n$ is entirely known:

$$\mathcal{L}(G|\mathcal{A}_n) = GP(m_n(\cdot), k_n(\cdot, \cdot))$$

with $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{X}$,

$$\begin{aligned} m_n(\mathbf{x}) &= \mathbb{E}(G(\mathbf{x})|\mathcal{A}_n) = c_n(\mathbf{x})^T C_n^{-1} \mathbf{g}_n \\ k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \text{Cov}(G(\mathbf{x}), G(\mathbf{x}')|\mathcal{A}_n) = c(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - c_n(\mathbf{x})^T C_n^{-1} c_n(\mathbf{x}') \end{aligned}$$

where we denoted $c_n(\mathbf{x}) = [c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \dots, c(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})]^T$, $C_n = [c(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{1 \leq i, j \leq n}$ and $\mathbf{g}_n = [g_1, \dots, g_n]$. In the sequel, we also denote $s_n^2(\mathbf{x}) = k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x})$.

In the sequel, we will need the following other property of the kriging theory (see [30]).

Proposition 7.2.1. *Parameters of step $n + 1$ are linked to parameters of step n by the one-step update formula :*

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{n+1}(\mathbf{x}) = m_n(\mathbf{x}) + \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x})}{s_n^2(\mathbf{x}_{n+1})} (g_{n+1} - m_n(\mathbf{x}_{n+1})) \\ s_{n+1}^2(\mathbf{x}) = s_n^2(\mathbf{x}) - \frac{k_n^2(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x})}{s_n^2(\mathbf{x}_{n+1})} \\ k_{n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x})k_n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x}')}{s_n^2(\mathbf{x}_{n+1})} \end{array} \right.$$

We can already notice something important in this property: for a fixed new point \mathbf{x}_{n+1} only the mean at step $n + 1$ depends on the evaluation of the code on this point $g(\mathbf{x}_{n+1})$. The variance and covariance can be calculated without this information.

7.2.2 Percentile estimation

Since each call to the code g is expensive, the sequence of inputs to evaluate, $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, must be chosen carefully to make our estimator as accurate as possible. The general scheme based on GP modelling is of the following form:

- For an initial budget N_0 we build a initialisation sample $(\mathbf{x}_0^i, g(\mathbf{x}_0^i))_{i=1 \dots N_0}$, typically using a space-filling strategy. We compute the initialisation estimator of the percentile q_0 .
- At each step $n + 1 \geq N_0 + 1$ and until the budget N of evaluations is reached: knowing the current set of observations \mathcal{A}_n and estimator q_n , we choose the next point to evaluate \mathbf{x}_{n+1}^* , based on a so-called *infill criterion*. We evaluate $g(\mathbf{x}_{n+1}^*)$ and update the observations \mathcal{A}_{n+1} and the estimator q_{n+1} .
- q_N is the estimator of the percentile to return.

In the following, we describe first the estimator we choose, then the sequential strategy adapted to the estimator.

Percentile estimator

First, from a GP model we extract a percentile estimator. Considering that, conditionally on \mathcal{A}_n , the best approximation of $G(\mathbf{x})$ is $m_n(\mathbf{x})$, an intuitive estimator is simply the percentile of the GP mean:

$$q_n := q(m_n(X)) = q(\mathbb{E}[G(X)|\mathcal{A}_n]). \quad (7.3)$$

This is the estimator chosen for instance in [74].

Another natural idea can be to consider the estimator that minimizes the mean square error $\mathbb{E}((q - q_n)^2)$ among all \mathcal{A}_n -measurable estimator:

$$q_n = \mathbb{E}(q(G(X))|\mathcal{A}_n). \quad (7.4)$$

This estimator is used for instance in [57].

Despite its theoretical qualities, this estimator suffers from a major drawback, as it cannot be expressed in a computationally tractable form, and must be estimated using simulation techniques, by drawing several trajectories of $G(\cdot)$, computing the percentile of each trajectory and averaging.

Hence, in the sequel, we focus on the estimator (7.3), which allows us to derive closed-form expressions of its update when new observations are obtained (see Section 7.3).

Remarque 7.2.2. *In the case of the dual problem of the probability of failure estimation $u(g) = \mathbb{P}(g(X) > u)$, this later estimator is easier to compute. Indeed, is shown in [9]:*

$$\mathbb{E}(u(G)|\mathcal{A}_n) = \mathbb{E}\left(\int_{\mathbb{X}} \mathbf{1}_{G>u} dP_X\right) = \int_{\mathbb{X}} p_n dP_X,$$

where $p_n(\mathbf{x}) = \Phi\left(\frac{m_n(\mathbf{x}) - u}{s_n(\mathbf{x})}\right)$, for Φ the cumulative distribution function of the standard Gaussian distribution. This compact form is due to the possibility to swap the integral and expectation, which is not feasible for the percentile case.

Sequential sampling and Stepwise Uncertainty Reduction

We focus here on methods based on the sequential maximization of an infill criterion, that is, of the form:

$$\mathbf{x}_{n+1}^* = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}_{n+1} \in \mathbb{X}} J_n(\mathbf{x}_{n+1}), \quad (7.5)$$

where J_n is a function that depends on \mathcal{A}_n (through the GP conditional distribution) and q_n .

Intuitively, an efficient strategy would explore \mathbb{X} enough to obtain a GP model reasonably accurate everywhere, but also exploit previous results to identify the area with response values close to the percentile and sample more densely there.

To this end, the concept of Stepwise Uncertainty Reduction (SUR) has been proposed originally in [48] as a trade-off between exploitation and exploration, and has been successfully adapted to optimization [103, 76] or probability of failure estimation frameworks [9, 29]. The general principle of SUR strategies is to define an uncertainty measure related to the objective pursued, and add sequentially the observation that will reduce the most this uncertainty. The main difficulty of such an approach is to evaluate the potential impact of a candidate point \mathbf{x}_{n+1} without having access to $G(\mathbf{x}_{n+1}) = g_{n+1}$ (that would require running the computer code).

In the percentile estimation context, [56] and [6] proposed to choose the next point to evaluate as the minimizer of the conditional variance of the percentile estimator (7.4). This strategy showed promising results, as it substantially outperforms pure exploration, and, in small dimension, manages to identify the percentile area (that is, where f is close to its percentile) and choose the majority of the points in it. Nevertheless, computing $V_n(\mathbf{x})$ in [56] or [6] is very costly, as it requires drawing many GP realizations, which hinders its use in practice.

In next sections, we propose other functions J which also quantify the uncertainty associated with our estimator, but which have closed forms and then are less expensive to compute. To do so, we first have to exhibit the formula to update at step n the current estimator q_n (build on \mathcal{A}_n) to $q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})$ the estimator of step $n + 1$ if we had chosen $\mathbf{x}_{n+1}^* = \mathbf{x}_{n+1}$.

7.3 Two sequential strategies for percentile estimation

7.3.1 Update formula for the percentile estimator

In this section, we express the estimator $q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})$ as a function of the past observations \mathcal{A}_n , the past percentile estimator q_n , a candidate point \mathbf{x}_{n+1} and its evaluation g_{n+1} .

We decide to work with the sequential estimator (7.3) which is at step n the percentile of the random vector $m_n(X)$. Since no closed-form expression is available for this estimator, we decide to approach it by using the empirical percentile. Let $\mathbf{X}_{\text{MC}} = (\mathbf{x}_{\text{MC}}^1, \dots, \mathbf{x}_{\text{MC}}^l)$ be an independent sample distributed as X of size l . We compute $m_n(\mathbf{X}_{\text{MC}})$ and order this vector by denoting $m_n(\mathbf{X}_{\text{MC}})_{(i)}$ the i -th coordinate. Then we choose

$$q_n = m_n(\mathbf{X}_{\text{MC}})_{([\alpha]+1)}. \quad (7.6)$$

Remarque 7.3.1. *Since the observation points $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ do not follow the distribution of X , they cannot be used to estimate the percentile. Hence, a different set (\mathbf{X}_{MC}) must be used.*

In the sequel, we denote by \mathbf{x}_n^q the point of \mathbf{X}_{MC} such that

$$q_n = m_n(\mathbf{x}_n^q).$$

This point is referred to as *percentile point*.

Now, let us consider that a new observation $g_{n+1} = g(\mathbf{x}_{n+1})$ is added to \mathcal{A}_n . The key of SUR strategies is to measure the impact of this observation on our estimator q_n , that is, express $q_{n+1} = m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q)$ as a function of g_{n+1} and \mathbf{x}_{n+1} .

First, by Proposition 7.2.1, we have:

$$m_{n+1}(\mathbf{X}_{\text{MC}}) = m_n(\mathbf{X}_{\text{MC}}) + \frac{k_n(\mathbf{X}_{\text{MC}}, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} (g_{n+1} - m_n(\mathbf{x}_{n+1})) \quad (7.7)$$

We see directly that once \mathbf{x}_{n+1} is fixed, all the vector $m_{n+1}(\mathbf{X}_{\text{MC}})$ is determined by the value of g_{n+1} . Our problem is then to find, for any g_{n+1} in \mathbb{R} , which point of \mathbf{X}_{MC} is the percentile point, that is, which point satisfies

$$m_{n+1}(\mathbf{X}_{\text{MC}})_{\lfloor l\alpha \rfloor + 1} = m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q). \quad (7.8)$$

Let us denote $\mathbf{b} = m_n(\mathbf{X}_{\text{MC}})$ and $\mathbf{a} = k_n(\mathbf{X}_{\text{MC}}, \mathbf{x}_{n+1})$, which are vectors of \mathbb{R}^l , and $z = \frac{g_{n+1} - m_n(\mathbf{x}_{n+1})}{s_n^2(\mathbf{x}_{n+1})}$, so that the updated mean simply writes as a linear function of z , $\mathbf{b} + \mathbf{a}z$. Our problem can then be interpreted graphically: each coordinate of $m_{n+1}(\mathbf{X}_{\text{MC}})$ is represented by a straight line of equation:

$$b_i + a_i z, \quad i \in \{1, \dots, l\}, \quad (7.9)$$

and the task of finding \mathbf{x}_{n+1}^q for any value of g_{n+1} amounts to finding the $(\lfloor l\alpha \rfloor + 1)$ lowest line for any value of z .

We can first notice that the lines order changes only when two lines intersect each other. There are at most $L = \frac{l(l-1)}{2}$ intersection points, which we denote I_1, \dots, I_L , in increasing order. We set $I_0 = -\infty$ and $I_{L+1} = +\infty$, and introduce $(B_i)_{0 \leq i \leq L}$, the sequence of intervals between intersection points:

$$B_i = [I_i, I_{i+1}] \text{ for } i \in [0, L] \quad (7.10)$$

For any $z \in B_i$, the order of $(b_i + a_i z)$ is fixed.

Denoting j_i the index of the $\lfloor l\alpha \rfloor + 1$ lowest line, we have:

$$\mathbf{x}_{n+1}^q = \mathbf{x}_{\text{MC}}^{j_i}, \quad z \in B_i, \quad (7.11)$$

the percentile point when $z \in B_i$, which we henceforth denote $\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)$.

