

UNIVERSITÉ TOULOUSE III PAUL SABATIER
UFR MATHÉMATIQUE INFORMATIQUE GESTION

THÈSE

POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ TOULOUSE III

Discipline : Mathématiques
Spécialité : Statistiques

présentée par

Sébastien DA-VEIGA

ANALYSE D'INCERTITUDES ET DE SENSIBILITÉ
APPLICATION AUX MODÈLES DE CINÉTIQUE CHIMIQUE

Soutenue le mardi 12 juin 2007 devant le jury composé de

M. Anestis ANTONIADIS	Université Grenoble I	<i>Directeur</i>
M. Yannick BARAUD	Université Nice Sophia-Antipolis	<i>Rapporteur</i>
M. Fabrice GAMBOA	Université Toulouse III	<i>Directeur</i>
Mme Irène GIJBELS	Université catholique de Louvain	<i>Rapporteur</i>
Mme Béatrice LAURENT	Université Toulouse III	<i>Examinatrice</i>
M. François WAHL	IFP-Lyon	<i>Examineur</i>



Table des matières

Remerciements	11
Introduction	13
1 Présentation des modèles cinétiques étudiés	17
1.1 Modèle simplifié d'hydrodésulfuration	17
1.2 Modèles d'isomérisation d'hydrocarbures	23
1.2.1 Modèle d'isomérisation du pentane	24
1.2.2 Modèle d'isomérisation du butane	28
1.3 Remarques sur les trois modèles	29
2 Outils classiques en analyse d'incertitudes et de sensibilité	31
2.1 Analyse d'incertitudes	33
2.1.1 Principe général	33
2.1.2 Cadre probabiliste pour l'analyse d'incertitudes	34
2.2 Analyse de sensibilité	38
2.2.1 Méthodes de screening	38
2.2.2 Méthodes locales	39
2.2.3 Méthodes basées sur la variance	40
2.3 Limitations et nouvelles pistes	52
3 Analyse d'incertitudes	55
3.1 Loi jointe des estimateurs de paramètres cinétiques	56
3.2 Algorithme de Métropolis	56
3.2.1 Approche bayésienne pour la loi jointe des estimateurs des paramètres	57
3.2.2 Principe de l'algorithme	58

3.2.3	Diagnostics de convergence d'une chaîne de Markov	60
3.2.4	Application à l'isomérisation du n-butane	70
3.3	Le bootstrap	74
3.3.1	Principe	74
3.3.2	Un exemple : bootstrap des résidus pour le modèle linéaire	76
3.3.3	Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance	77
3.3.4	Application à l'isomérisation du n-butane	78
3.3.5	Limitations de l'approche par bootstrap	79
3.4	Polynômes de chaos	83
3.4.1	Chaos homogène et chaos polynomial	83
3.4.2	Les chaos polynomiaux en pratique	85
3.4.3	Généralisation des polynômes de chaos : choix de la base optimale	86
3.4.4	Application à l'estimation de la distribution des sorties d'un modèle	86
3.4.5	Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance	91
3.4.6	Application au modèle HDS	92
3.4.7	Utilisation des dérivées en polynômes de chaos et applications	93
3.4.8	Limitations de l'approche par polynômes de chaos	97
3.5	Support Vector Regression	99
3.5.1	Introduction à la Support Vector Regression	99
3.5.2	Risque empirique et régularisation	104
3.5.3	Choix des paramètres en SVR	110
3.5.4	Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance	116
3.5.5	Application aux modèles de cinétique chimique	117
3.5.6	Utilisation des dérivées en SVR et applications	123
3.5.7	Limitations de l'approche par SVR	130
4	Analyse de sensibilité	133
4.1	Le problème des facteurs corrélés	133
4.2	Polynômes locaux	137
4.2.1	Définition et propriétés théoriques	138
4.2.2	Application à l'estimation des indices de sensibilité	143
4.2.3	Tests sur modèles analytiques	149
4.2.4	Application à l'isomérisation du n-butane	151
4.2.5	Conclusion sur les polynômes locaux	153
4.3	Estimation d'intégrales de fonctionnelles de densité	153
4.3.1	Réécriture du problème	153
4.3.2	Procédure d'estimation	153
4.3.3	Extension proposée	154
4.3.4	Estimation de fonctionnelles quadratiques	157
4.3.5	Estimation des indices de sensibilité de premier ordre	178
4.3.6	Généralisation aux fonctionnelles de moments conditionnels	186
4.3.7	Quelle est la meilleure procédure pour estimer les indices de sensibilité ?	193
4.3.8	Tests numériques sur des modèles analytiques	195
4.3.9	Perspectives	200