Finally, we have shown that

Proposition 7.3.2. *Under previous notations, at step n (when we know \mathcal{A}_n , q_n), for the candidate point \mathbf{x}_{n+1} we get*

$$q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}, g_{n+1}) = \sum_{i=0}^L m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \mathbf{1}_{z \in B_i}.$$

Intuitively, the updated percentile is equal to the updated GP mean at one of the \mathbf{X}_{MC} points, that depends on which interval g_{n+1} (or equivalently, z) falls.

Figure 7.1 provides an illustrative example of this proposition for $l = 5$, and $\alpha = 40\%$. The values of a and b are given by a GP model, which allows us to draw the straight lines (black) as a function of z . Each line corresponds to a point \mathbf{x}_{MC}^i . The intersections for which the percentile point changes are shown by the vertical bars. For each interval, the line corresponding to the percentile point (second lowest line) is shown in bold. We see that depending on the value of z (that is, the value of g_{n+1}), the percentile point changes.

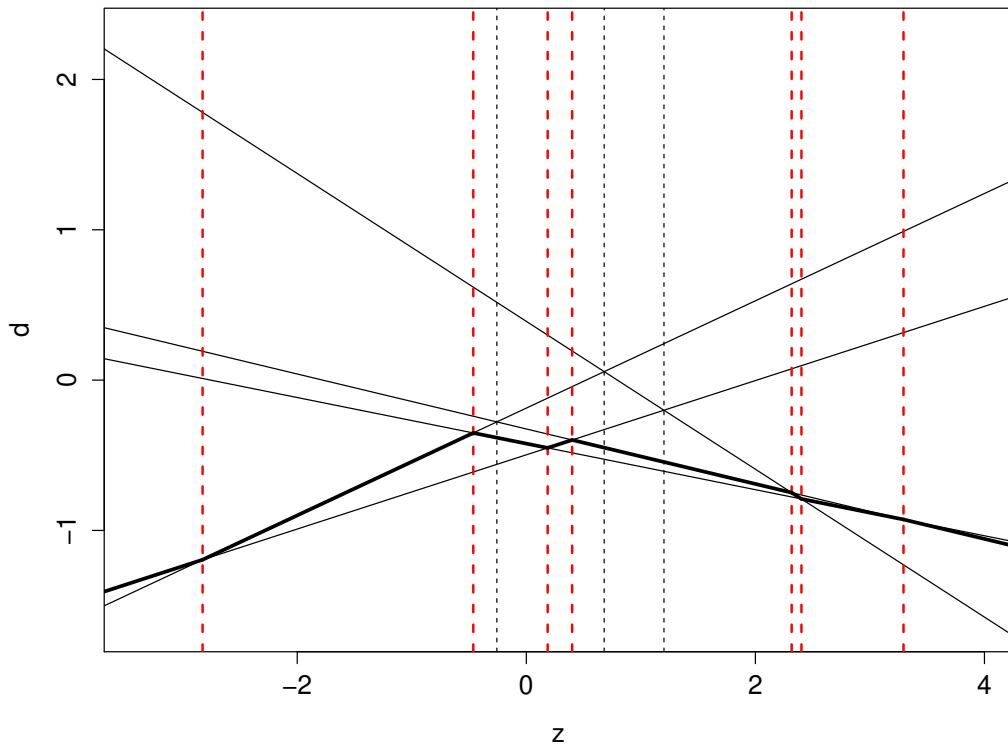


Figure 7.1: Evolution of the percentile point as a function of the value of z .

Remarque 7.3.3. *Although the number of intersections grows quadratically with the MC sample size, finding the set of percentile points can be done very efficiently, based on two important elements: first, the number of distinct percentile points is much smaller than the number of intersections (five and ten, respectively, on Figure 7.1, but this difference increases rapidly with l); second, the order of the straight lines remains the same except for two elements for two adjacent intervals. This latter feature allows us to avoid numerous calls to sorting functions.*

In the following, the notations B_i and L denote the effective intervals, that is, the intervals for which the percentile points are different.

7.3.2 Infill criterion based on probability of exceedance

The proposition 7.3.2 allows us to express the percentile estimator at step $n + 1$ as a function of the candidate point \mathbf{x}_{n+1} and corresponding value g_{n+1} . In this section, we use this formulation to define a SUR criterion, that is, an uncertainty measure related to our estimator that can be minimized by a proper choice of \mathbf{x}_{n+1} .

This criterion is inspired from related work in probability of failure estimation [9] and multi-objective optimization [76], that take advantage of the closed-form expressions of probabilities of exceeding thresholds in the GP framework.

By definition, the percentile is related to the probability of exceedance by

$$\mathbb{P}(G(X) \geq q(G(X))) = 1 - \alpha. \quad (7.12)$$

Our idea is the following. The probability $\mathbb{P}(G(\mathbf{x}) \geq q_n | \mathcal{A}_n)$, available for any $\mathbf{x} \in \mathbb{X}$, is in

the ideal case (G is exactly known) either zero or one, and, if $q_n = q(G(X))$, the proportion of ones is exactly equal to $1 - \alpha$. At step n , a measure of error is then:

$$J_n^{\text{prob}} = \left| \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}(G(\mathbf{x}) \geq q_n | \mathcal{A}_n) d\mathbf{x} - (1 - \alpha) \right| = |\Gamma_n - (1 - \alpha)|, \quad (7.13)$$

with $\Gamma_n = \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}(G(\mathbf{x}) \geq q_n | \mathcal{A}_n) d\mathbf{x}$.

Following the SUR paradigm, the point we would want to add at step $n + 1$ is the point \mathbf{x}_{n+1}^* satisfying

$$\mathbf{x}_{n+1}^* = \underset{\mathbf{x}_{n+1} \in \mathbb{X}}{\text{argmin}} J_{n+1}^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}). \quad (7.14)$$

As seen in proposition 7.3.2, q_{n+1} , and consequently $J_{n+1}^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1})$, depend on the candidate evaluation g_{n+1} , which makes it computable only by evaluating g . To circumvent this problem, we replace g_{n+1} by its distribution conditional on \mathcal{A}_n . We can then choose the following criterion to minimize (indexed by \mathbf{x}_{n+1} to make the dependency explicit):

$$J_n^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}) = |\mathbb{E}_{G_{n+1}}(\Gamma_{n+1}(x + 1)) - (1 - \alpha)| \quad (7.15)$$

where now,

$$\Gamma_{n+1}(x_{n+1}) = \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}(G(\mathbf{x}) \geq q_{n+1} | A_{n+1}) d\mathbf{x}, \quad (7.16)$$

with $A_{n+1} = A_{n+1} \cup (\mathbf{x}_{n+1}, G_{n+1})$ and G_{n+1} is still in its random form.

We show that

Proposition 7.3.4. *Using previous notations and under our first strategy,*

$$\begin{aligned} J_n^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}) = & \left| \int_{\mathbb{X}} \sum_{i=1}^{L-1} \left[\Phi_{r_i^n} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}, I_{i+1}) \right) - \Phi_{r_i^n(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x})} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n(\mathbf{x}_{n+1}, I_i) \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \Phi_{r_i^n} \left((e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}, I_1)) \right) + \Phi_{-r_i^n} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}), -f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}, I_L) \right) \right] d\mathbf{x} - (1 - \alpha) \right| \end{aligned}$$

where

$$e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; \mathbf{x}; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) = \frac{m_n(\mathbf{x}) - m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i))}{\sigma_W}, \quad f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_i) = I_i s_n(\mathbf{x}_{n+1}),$$

$$\sigma_W = s_n(\mathbf{x})^2 + \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})^2}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} - 2 \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2}$$

and $\Phi_{r_n^i}$ is the cumulative distribution function (CDF) of the centered Gaussian law of covariance matrix

$$K = \begin{pmatrix} 1 & r_n^i \\ r_n^i & 1 \end{pmatrix}$$

with

$$r_n^i = \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) - k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{n+1})}{\sqrt{s_n(\mathbf{x})^2 + \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})^2}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} - 2 \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) k_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} s_n(\mathbf{x}_{n+1})}}$$

The proof is deferred to the Appendix.

Despite its apparent complexity, this criterion takes a favorable form, since it writes as a function of GP quantities at step n (m_n , s_n and k_n), which can be computed very quickly once the model is established. Besides, it does not require conditional simulations (as the criterion is [57]), which is a decisive advantage both in terms of computational cost and evaluation precision.

Let us stress here, however, that evaluating this criterion requires a substantial computational effort, as it takes the form of an integral over \mathbb{X} , which must be done numerically. An obvious choice here is to use the set \mathbf{X}_{MC} as integration points. Also, it relies on the bivariate Gaussian CDF, which also must be computed numerically. Very efficient programs can be found, such as the R package `pbivnorm` [63], which makes this task relatively inexpensive.

7.3.3 Infill criterion based on the percentile variance

Accounting for the fact that, although not relying on conditional simulations, J^{prob} is still expensive to compute, we propose here an alternative, that does not require numerical integration over \mathbb{X} .

Since we want q_n to converge to the quantile, it is important that this estimator becomes increasingly *stable*. The variance of $q_{n+1}|A_{n+1}$ is a good indicator of this stability, as it gives the fluctuation range of q_{n+1} as a function of the different possible values of g_{n+1} . However, choosing the point that minimizes at each step n this variance has no sense here, as choosing $\mathbf{x}_{n+1} \in \mathcal{F}_n$ (that is, duplicating an existing observation) would result in $\text{Var}(q_{n+1}|A_{n+1}) = 0$.

Inversing the SUR paradigm, we propose to choose the point that *maximizes* this variance. By doing so, we will obtain the sequence of points which evaluations have a large impact on the estimator value, hence reducing sequentially the instability of our estimator:

$$J_n^{\text{Var}}(\mathbf{x}_{n+1}) = \text{Var}_{G_{n+1}}(q_{n+1}|A_{n+1}) \quad (7.17)$$

where once again A_{n+1} denotes the conditioning on $\mathcal{A}_n \cup (\mathbf{x}_{n+1}, G_{n+1})$, with G_{n+1} random. We can show that:

Proposition 7.3.5. *Using the previous notations, conditionally on \mathcal{A}_n and on the choice of \mathbf{x}_{n+1} :*

$$\begin{aligned} J_n^{\text{Var}}(\mathbf{x}_{n+1}) &= \sum_{i=1}^L [k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})]^2 V(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) P_i \\ &+ \sum_{i=1}^L [m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i)]^2 (1 - P_i) P_i \\ &- 2 \sum_{i=2}^L \sum_{j=1}^{i-1} [m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i)] P_i \\ &\quad [m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{j+1}, I_j)] P_j \end{aligned}$$

where

$$P_i = \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i),$$

$$E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) = \frac{1}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})} \left(\frac{\phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)}{\Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)} \right),$$

and

$$V(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) = \frac{1}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} \left[1 + \frac{s_n(\mathbf{x}_{n+1})\phi(I_{i+1}) - s_n(\mathbf{x}_{n+1})\phi(I_i)}{\Phi(I_{i+1}) - \Phi(I_i)} - \left(\frac{\phi(I_{i+1}) - \phi(I_i)}{\Phi(I_{i+1}) - \Phi(I_i)} \right)^2 \right],$$

for Φ and ϕ the cumulative distribution function and density function of the standard Gaussian law.

The proof is deferred to Appendix.

Again, this criterion writes only as a function of GP quantities at step n (m_n , s_n and k_n). As it does not require numerical integration nor the bivariate CDF, this criterion is considerably cheaper to compute than the previous one.

Figure 7.2 provides an illustration of the concepts behind this criterion, by showing how different values of g_{n+1} affect the estimator. Here, the updated mean is drawn for each interval B_i (that is, with z taking its value in the middle of the interval). The corresponding 90% percentiles, as well as the percentile points \mathbf{x}_{n+1}^q vary substantially, depending on g_{n+1} , which results in a large variance. Hence, the point $\mathbf{x}_{n+1} = 0.9$ can be considered as highly informative for our estimator.

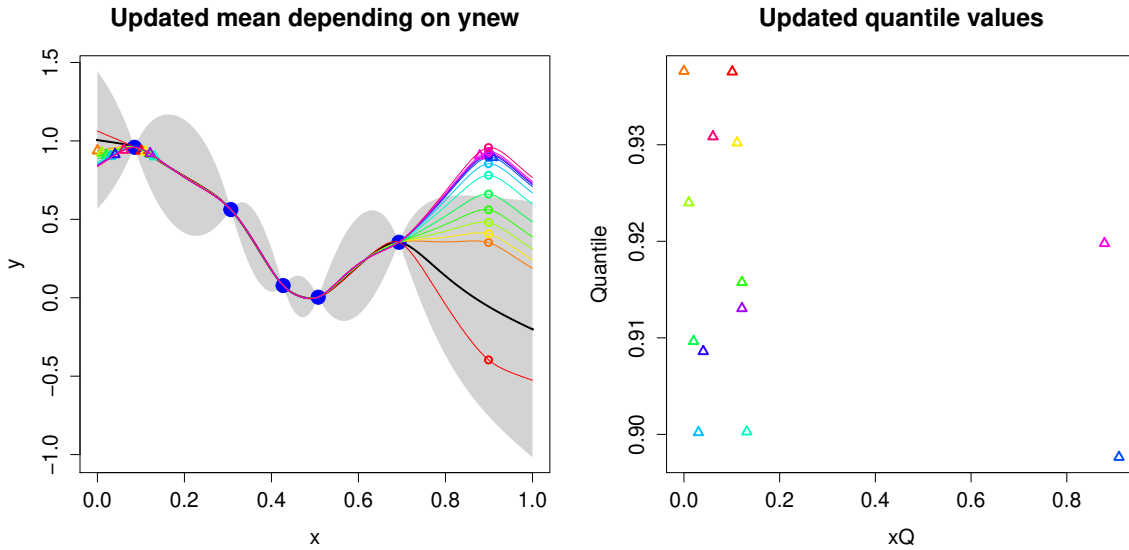


Figure 7.2: Illustration of the J^{Var} criterion. Left: GP model (black line and grey area) and updated GP mean (colored line) depending on the value of g_{new} (circles) for $\mathbf{x}_{n+1} = 0.9$. The corresponding 90% percentiles q_{n+1} are shown with the triangles. Right: percentile values only, indexed by the corresponding percentile points.

7.4 Numerical simulation

7.4.1 Two-dimensional example

As an illustrating example, we use here the classical Branin test function (see Equation 7.19 in Appendix and [39]). On $[0, 1]^2$, the range of this function is approximately $[0, 305]$.

We take: $X_1, X_2 \sim \mathcal{U}[0, 1]$, and search for the 85% percentile. The initial set of experiments consists of seven observations generated using Latin Hypercube Sampling (LHS), and 11 observations are added sequentially using both SUR strategies. The GP models learning, prediction and update is performed using the R package `DiceKriging` [86]. The covariance is chosen as Matérn 3/2 and the mean as a linear trend.

For \mathbf{X}_{MC} , we used a 1000-point uniform sample on $[0, 1]^2$. For simplicity purpose, the search of \mathbf{x}_{n+1} is performed on \mathbf{X}_{MC} , although a continuous optimizer algorithm could have been used here. The actual percentile is computed using a 10^5 -point sample.

Figure 7.4 reports the final set of experiments, along with contour lines of the GP model mean, and Figure 7.5 the evolution of the estimators. In addition, Figure 7.3 shows three intermediate stages of the J_n^{Var} run.

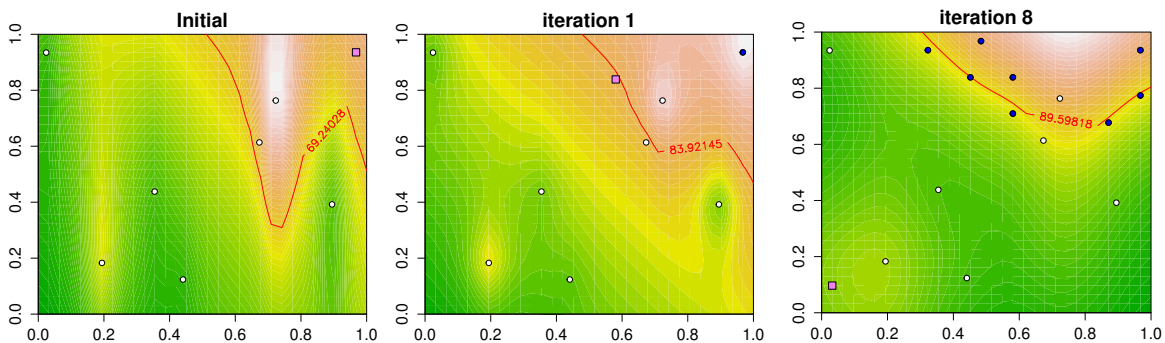


Figure 7.3: Contour lines of the GP mean and experimental set at three different n values (7, 8, and 15) with the J_n^{Var} criterion. The initial observations are shown in white, the observations added by the sequential strategy in blue, and the next point to evaluate in violet. The red line shows the contour line corresponding to the quantile estimate.

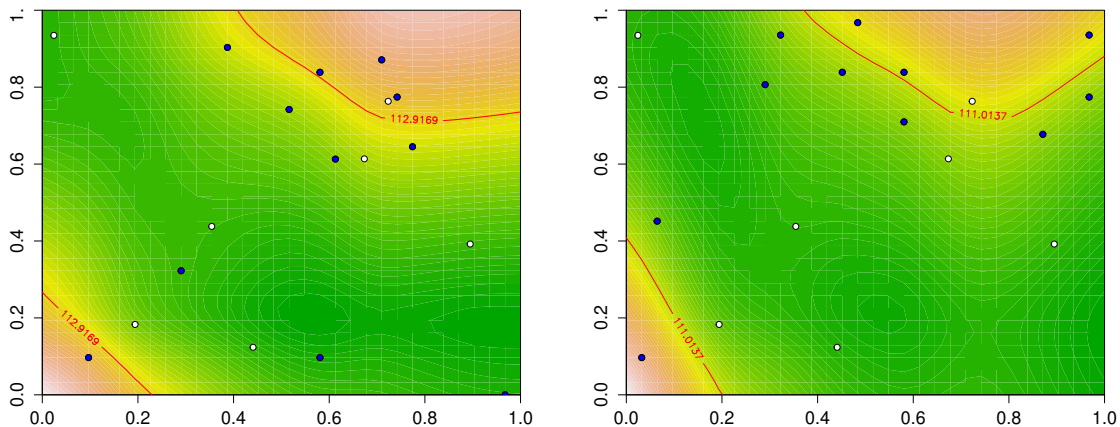


Figure 7.4: Comparison of observation sets obtained using J_n^{prob} (left) and J_n^{Var} (right).

Figure 7.3 reveals the dynamic of our strategy: from the initial design of experiments, the top right corner of the domain is identified as the region containing the highest 15% values. Several observations are added in that region until the kriging approximation becomes accurate, then a new region (bottom left corner) is explored (square point, Figure 7.3 right).

The two strategies lead to relatively similar observation sets (Figure 7.4), that mostly consist of values close to the contour line corresponding to the 85th percentile (exploitation points), and a couple of space-filling points (exploration points). With 18 observations,

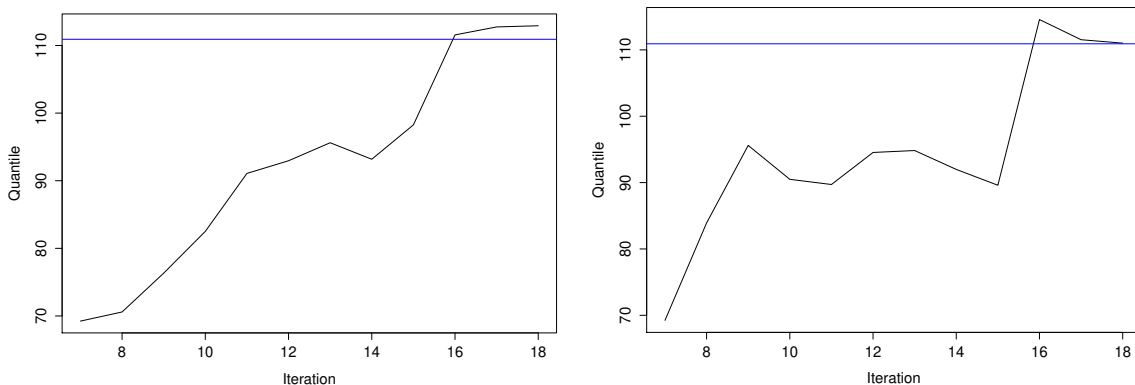


Figure 7.5: Evolution of the percentile estimates using J_n^{prob} (left) and J_n^{Var} (right) for the 2D problem. The blue line shows the actual 85th percentile.

both estimators are close to the actual value (in particular with respect to the range of the function), yet additional observations may be required to achieve convergence.

7.4.2 Four and six-dimensional examples

We consider now two more difficult test functions, with four and six dimensions, respectively (*Hartman* and *Ackley* functions, see Equations 7.20 and 7.21 in Appendix). Both are widely used to test optimization strategies [39], and are bowl-shaped, multi-modal functions.

We take on both cases: $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}\left(\frac{1}{2}, \Sigma\right)$, with Σ a symmetric matrix with diagonal elements equal to 0.1 and other elements equal to 0.05. The initial set of observations is taken as a 30-point LHS, and 60 observations are added sequentially. A 3000-point sample from the distribution of \mathbf{X} is used for \mathbf{X}_{MC} , and the actual percentile is computed using a 10^5 -point sample. Again, the GP covariance is chosen as Matérn 3/2 and the mean as a linear trend.

The criteria are optimized as follow: a (large) set of 10^5 candidates is generated from the distribution of \mathbf{X} , out of which a shorter set of 300 “promising” points is extracted. Those points are drawn randomly from the large set with weights equal to $\phi\left(\frac{q_n - m_n(\mathbf{x})}{s_n(\mathbf{x})}\right)$. Hence, higher weights are given to points either close to the current estimate and/or with high uncertainty. The criterion is evaluated on this subset of points and the best is chosen as the next infill point. In addition, for J_n^{Var} a local optimization is performed, starting from the best point of the subset (using the BFGS algorithm, see [70]). Due to computational constraints, this step is not applied to J_n^{prob} , which is more costly. However, preliminary experiments have shown that only a limited gain is achieved by this step.

As an baseline strategy for comparison purpose, we also include a “random search”, that is, the \mathbf{x}_{n+1} are sampled randomly from the distribution of X .

Several percentile levels are considered in order to cover a variety of situations: 5% and 97% for the 4D problem and 15% and 97% for the 6D problem. Due to the bowl-shape of the functions, low levels are defined by small regions close to the center of the support of X , while high levels correspond to the edges of the support of X . Besides, it is reasonable to assume that levels farther away from 50% are more difficult to estimate.

As an error metric ε , we consider the absolute difference between the percentile estimator and its actual value. We show this error as a percentage of the variation range of the test function. Since X is not bounded, the range being defined as the difference between the 0.5 and 99.5 percentiles of $g(X)$.

To assess the robustness of our approach, the experiments are run for each case, starting

with a different initial set of observations. The evolution of the estimators (average, lowest and highest values over the ten runs) is given in Figures 7.6.

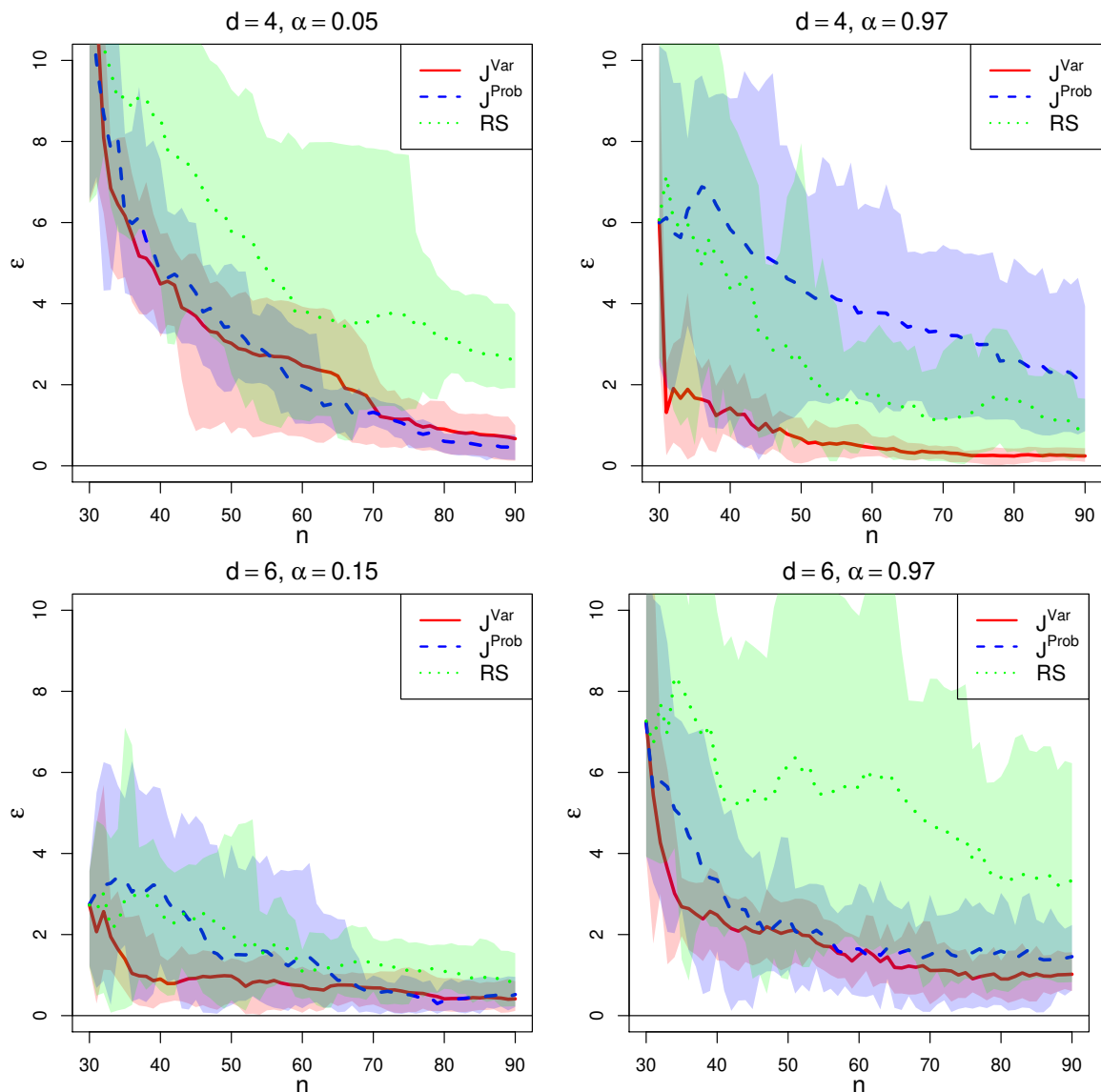


Figure 7.6: Evolution of the percentile estimates using J_n^{prob} (dashed line, blue), J_n^{Var} (plain line, red) or random search (RS, dotted line, green) for the 4D and 6D problems, and several percentile levels. The lines show the average error and the colored areas the 10% and 90% quantile errors over the runs.

First of all, we see that except on one case (4D, $\alpha = 0.97$ and J_n^{prob}), on average both strategies provide estimates with less than 2% error after approximately 30 iterations (for a total of 60 function evaluations), which plainly justifies the use of GP models and sequential strategies in a constrained budget context.

For $d = 4$, $\alpha = 0.05$, both methods seem to converge to the actual percentile, J_n^{prob} being slightly better, in particular in terms of consistency and for the latest steps.

For $d = 4$, $\alpha = 0.97$, J_n^{Var} reaches very quickly for all runs a good estimate (less than 1% error), yet seem to converge slowly to the exact solution. This might be explained by the relative mismatch between the GP model and the test function. J_n^{prob} performs

surprisingly poorly; we conjecture that a more exploratory behavior compared to J_n^{Var} hinders its performance here.

For $d = 6$, $\alpha = 0.15$, both approaches reach consistently less than 1% error. However, they outperform only moderately the random search strategy here. This might indicate that for central percentile values, less gain can be achieved by sequential strategies, as a large region of the design space needs to be learned to characterize the percentile, making space-filling strategies for instance competitive.

Finally, for $d = 6$, $\alpha = 0.97$, both approaches largely outperform random search, yet after a first few very efficient steps seem to converge only slowly to the actual percentile.

In general, those experiments show the ability of our approach to handle multi-modal black-box functions, with input space dimensions typical of GP-based approaches. Our results seem to indicate a better efficiency of the J_n^{Var} criterion, yet the better convergence with J_n^{prob} for $d = 4$, $\alpha = 0.05$ might call for hybrid strategies, with early steps performed with J_n^{Var} and late steps with J_n^{prob} .

7.5 Concluding comments

We have proposed two efficient sequential Bayesian strategies for percentile estimation. Both approaches rely on the analytical update formula for the GP-based estimator, which has been obtained thanks to the particular form of the GP equations and the introduction of the *quantile point* concept. Two criteria have then been proposed based either on probability of exceedance or on variance, for which closed-form expression have been derived, hence avoiding the use of computationally intensive conditional simulations. Numerical experiments in dimensions two to six have demonstrated the potential of both approaches.

There are of course some limitations of the proposed method, that call for future improvements. Both strategies rely on the set \mathbf{X}_{MC} , which size is in practice limited by the computational resources to a couple of thousands at most. This may hinder the use of our method for extreme percentile estimation, or for highly multi-modal functions. Combining adaptive sampling strategies or subset selection methods with our approaches may prove useful in this context.

Accounting for the GP model error (due to an inaccurate estimation of its hyper-parameters or a poor choice of kernel) is also an important task, that may improve greatly the efficiency and robustness of the approach. Embracing a fully Bayesian approach as for instance in [65, 52] may help address this issue, yet at the price of additional computational expense.

7.6 Appendix

7.6.1 Proof of Proposition 7.3.4

In the following, we denote \mathbb{E}_n and \mathbb{P}_n the expectation and the probability conditionally on the event \mathcal{A}_n . Starting from Equation (7.16), we have:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{G_{n+1}}(\Gamma_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})) &= \mathbb{E}_{G_{n+1}} \left[\int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}(G(x) \geq q_{n+1}) | \mathcal{A}_{n+1} dx \right] \\ &= \int_{\mathbb{X}} \mathbb{E}_{G_{n+1}} \left[\mathbb{E}_n \left[\mathbf{1}_{G(x) \geq q_{n+1}(x_{n+1})} | G_{n+1} \right] \right] dx \\ &= \int_{\mathbb{X}} \mathbb{E}_n \left[\mathbf{1}_{G(x) \geq q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})} \right] dx \\ &= \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}_n(G(x) \geq q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})) dx . \end{aligned}$$

We have then:

$$J_{n+1}^{\text{prob}}(\mathbf{x}_{n+1}) = \left| \int_{\mathbb{X}} \mathbb{P}_n(G(x) \geq q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})) dx - (1 - \alpha) \right|.$$

Now, to get an closed form of our criterion, we have to develop $\mathbb{P}_n(G(x) \geq q_{n+1}(x_{n+1}))$. To do so, we use Proposition 7.3.2. Denoting $Z = \frac{G_{n+1} - m_n(\mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2}$, we have:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_n(\mathbf{1}_{G(x) \geq q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})}) &= \sum_{i=0}^L \mathbb{E}_n[\mathbf{1}_{G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i))} \mathbf{1}_{Z \in B_i}] \\ &= \sum_{i=1}^{L-1} (\mathbb{P}_n[G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \leq I_{i+1}] \\ &\quad - \mathbb{P}_n[G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \leq I_i]) \\ &\quad + \mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_1)) \cap Z \leq I_1) \\ &\quad + \mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_L)) \cap Z \geq I_L). \end{aligned}$$

Now,

$$\begin{aligned} T_n &:= \mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \leq I_i) \\ &= \mathbb{P}_n(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - G(x) \leq 0 \cap Z \leq I_i), \end{aligned}$$

is the cumulative distribution function of the couple $(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - G(x), Z) := (W, Z)$, at point $(0, I_i)$. This random vector, conditionally on \mathcal{A}_n is Gaussian. We denote by M and R its mean vector and covariance matrix, respectively.

Thanks to Proposition 7.2.1, we have:

$$m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) = m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})Z, \quad (7.18)$$

which gives

$$M = \begin{pmatrix} m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - m_n(x) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \text{Var}(W) & \text{Cov}(W, Z) \\ \text{Cov}(W, Z) & \text{Var}(Z) \end{pmatrix},$$

with

$$\text{Var}(W) := \sigma_W = s_n(x)^2 + \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})^2}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} - 2 \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})k_n(x, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2},$$

$$\text{Cov}(W, Z) = \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) - k_n(x, \mathbf{x}_{n+1})}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} \quad \text{and} \quad \text{Var}(Z) = \frac{1}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2}.$$

We can conclude by centering and normalizing:

$$\begin{aligned} T_n &= \mathbb{P}_n(W \leq 0 \cap Z \leq I_i) \\ &= \mathbb{P}\left(\frac{W - (m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - m_n(x))}{\sqrt{\text{Var}(W)}} \leq \frac{m_n(x) - m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i))}{\sqrt{\text{Var}(W)}} \cap s_n(\mathbf{x}_{n+1})Z \leq I_i s_n(\mathbf{x}_{n+1})\right) \\ &:= \mathbb{P}(S \leq e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap T \leq f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_i)), \end{aligned}$$

where (S, T) is a Gaussian random vector of law $\mathcal{N}\left(0, \begin{pmatrix} 1 & r_n^i \\ r_n^i & 1 \end{pmatrix}\right)$ with

$$r_n^i := r_n(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) = \frac{k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) - k_n(x, \mathbf{x}_{n+1})}{\sqrt{\text{Var}(W)}s_n(\mathbf{x}_{n+1})}.$$

$$e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) = \frac{m_n(x) - m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i))}{\sqrt{\text{Var}(W)}},$$

and

$$f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_i) = I_i s_n(\mathbf{x}_{n+1}).$$

Finally, we get for $1 \leq i \leq L$,

$$\mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \leq I_i) = \Phi_{r^i} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_i) \right),$$

where we denote Φ_r the cumulative distribution function of the centered Gaussian random vector of covariance matrix

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & r \\ r & 1 \end{pmatrix}.$$

Similarly, for $0 \leq i \leq L$:

$$\mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \leq I_{i+1}) = \Phi_{r^i} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)), f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_{i+1}) \right),$$

and

$$\mathbb{P}_n(G(x) \geq m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) \cap Z \geq I_L) = \Phi_{-r^i} \left(e_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; x; \mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)), -f_n^i(\mathbf{x}_{n+1}; I_L) \right).$$

7.6.2 Proof of Proposition 7.3.5

We first recall the following total variance law formula:

Lemma 7.6.1. *Let E_1, \dots, E_n be mutually exclusive and exhaustive events. Then, for a random variable U , the following equality holds.*

$$\begin{aligned} \text{Var}(U) &= \sum_{i=1}^n \text{Var}(U | E_i) \mathbb{P}(E_i) + \sum_{i=1}^n \mathbb{E}(U | E_i)^2 (1 - \mathbb{P}(E_i)) \mathbb{P}(E_i) \\ &\quad - 2 \sum_{i=2}^n \sum_{j=1}^{i-1} \mathbb{E}(U | E_i) \mathbb{P}(E_i) \mathbb{E}(U | E_j) \mathbb{P}(E_j). \end{aligned}$$

In our case, we want to compute $\text{Var}(q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}) | \mathcal{A}_n) := \text{Var}_n(q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}))$. Since the events $\{Z \in B_i\}_{1 \leq i \leq L}$ are mutually exclusive and exhaustive events, we can apply Lemma 7.6.1:

$$\begin{aligned} \text{Var}_n(q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})) &= \sum_{i=1}^L \text{Var}_n(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) | Z \in B_i) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\ &\quad + \sum_{i=1}^L \mathbb{E}_n \left(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) | Z \in B_i \right)^2 (1 - \mathbb{P}_n(Z \in B_i)) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\ &\quad - 2 \sum_{i=2}^L \sum_{j=1}^{i-1} \mathbb{E}_n \left(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) | Z \in B_i \right) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\ &\quad \times \mathbb{E}_n \left(m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_j)) | Z \in B_j \right) \mathbb{P}_n(Z \in B_j). \end{aligned}$$

Thanks to equation (7.18), we get

$$m_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) = m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})Z.$$

Then,

$$\begin{aligned}
 \text{Var}_n(q_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})) &= \sum_{i=1}^n k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1})^2 \text{Var}_n(Z|Z \in B_i) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\
 &+ \sum_{i=1}^L (m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i), \mathbf{x}_{n+1}) \mathbb{E}_n(Z|Z \in B_i))^2 \\
 &\times (1 - \mathbb{P}_n(Z \in B_i)) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\
 &- 2 \sum_{i=2}^L \sum_{j=1}^{i-1} (m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_i)) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_j), \mathbf{x}_{n+1}) \mathbb{E}_n(Z|Z \in B_j)) \mathbb{P}_n(Z \in B_i) \\
 &\times (m_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_j)) - k_n(\mathbf{x}_{n+1}^q(B_j), \mathbf{x}_{n+1}) \mathbb{E}_n(Z|Z \in B_j)) \mathbb{P}_n(Z \in B_j) .
 \end{aligned}$$

Since Z is a centered Gaussian random variable of variance $s_n(\mathbf{x}_{n+1})^{-2}$, we have:

$$P_i := \mathbb{P}_n(Z \in B_i) = \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i) .$$

To conclude, we have now to find analytical forms for the quantities $\text{Var}(Z | I_i < Z < I_{i+1})$ and $\mathbb{E}(Z | I_i < Z < I_{i+1})$. To do so, let us use the following result on truncated Gaussian random variable (see [99] for proofs):

Lemma 7.6.2. *Let U be a real random variable such that $U \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$. Let u and v be two real numbers. We have:*

$$\mathbb{E}(U|u < U < v) = \mu + \frac{\phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right) - \phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right)}{\Phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right)} \sigma ,$$

$$\text{Var}(U|u < U < v) = \sigma^2 \left[1 + \frac{\frac{u-\mu}{\sigma} \phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right) - \frac{v-\mu}{\sigma} \phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right)}{\Phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right)} - \left(\frac{\phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right) - \phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right)}{\Phi\left(\frac{v-\mu}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{u-\mu}{\sigma}\right)} \right)^2 \right] .$$

We apply Lemma 7.6.2 for $U = Z$, $u = I_i$ and $v = I_{i+1}$ and conclude that

$$E(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) := E_n(Z|Z \in B_i) = \frac{\phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)}{\Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)} \frac{1}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})} ,$$

$$\begin{aligned}
 V(s_n(\mathbf{x}_{n+1}), I_{i+1}, I_i) &:= \text{Var}_n(Z|Z \in B_i) \\
 &= \frac{1}{s_n(\mathbf{x}_{n+1})^2} \left[1 + \frac{I_i s_n(\mathbf{x}_{n+1}) \phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - s_n(\mathbf{x}_{n+1}) I_{i+1} \phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)}{\Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)} \right. \\
 &\quad \left. - \left(\frac{\phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)}{\Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_{i+1}) - \Phi(s_n(\mathbf{x}_{n+1})I_i)} \right)^2 \right] .
 \end{aligned}$$

7.6.3 Test functions

Two-dimensional Branin function:

$$g(\mathbf{x}) = \left(\bar{x}_2 - \frac{5.1\bar{x}_1^2}{4\pi^2} + \frac{5\bar{x}_1}{\pi} - 6 \right)^2 + \left(10 - \frac{10}{8\pi} \right) \cos(\bar{x}_1) + 10 \quad (7.19)$$

with: $\bar{x}_1 = 15 \times x_1 - 5$, $\bar{x}_2 = 15 \times x_2$.

Four-dimensional Hartman function:

$$g(\mathbf{x}) = \frac{-1}{1.94} \left[2.58 + \sum_{i=1}^4 C_i \exp \left(- \sum_{j=1}^4 a_{ji} (x_j - p_{ji})^2 \right) \right], \quad (7.20)$$

with

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 1.2 \\ 3.0 \\ 3.2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 10.00 & 0.05 & 3.00 & 17.00 \\ 3.00 & 10.00 & 3.50 & 8.00 \\ 17.00 & 17.00 & 1.70 & 0.05 \\ 3.50 & 0.10 & 10.00 & 10.00 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.1312 & 0.2329 & 0.2348 & 0.4047 \\ 0.1696 & 0.4135 & 0.1451 & 0.8828 \\ 0.5569 & 0.8307 & 0.3522 & 0.8732 \\ 0.0124 & 0.3736 & 0.2883 & 0.5743 \end{bmatrix}.$$

Six-dimensional Ackley function:

$$g(\mathbf{x}) = 20 + \exp(1) - 20 \exp \left(-0.2 \sqrt{\frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_i^2} \right) - \exp \left[\frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \cos(2\pi x_i) \right] \quad (7.21)$$

Conclusion

La dernière partie de cette thèse concernait l'estimation séquentiel du quantile de la sortie d'un code numérique très coûteux. Dans ce contexte, plutôt que de faire de l'inférence classique avec un échantillon de la loi de sortie, nous avons préféré appliquer une stratégie de planification d'expérience (c'est-à-dire une stratégie pour choisir les points que nous voulions évaluer). La littérature sur le sujet comprend deux papiers importants [56, 6] dans lesquels les auteurs adaptent la méthode SUR introduite dans [9] pour le problème d'évaluation d'une probabilité de défaillance. Ils proposent ainsi une stratégie performante mais ayant une complexité de calcul trop importante pour être utilisée en dimension plus grande que 3. Ce problème de complexité vient en grosse partie du choix d'un estimateur du quantile statistiquement justifié mais aussi peu manipulable (on ne peut avoir accès à sa valeur qu'au travers de simulations de processus gaussien coûteuses). En considérant un estimateur du quantile plus manipulable, nous avons proposé deux nouvelles stratégies d'estimation ayant des complexités de calculs plus raisonnables. Nos simulations numériques montrent que nos méthodes sont performantes, et s'appliquent sans problème en dimension supérieure à 3 (en pratique, nous sommes allés jusqu'à 6). Il serait maintenant intéressant de comparer nos deux méthodes avec celle de [56, 6] pour savoir laquelle est la plus performante en petite dimension. Les simulations numériques du Chapitre 7 soulèvent des interrogations quant à la performance de nos deux méthodes. Il serait intéressant de comprendre précisément dans quel cas l'une est plus performante que l'autre et pourquoi. La question de l'adoption d'une stratégie hybride mixant les deux méthodes est aussi une piste de réflexion possible. Par ailleurs, même si nos critères sont calculables pour des dimensions assez grandes, il est clair que leur complexité augmente avec cette dimension. Une future piste de recherche pourrait donc consister à trouver un moyen de réduire encore ce temps de calcul. Pour le premier critère par exemple, nous devons faire une intégration sur l'espace des entrées. Actuellement, nous utilisons pour cela une approximation Monte Carlo. On peut se demander s'il est possible de faire mieux. De la même manière, pour tous les critères étudiés dans cette partie, nous avons besoin de minimiser une fonction. Sans hypothèse particulière sur cette fonction, l'idée la plus naturelle pour faire cette optimisation est d'évaluer la fonction sur une grille. c'est cette méthode qui est utilisée dans [56] et que nous avons repris pour l'optimisation de notre critère J_n^{prob} . Cependant, cela pose de nombreuses questions. D'abord, comment être sûr que la grille considérée contient bien le minimum ? Comment faut-il régler la précision de la grille pour avoir une approximation suffisamment bonne du minimum tout en conservant un temps de calcul convenable ? Pour optimiser notre critère J_n^{Var} , nous avons essayé d'appliquer l'algorithme BFGS pour obtenir une estimation plus précise du minimum. Cette alternative au calcul sur une grille ne s'est cependant pas avéré très intéressante parce que son gain en précision est minimal comparé à l'augmentation du temps de calcul qu'elle induit. On pourrait alors se pencher sur l'étude de propriétés (type convexité, ...) de nos critères qui permettraient l'application d'algorithmes performants et moins coûteux pour identifier un extremum.

Enfin, nous avons vu avec les simulations numériques que nos méthodes fonctionnent assez bien en pratique sur plusieurs exemples. Il serait maintenant pertinent de se demander si nous pouvions obtenir des garanties théoriques.

La bibliographie concernant l'optimisation dans ce contexte de code numérique très coûteux est actuellement la plus fournie, parce que la forme du problème le rend plus facile à appréhender. On peut voir cela très facilement en réfléchissant seulement au problème du choix de l'estimateur. L'estimateur $M_n = \max(g_1, \dots, g_n)$ est intuitif, manipulable et sa mise à jour lorsqu'on observe une nouvelle évaluation est triviale. Ainsi, beaucoup d'auteurs se sont penchés sur la recherche d'une stratégie performante de choix du design adaptée à cet estimateur. La meilleure et la plus populaire est l'Expected Improvement. Cette stratégie est idéale parce qu'elle fait appel à un critère qui admet une forme analytique que l'on peut implémenter avec un coût de calcul très raisonnable.

On notera cependant, que même sous ces conditions, il est difficile d'obtenir des garanties théoriques de convergence sur la stratégie. Les premiers résultats datent de 2007, lorsque Vazquez et al. montrent dans [102] qu'en appliquant cette stratégie, on obtient une suite de points à évaluer qui est dense dans l'espace des entrées. Ce résultat est important parce que c'est le premier qui donne une justification théorique à l'Expected Improvement mais il n'est pas vraiment pertinent. En effet, pour qu'une méthode de planification soit jugée bonne, il faudrait plutôt montrer qu'elle sélectionne beaucoup de points dans une zone proche de la cible, et quelques points ailleurs (pour ne pas négliger la partie exploration). Un résultat de densité n'est donc pas le plus adapté au problème. Plus récemment encore, Bull donne dans [20] la vitesse de convergence asymptotique de cette méthode. Ce résultat est plus intéressant parce qu'il garantit que la méthode converge vers la bonne cible. On notera au passage que les preuves de cet article, utilisent complètement la structure élémentaire de l'estimateur M_n et notamment sa formule de mise à jour. Pour aller plus loin, il serait encore plus intéressant d'obtenir des résultats sur le comportement non-asymptotique de cette stratégie qui a été créée pour gérer des codes très coûteux et qui est donc appliquée à des expériences à horizon fixé faible. L'obtention de ce genre de résultats, même pour la stratégie simple de l'Expected Improvement est encore un problème ouvert.

Concernant l'estimation du quantile dans ce même contexte, le problème est bien plus compliqué. Comme nous avons pu le voir dans cette troisième partie, rien que le choix d'un estimateur pose des difficultés. Deux estimateurs statistiquement bien justifiés sont utilisés dans la littérature. Malheureusement, l'un n'a pas de forme analytique connue et ne peut donc être calculé que par des simulations extrêmement coûteuses et l'autre a bien une forme analytique mais elle est très compliquée et donc peu manipulable. Il nous est actuellement par exemple impossible d'écrire une formule reliant directement q_n à q_{n+1} . Cela empêche l'obtention de garanties théoriques pour les méthodes d'estimation du quantile. Un travail dans la continuité de cette thèse serait donc l'étude plus approfondie de cet estimateur du quantile pour en comprendre la mise à jour. Cela permettrait peut-être d'aboutir à des garanties théoriques concernant les méthodes de planification présentées dans le Chapitre 7.

Conclusion générale et Perspectives

Cette thèse s'inscrit dans le cadre général de l'inférence sur la sortie de codes numériques ou stochastiques. Elle traite en particulier de l'estimation des deux mesures de risque que sont le quantile et le superquantile. Chacune des parties de cette thèse concerne une méthode d'estimation différente. Les estimateurs les plus naturels pour résoudre le problème posé sont certainement les estimateurs empiriques dont on connaît le comportement asymptotique (Partie 1). Cependant, dès que nous considérons un code numérique dont l'évaluation est coûteuse, il n'est pas possible d'obtenir un échantillon d'observations assez grand pour atteindre le régime asymptotique. De même, il n'est pas réalisable d'observer, dans le cadre d'un code stochastique, un tel échantillon pour chaque x de l'espace des entrées. Dans ces cas, il est alors judicieux de considérer une méthode d'estimation séquentielle à un pas. Ce type de méthode permet le développement de résultats à horizon fini. Ces résultats, dits non-asymptotiques, permettent de connaître la précision que l'on peut espérer obtenir avec notre estimateur dès lors que l'on connaît le budget d'évaluations alloué. Les algorithmes stochastiques (Partie 2-Chapitres 3 et 4) sont un bon exemple de telles stratégies dans le contexte numérique parce que leur forme récursive est très propice à l'obtention d'inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique. En localisant ces algorithmes avec une technique de k -plus proches voisins (Partie 2-Chapitres 5 et 6), on peut aussi obtenir une bonne méthode d'estimation pour le contexte stochastique. Enfin, lorsque le code numérique considéré est très coûteux, il est pertinent de ne pas construire un échantillon d'inférence en fournissant au code des points tirés aléatoirement suivant la loi d'entrée. En effet, lorsque peu d'évaluations sont autorisées, il est important de pouvoir les choisir au mieux pour s'assurer qu'elles donneront bien le maximum d'information. On développe alors une méthode de planification d'expériences en utilisant un point de vue gaussien et bayésien (Partie 3).

Dans la première Partie de cette thèse, nous avons traité de l'estimation empirique du quantile et du superquantile. Nous avons rappelé les résultats classiques sur l'estimateur du quantile. Nous avons de plus proposé des hypothèses simples et faciles à vérifier en pratique pour que l'estimateur du superquantile soit fortement consistant et normalement asymptotique. Cependant, nous avons constaté que certaines lois usuelles ne vérifiaient pas ces hypothèses. Nous avons alors cherché une nouvelle quantité d'intérêt qui, tout en étant une aussi bonne mesure de risque que le superquantile (une mesure de risque cohérente), était définie pour un plus grand nombre de lois et pouvait être estimée empiriquement avec de bonnes propriétés statistiques sous des hypothèses moins fortes. Cette quantité étant construite à partir du superquantile et de la divergence de Bregman bâtie sur une fonction convexe γ , nous l'avons appelé le superquantile de Bregman. Les simulations numériques et les études pratiques que nous avons pu faire avec ce superquantile de Bregman ont confirmé qu'il s'agissait d'une quantité intéressante qui s'estimait très bien empiriquement.

Une question qui se pose naturellement est alors le choix de la fonction γ . Dans le Chapitre 2, nous avons donné des conditions sur cette fonction pour que le superquantile de Bregman associé soit une mesure de risque cohérente. Comme plusieurs fonctions satisfont les conditions, il pourrait maintenant être intéressant de réfléchir à un critère de choix. On peut en effet se demander s'il existe une fonction qu'il est plus judicieux de choisir, ou si cela dépend des problèmes que nous étudions. Enfin, puisque le superquantile classique est très utilisé en économie, il pourrait être pertinent d'essayer d'appliquer nos résultats dans ce domaine (notamment en affectation de capitaux).

La seconde Partie de cette thèse concernait l'estimation séquentielle par algorithme stochastique. Puisque le quantile est le zéro d'une fonction dépendant de la loi sur laquelle on veut inférer, il est estimable, dans le contexte numérique, par un algorithme stochastique de type Robbins Monro. Bien que le comportement asymptotique de cet algorithme stochastique soit

maintenant bien connu, il n'existe pour le moment aucun résultat décrivant le comportement non-asymptotique de l'estimateur du quantile. Dans le Chapitre 3, nous avons écrit de tels résultats dans un cas simple (la loi de Y est à densité minorée). Nous avons aussi présenté des pistes pour traiter du cas général et avons mis en avant les problèmes que nous n'avons pas réussi à résoudre. Une évidente perspective à cette thèse serait donc de lever ces difficultés et de donner ainsi une inégalité non-asymptotique sur le risque quadratique de cet estimateur, sous des hypothèses faibles.

Puisque que le superquantile est la moyenne de la loi tronquée au-dessus de son quantile, on peut aussi estimer cette quantité par un algorithme stochastique. Lorsque le quantile est inconnu, nous avons proposé dans le Chapitre 4 un algorithme bi-dimensionnel qui permet d'estimer simultanément le quantile et le superquantile. Nous avons alors étudié le comportement non-asymptotique de ce double algorithme, en utilisant les résultats du Chapitre 3. Ainsi, si l'on arrivait à relâcher les hypothèses de l'étude non-asymptotique de l'estimateur du quantile, les développements du Chapitre 4 permettraient de conclure également quand à celui du superquantile

Enfin, dans un cadre stochastique, on peut adapter les deux algorithmes précédents en les localisant par la méthode des k -plus proches voisins. C'est-à-dire que l'on adapte les algorithmes stochastiques classiques en ne faisant des mises à jours que lorsque la nouvelle entrée à évaluer est proche de l'entrée cible (ce qui devrait impliquer que la sortie observée est proche de celle ciblée). Lorsque l'on plonge ainsi une méthode d'estimation de type Robbins-Monro dans une méthode non-paramétrique de k -plus proches voisins, on crée un algorithme avec plusieurs paramètres à régler (les pas de descente de gradient pour la partie Robbins-Monro et les nombres de voisins pour la partie k -plus proches voisins). Les Chapitres 5 et 6 étaient consacrés à l'étude des ces algorithmes localisés. Nous y avons donné des conditions sur les paramètres pour que les algorithmes produisent des estimateurs consistants et vérifiant des inégalités non-asymptotiques intéressantes. En optimisant les bornes supérieures de ces inégalités, nous avons de plus exhibé les paramètres optimaux pour faire tourner ces algorithmes. Nos propos ont été illustrés par des simulations numériques. Ces simulations nous ont permis de constater que nos algorithmes sont très performants lorsqu'on les paramètre bien (notamment dans le cas du quantile). En revanche, il apparaît aussi clairement que la méconnaissance de la dépendance entre les itérations q_n et Q_n et la probabilité conditionnelle $P_n = \mathbb{P}(X_{n+1} \in kNN_{n+1}(x)|X_1, \dots, X_n)$ implique une sous-optimalité des résultats. En effet, nous ne savons actuellement pas calculer la quantité $\mathbb{E}(q_n P_n)$. Dans le cas du quantile, nous contournerons le problème en utilisant une inégalité de déviation. Cela implique l'obtention d'une inégalité sur le risque quadratique qui n'est vraie qu'à partir d'un certain rang N_0 (déterministe et connu) qui peut être relativement grand. Dans le cas du superquantile, en plus d'utiliser une inégalité de déviation, nous majorons la précédente espérance par l'inégalité de Cauchy-Schwartz. Cette majoration brutale conduit à identifier des paramètres comme optimaux alors qu'ils ne le sont pas tout à fait. Pour faire suite à ces travaux de thèse, il pourrait donc être intéressant d'essayer de mieux comprendre la dépendance en question. Si nous étions simplement capable de calculer l'espérance des produit $P_n q_n$ et $P_n Q_n$, ou même de la majorer plus finement que par l'inégalité de Cauchy-Schwartz, la méthodologie mise en place dans les Chapitres 5 et 6 permettrait de conclure à des inégalités vraies pour des horizons fixés petits et ainsi d'exhiber les vrais paramètres optimaux dans le cas du superquantile.

Pour terminer, il serait maintenant intéressant de travailler sur l'obtention de bornes inférieures qui nous confirmeraient théoriquement l'optimalité de nos bornes supérieures.

La troisième partie de cette thèse traitait l'estimation du quantile dans les codes numériques très coûteux par planification d'expérience. Les stratégies déjà existantes reposent sur la

méthode SUR (provenant de l'estimation d'une probabilité de défaillance) et sur un estimateur du quantile peu manipulable. Elles sont performantes mais leur complexité de calcul explose lorsque la dimension des entrées est plus grande que 3 (notamment parce qu'elles nécessitent la simulation coûteuse de processus gaussiens). En utilisant un estimateur séquentiel du quantile plus manipulable, nous avons proposé deux méthodes de planification moins coûteuses. La première est la plus coûteuse parce qu'elle nécessite une approximation Monte Carlo d'une intégrale sur l'espace des entrées. Cependant aucune de nos deux méthodes ne nécessite la simulation de processus gaussien.

Les simulations numériques du Chapitre 7 ont montré que les deux méthodes fonctionnent très bien et qu'il est possible de les appliquer à de plus grandes dimensions d'espace d'entrée (au moins 6 en pratique). Cela semble donc être une amélioration par rapport aux méthodes existantes. Pour améliorer encore le temps de calcul, il serait intéressant de réfléchir à une méthode plus efficace que celle de Monte Carlo pour l'approximation de l'intégrale. De même, dans toutes les méthodes que nous avons présentées, il est nécessaire de faire une optimisation. Puisque que les critères que nous étudions ne semblent pas convexes, nous n'avons pour le moment pas d'idée pour atteindre l'optimum plus rapidement et avec une meilleure précision. Il serait cependant très utile de trouver un meilleur moyen de faire cette optimisation qui reste très coûteuse.

Un travail important dans la continuité de cette thèse serait aussi de faire une étude comparative de nos deux critères entre eux, mais aussi avec celui de [56, 6] pour savoir quelle méthode est la plus performante en petite dimension.

La question de l'obtention de garanties théoriques (aussi bien asymptotique que non-asymptotique) est aussi un problème ouvert compliqué qu'il serait intéressant d'aborder.

Par ailleurs, on peut se demander s'il serait possible de développer une méthode de planification pour estimer le superquantile. Puisque que ce dernier dépend du quantile, il pourrait être pertinent d'adapter notre méthode pour estimer simultanément les deux quantités d'intérêt.

Enfin, il serait intéressant de réfléchir à une stratégie de planification séquentielle pour les codes stochastiques. Une future piste de recherche pourrait en effet consister à adapter nos critères dans ce contexte stochastique. Pour cela, il semblerait pertinent d'utiliser par exemple la version stochastique du krigeage introduite par Ankenman et al. dans [4].

Bibliography

- [1] Milton Abramowitz and Irene Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 1965.
- [2] Carlo Acerbi. Spectral measures of risk: a coherent representation of subjective risk aversion. *Journal of Banking & Finance*, 26(7):1505–1518, 2002.
- [3] Carlo Acerbi and Dirk Tasche. On the coherence of expected shortfall. *Journal of Banking and Finance*, 26(7):1487–1503, 2002.
- [4] Bruce Ankenman, Barry L. Nelson, and Jeremy Staum. Stochastic kriging for simulation metamodeling. *Operations research*, 58(2):371–382, 2010.
- [5] Daniel W. Apley, Jun Liu, and Wei Chen. Understanding the effects of model uncertainty in robust design with computer experiments. *Journal of Mechanical Design*, 128(4):945–958, 2006.
- [6] Aurélie Arnaud, Julien Bect, Mathieu Couplet, Alberto Pisanisi, and Emmanuel Vazquez. Évaluation d’un risque d’inondation fluviale par planification séquentielle d’expériences. In *42èmes Journées de Statistique*, Marseille, France, 2010.
- [7] Philippe Artzner, Freddy Delbaen, Jean-Marc Eber, and David Heath. Coherent measures of risk. *Mathematical finance*, 9(3):203–228, 1999.
- [8] Olivier Bardou, Noufel Frikha, and Gilles Pagès. Computing var and cvar using stochastic approximation and adaptive unconstrained importance sampling. *Monte Carlo Methods and Applications*, 15(3):173–210, 2009.
- [9] Julien Bect, David Ginsbourger, Ling Li, Victor Picheny, and Emmanuel Vazquez. Sequential design of computer experiments for the estimation of a probability of failure. *Statistics and Computing*, 22(3):773–793, 2012.
- [10] Aharon Ben-Tal, Abraham Charnes, and Marc Teboulle. Entropic means. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 139(2):537–551, 1989.
- [11] Albert Benveniste, Michel Metivier, and Pierre Priouret. *Adaptive algorithms and stochastic approximations*, volume 22. Springer Science & Business Media, 2012.
- [12] Pallab K. Bhattacharya and Ashis K. Gangopadhyay. Kernel and nearest-neighbor estimation of a conditional quantile. *The Annals of Statistics*, 18(3):1400–1415, 1990.
- [13] Patrick Billingsley. *Convergence of probability measures*. John Wiley & Sons, 2013.
- [14] Julius R. Blum. Approximation methods which converge with probability one. *The Annals of Mathematical Statistics*, 25(2):382–386, 1954.

- [15] Vivek S. Borkar. Stochastic approximation with two time scales. *Systems & Control Letters*, 29(5):291–294, 1997.
- [16] Lev M. Bregman. The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming. *USSR computational mathematics and mathematical physics*, 7(3):200–217, 1967.
- [17] Mark Broadie, Deniz Cicek, and Assaf Zeevi. General bounds and finite-time improvement for the kiefer-wolfowitz stochastic approximation algorithm. *Operations Research*, 59(5):1211–1224, 2011.
- [18] Eric Brochu, Vlad M. Cora, and Nando de Freitas. A tutorial on Bayesian optimization of expensive cost functions, with application to active user modeling and hierarchical reinforcement learning. Technical Report UBC TR-2009-023 and arXiv:1012.2599, University of British Columbia, Department of Computer Science, 2009.
- [19] Thomas Browne, Bertrand Iooss, Loïc Le Gratiet, Jérôme Lonchampt, and Emmanuel Remy. Stochastic simulators based optimization by gaussian process metamodels-application to maintenance investments planning issues. *preprint arXiv:1512.07060*, 2015.
- [20] Adam D. Bull. Convergence rates of efficient global optimization algorithms. *The Journal of Machine Learning Research*, 12(10):2879–2904, 2011.
- [21] Claire Cannamela, Josselin Garnier, and Bertrand Iooss. Controlled stratification for quantile estimation. *The Annals of Applied Statistics*, 2(4):1554–1580, 2008.
- [22] Hervé Cardot, Peggy Cénac, and Antoine Godichon. Online estimation of the geometric median in hilbert spaces: non asymptotic confidence balls. *arXiv preprint arXiv:1501.06930*, 2015.
- [23] Hervé Cardot, Peggy Cénac, and Pierre-André Zitt. Efficient and fast estimation of the geometric median in hilbert spaces with an averaged stochastic gradient algorithm. *Bernoulli*, 19(1):18–43, 2013.
- [24] Satya R. Chakravarty. Extended gini indices of inequality. *International Economic Review*, 29(1):147–156, 1988.
- [25] Huailing Chang and Sarah Hanna. Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87(1):167–196, 2004.
- [26] Arthur Charpentier. *Dependence structures and limiting results, with applications in finance and insurance*. These, ENSAE ParisTech, June 2006.
- [27] Herman Chernoff, Joseph L. Gastwirth, and M. Vernon Johns. Asymptotic distribution of linear combinations of functions of order statistics with applications to estimation. *The Annals of Mathematical Statistics*, 38:52–72, 1967.
- [28] Victor Chernozhukov and Len Umantsev. Conditional value-at-risk: Aspects of modeling and estimation. 26(1):271–292, 2000.
- [29] Clément Chevalier, David Ginsbourger, Julien Bect, Emmanuel Vazquez, Victor Picheny, and Yann Richet. Fast parallel kriging-based stepwise uncertainty reduction with application to the identification of an excursion set. *Technometrics*, 56(4):455–465, 2014.

-
- [30] Clément Chevalier, David Ginsbourger, and Xavier Emery. Corrected kriging update formulae for batch-sequential data assimilation. In *Mathematics of Planet Earth*, pages 119–122. Springer, 2014.
- [31] Jean-Paul Chiles and Pierre Delfiner. *Geostatistics: modeling spatial uncertainty*, volume 497. John Wiley & Sons, 2009.
- [32] So Yeon Chun, Alexander Shapiro, and Stan Uryasev. Conditional value-at-risk and average value-at-risk: Estimation and asymptotics. *Operations Research*, 60(4):739–756, 2012.
- [33] Rama Cont, Romain Deguest, and Giacomo Scandolo. Robustness and sensitivity analysis of risk measurement procedures. *Quantitative Finance*, 10(6):593–606, 2010.
- [34] Dennis D. Cox and Susan John. Sdo: A statistical method for global optimization. *Multidisciplinary design optimization: state of the art*, pages 315–329, 1997.
- [35] Herbert A. David and Haikady N. Nagaraja. *Order Statistics*. Wiley, 2003.
- [36] Nando de Freitas, Alex Smola, and Masrour Zoghi. Exponential regret bounds for Gaussian process bandits with deterministic observations. In *International Conference on Machine Learning (ICML)*, 2012.
- [37] Eric de Rocquigny, Vincent Devictor, and Stefan Tarantola, editors. *Uncertainty in industrial practice*. Wiley, 2008.
- [38] Luc Devroye, László Györfi, and Gábor Lugosi. *A probabilistic theory of pattern recognition*, volume 31. Springer Science & Business Media, 2013.
- [39] Luis C.W. Dixon and Greg .P. Szegő. *Towards Global Optimisation 2*, volume 2. North Holland, 1978.
- [40] Marie Duflo and Stephen S. Wilson. *Random iterative models*, volume 22. Springer Berlin, 1997.
- [41] Vaclav Fabian. On asymptotic normality in stochastic approximation. *The Annals of Mathematical Statistics*, 39(4):1327–1332, 1968.
- [42] Nando D. Freitas, Masrour Zoghi, and Alex J. Smola. Exponential regret bounds for gaussian process bandits with deterministic observations. In John Langford and Joelle Pineau, editors, *Proceedings of the 29th International Conference on Machine Learning (ICML-12)*, pages 1743–1750, New York, NY, USA, 2012. ACM.
- [43] Noufel Frikha and Stéphane Menozzi. Concentration bounds for stochastic approximations. *Electron. Commun. Probab*, 17(47):1–15, 2012.
- [44] Edward Furman and Ričardas Zitikis. Weighted premium calculation principles. *Insurance: Mathematics and Economics*, 42(1):459–465, 2008.
- [45] Sébastien Gadat, Thierry Klein, and Clément Marteau. Classification with the nearest neighbor rule in general finite dimensional spaces: necessary and sufficient conditions. *Annales od Statistics*, 44(3):982–1009, 2016.
- [46] Victor Gaposkin and Tee Krasulina. On the law of the iterated logarithm in stochastic approximation processes. *Theory of Probability & Its Applications*, 19(4):844–850, 1975.

- [47] Roman Garnett, Michael A. Osborne, and Stephen J. Roberts. Bayesian optimization for sensor set selection. In *Proceedings of the 9th ACM/IEEE International Conference on Information Processing in Sensor Networks*, pages 209–219. ACM, 2010.
- [48] Donald Geman and Bruno Jedynak. An active testing model for tracking roads in satellite images. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, 18(1):1–14, 1996.
- [49] David Ginsbourger, Rodolphe Le Riche, and Laurent Carraro. A multi-points criterion for deterministic parallel global optimization based on gaussian processes. 2:131–162, 2010.
- [50] Tilmann Gneiting and Roopesh Ranjan. Comparing density forecasts using threshold- and quantile-weighted scoring rules. *Journal of Business & Economic Statistics*, 29(3):411–422, 2012.
- [51] Antoine Godichon. Estimating the geometric median in hilbert spaces with stochastic gradient algorithms: L_p and almost sure rates of convergence. *Journal of Multivariate Analysis*, 146:209–222, 2016.
- [52] Robert B. Gramacy and Herbert K. Lee. Bayesian treed gaussian process models with an application to computer modeling. *Journal of the American Statistical Association*, 103(483):1119–1130, 2008.
- [53] Rob J. Hyndman and Yanan Fan. Sample quantiles in statistical packages. *The American Statistician*, 50(4):361–365, 1996.
- [54] Bertrand Iooss, Georg Van Dorpe, and Devictor Agnes. Response surfaces and sensitivity analyses for an environmental model of dose calculations. *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10):1241–1251, 2006.
- [55] Julien Jacques, Christian Lavergne, and Vincent Devictor. Sensitivity analysis in presence of model uncertainty and correlated inputs. *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10):1126–1134, 2006.
- [56] Marjorie Jala, Céline Lévy-Leduc, Eric Moulines, Emmanuelle Conil, and Joe Wiart. Sequential design of computer experiments for parameter estimation with application to numerical dosimetry. In *Signal Processing Conference (EUSIPCO), 2012 Proceedings of the 20th European*, pages 909–913. IEEE, 2012.
- [57] Marjorie Jala, Céline Lévy-Leduc, Éric Moulines, Emmanuelle Conil, and Joe Wiart. Sequential design of computer experiments for the assessment of fetus exposure to electromagnetic fields. *Technometrics*, 58(1):30–42, 2016.
- [58] Bruce L. Jones, Madan L. Puri, and Ričardas Zitikis. Testing hypotheses about the equality of several risk measure values with applications in insurance. *Insurance: Mathematics and Economics*, 38(2):253–270, 2006.
- [59] Bruce L. Jones and Ričardas Zitikis. Empirical estimation of risk measures and related quantities. *North American Actuarial Journal*, 7(4):44–54, 2003.
- [60] Bruce L. Jones and Ričardas Zitikis. Risk measures, distortion parameters, and their empirical estimation. *Insurance: Mathematics and Economics*, 41(2):279–297, 2007.

-
- [61] Donald R. Jones. A taxonomy of global optimization methods based on response surfaces. *Journal of global optimization*, 21(4):345–383, 2001.
- [62] Donald R. Jones, Matthias Schonlau, and William J. Welch. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global optimization*, 13(4):455–492, 1998.
- [63] Brenton Kenkel. *pbivnorm: Vectorized Bivariate Normal CDF*, 2012. R package version 0.5-1.
- [64] Marc C. Kennedy and Anthony O’Hagan. Predicting the output from a complex computer code when fast approximations are available. *Biometrika*, 87(1):1–13, 2000.
- [65] Marc C. Kennedy and Anthony O’Hagan. Bayesian calibration of computer models. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 63(3):425–464, 2001.
- [66] Vijay R. Konda and John N. Tsitsiklis. Convergence rate of linear two-time-scale stochastic approximation. *Annals of applied probability*, 14(2):796–819, 2004.
- [67] Harold J. Kushner. A new method of locating the maximum point of an arbitrary multipeak curve in the presence of noise. *Journal of Fluids Engineering*, 86(1):97–106, 1964.
- [68] Harold J. Kushner and Jichuan Yang. Stochastic approximation with averaging of the iterates: Optimal asymptotic rate of convergence for general processes. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 31(4):1045–1062, 1993.
- [69] Shigeo Kusuoka. On law invariant coherent risk measures. In *Advances in mathematical economics*, volume 3, pages 83–95. Springer, 2001.
- [70] Dong C. Liu and Jorge Nocedal. On the limited memory bfgs method for large scale optimization. *Mathematical programming*, 45(1-3):503–528, 1989.
- [71] Abdelkader Mokkadem and Mariane Pelletier. Convergence rate and averaging of non-linear two-time-scale stochastic approximation algorithms. *The Annals of Applied Probability*, 16(3):1671–1702, 2006.
- [72] Eric Moulines and Francis Bach. Non-asymptotic analysis of stochastic approximation algorithms for machine learning. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, pages 451–459, 2011.
- [73] Vincent Moutoussamy, Simon Nanty, and Benoît Pauwels. Emulators for stochastic simulation codes. *ESAIM: Proceedings and Surveys*, 48:116–155, 2015.
- [74] Jeremy Oakley. Estimating percentiles of uncertain computer code outputs. *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, 53(1):83–93, 2004.
- [75] Georg C. Pflug. Some remarks on the value-at-risk and the conditional value-at-risk. In *Probabilistic constrained optimization*, pages 272–281. Springer, 2000.
- [76] Victor Picheny. Multiobjective optimization using gaussian process emulators via step-wise uncertainty reduction. *Statistics and Computing*, 25(6):1–16, 2013.

- [77] Iosif Pinelis. An optimal three-way stable and monotonic spectrum of bounds on quantiles: A spectrum of coherent measures of financial risk and economic inequality. *Risks*, 2(3):349–392, 2014.
- [78] Boris T. Polyak and Anatoli B. Juditsky. Acceleration of stochastic approximation by averaging. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 30(4):838–855, 1992.
- [79] Carl E. Rasmussen and Chris K.I. Williams. *Gaussian processes for machine learning*. MIT Press, 2006.
- [80] Herbert Robbins and Sutton Monro. A stochastic approximation method. *The annals of mathematical statistics*, 22(3):400–407, 1951.
- [81] R. Tyrrell Rockafellar. *Convex analysis*. Princeton University Press, 1997.
- [82] R. Tyrrell Rockafellar. Coherent approaches to risk in optimization under uncertainty. *Tutorials in operations research*, 3:38–61, 2007.
- [83] R. Tyrrell Rockafellar and Johannes O. Royset. Random variables, monotone relations, and convex analysis. *Mathematical Programming*, 148(1-2):297–331, 2014.
- [84] R. Tyrrell Rockafellar, Johannes O. Royset, and Sofia I. Miranda. Superquantile regression with applications to buffered reliability, uncertainty quantification, and conditional value-at-risk. *European Journal of Operational Research*, 234(1):140–154, 2014.
- [85] R. Tyrrell Rockafellar and Stan Uryasev. Optimization of conditional value-at-risk. *Journal of risk*, 2:21–42, 2000.
- [86] Olivier Roustant, David Ginsbourger, and Yves Deville. Dicekriging, diceoptim: Two r packages for the analysis of computer experiments by kriging-based metamodeling and optimization. *Journal of Statistical Software*, 51(1):1–55, 2012.
- [87] David Ruppert. *Handbook of sequential analysis*. CRC Press, 1991.
- [88] Jerome Sacks. Asymptotic distribution of stochastic approximation procedures. *The Annals of Mathematical Statistics*, 29(2):373–405, 1958.
- [89] Jerome Sacks, William J. Welch, Toby J. Mitchell, and Henry P. Wynn. Design and analysis of computer experiments. *Statistical science*, 4(4):409–423, 1989.
- [90] Thomas J. Santner, Brian J. Williams, and William I. Notz. *The design and analysis of computer experiments*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [91] Amandine Schreck, Gersende Fort, Eric Moulines, and Matti Vihola. Convergence of Markovian Stochastic Approximation with discontinuous dynamics. *preprint : hal-00966187*, 2014.
- [92] Robert J. Serfling. *Approximation theorems of mathematical statistics*, volume 162. John Wiley & Sons, 2009.
- [93] Yongsheng Song and Jia-An Yan. Risk measures with comonotonic subadditivity or convexity and respecting stochastic orders. *Insurance: Mathematics and Economics*, 45(3):459–465, 2009.

-
- [94] Niranjan Srinivas, Andreas Krause, Sham M. Kakade, and Matthias W. Seeger. Information-theoretic regret bounds for gaussian process optimization in the bandit setting. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 58(5):3250–3265, 2012.
- [95] Niranjan Srinivas, Andreas Krause, Matthias Seeger, and Sham M. Kakade. Gaussian process optimization in the bandit setting: No regret and experimental design. In Johannes Fürnkranz and Thorsten Joachims, editors, *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10)*, pages 1015–1022. Omnipress, 2010.
- [96] Michael L. Stein. *Interpolation of spatial data: some theory for kriging*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [97] Charles J. Stone. Nearest neighbour estimators of a nonlinear regression function. *Proc. Comp. Sci. Statis. 8th Annual Symposium on the Interface*, pages 413–418, 1976.
- [98] Charles J. Stone. Consistent nonparametric regression. *The annals of statistics*, (4):595–620, 1977.
- [99] George M. Tallis. The moment generating function of the truncated multi-normal distribution. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 23(1):223–229, 1961.
- [100] Aimo Torn and Antanas Zilinskas. *Global optimization*. Springer-Verlag New York, Inc., 1989.
- [101] Aad Van Der Vaart. *Asymptotic statistics*. Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics. Cambridge University Press, 1998.
- [102] Emmanuel Vazquez and Julien Bect. Convergence properties of the expected improvement algorithm with fixed mean and covariance functions. *Journal of Statistical Planning and inference*, 140(11):3088–3095, 2010.
- [103] Julien Villemonteix, Emmanuel Vazquez, and Eric Walter. An informational approach to the global optimization of expensive-to-evaluate functions. *Journal of Global Optimization*, 44(4):509–534, 2009.
- [104] Shaun Wang. Premium calculation by transforming the layer premium density. *Astin Bulletin*, 26(01):71–92, 1996.
- [105] Shaun Wang. A class of distortion operators for pricing financial and insurance risks. *Journal of risk and insurance*, 67(1):15–36, 2000.
- [106] Shaun Wang and Jan Dhaene. Comonotonicity, correlation order and premium principles. *Insurance: Mathematics and Economics*, 22(3):235–242, 1998.
- [107] Julia L. Wirch and Mary R. Hardy. Distortion risk measures. coherence and stochastic dominance. In *International Congress on Insurance: Mathematics and Economics*, pages 15–17, 2001.
- [108] Michael Woodroffe. Normal approximation and large deviations for the robbins-monro process. *Probability Theory and Related Fields*, 21(4):329–338, 1972.
- [109] Henryk Zähle. Rates of almost sure convergence of plug-in estimates for distortion risk measures. *Metrika*, 74(2):267–285, 2011.

- [110] Johanna F. Ziegel. Coherence and elicibility. *Mathematical Finance*, DOI : [10.1111/mafi.12080](https://doi.org/10.1111/mafi.12080), 2014.