Conclusion	201
Bibliographie	212



Liste des tableaux

1.1	Données expérimentales pour le modèle simplifié d'HDS.	18
3.1	Valeurs de l'indicateur $D_{n_0,n}$ pour les huit paramètres du modèle d'isomérisation du n-butane.	70
3.2	Valeurs de l'indicateur KL pour les huit paramètres du modèle d'isomérisation du n-butane.	72
3.3	Principe du bootstrap.	76
3.4	Distributions et famille de polynômes orthogonaux associée.	87
3.5	Exemples de distributions et de leurs paramètres associés pour la comparaison avec la fonction de répartition empirique de la sortie d'un modèle.	90
4.1	Indices de sensibilité pour le modèle 1.	149
4.2	Indices de sensibilité pour le modèle 2.	150
4.3	Indices de sensibilité pour le modèle 3.	151
4.4	Moments conditionnels pour le modèle 1.	196
4.5	Comparaison polynômes locaux / estimateur efficace pour le modèle 1.	196
4.6	Moments conditionnels pour le modèle 2.	197
4.7	Comparaison polynômes locaux / estimateur efficace pour le modèle 2.	197
4.8	Comparaison Oakley-O'Hagan/polynômes locaux/estimateur efficace pour le modèle 1 du chapitre 4.	198



Table des figures

1.1	Evolution de la concentration de soufre prédite par le modèle.	20
1.2	Evolution de la concentration de soufre prédite par le modèle. Représentation sur une échelle logarithmique.	20
1.3	Comparaison des intervalles et des régions de confiance à 95% pour le modèle simplifié d'HDS.	22
1.4	Schéma simplifié de la transformation du pétrole brut en carburant automobile.	23
1.5	Molécules de n-pentane, d'isopentane (méthylbutane) et de cyclo-pentane (en haut). Molécules de n-hexane et de 2-2-diméthylbutane (au milieu). Molécules de cyclo-hexane et de benzène (en bas). Les atomes de carbone sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc.	25
1.6	Molécules de n-butane et d'isobutane. Les atomes de carbone sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc.	28
2.1	Distribution empirique de la concentration de soufre (en ppm) dans le modèle simplifié d'HDS au temps $t = 0.5$ pour une concentration initiale $S(0) = 14000$ ppm.	37
3.1	Graphe des sommes cumulées pour le paramètre P1 du modèle d'isomérisation du n-butane.	71
3.2	Droites de Henry des distributions des paramètres P1 à P8 du modèle d'isomérisation du n-butane approchées par algorithme de Metropolis.	73
3.3	Droites de Henry des distributions des paramètres P1 à P8 du modèle d'isomérisation du n-butane approchées par bootstrap sur les résidus.	80

3.4	Incertitudes sur la sortie nC4 du modèle d'isomérisation du n-butane pour une condition opératoire particulière à partir d'un échantillon bootstrap de taille $B = 10000$ de la distribution des estimateurs des paramètres.	81
3.5	Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ par un polynôme d'ordre 2.	94
3.6	Régions de confiance approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$	95
3.7	Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ par un polynôme d'ordre 2 avec dérivées et région de confiance associée.	98
3.8	Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ par SVR. Région de confiance associée.	119
3.9	Distribution approchée des paramètres de l'isomérisation du n-butane par SVR.	121
3.10	Distribution approchée du paramètre P7 de l'isomérisation du n-butane par SVR.	122
3.11	Distribution approchée des paramètres P1 à P4 de l'isomérisation du n-pentane par SVR.	124
3.12	Distribution approchée des paramètres P5 à P8 de l'isomérisation du n-pentane par SVR.	124
3.13	Distribution approchée des paramètres P9 à P12 de l'isomérisation du n-pentane par SVR.	125
3.14	Distribution approchée des paramètres P13 à P16 de l'isomérisation du n-pentane par SVR.	125
3.15	Distribution approchée des paramètres P17 à P20 de l'isomérisation du n-pentane par SVR.	126
3.16	Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ par SVR et dérivées. Région de confiance associée.	129
3.17	Distribution approchée des paramètres de l'isomérisation du n-butane par SVR.	130
3.18	Distribution approchée du paramètre P7 de l'isomérisation du n-butane par SVR.	131
4.1	Indices de sensibilité de la sortie C3+C5 pour les conditions opératoires et de charge c_1 (noir) et c_2 (blanc).	152
4.2	Graphe de la fonction du modèle 1 du chapitre 4.	199

Remerciements

Il me serait impossible de commencer ces traditionnels remerciements sans évoquer en premier lieu le *trio* exceptionnel qui m'a encadré durant ces trois années de thèse et les six mois de stage de DEA.

Dans l'ordre chronologique, le premier pilier de ce trio que je tiens à remercier est Fabrice Gamboa, qui dès le DEA m'a encouragé à choisir un stage en entreprise. Mon stage à l'IFP-Lyon a finalement abouti à cette thèse CIFRE. Son enthousiasme, son humour et son soutien indéfectible durant toutes ces années m'ont énormément aidé à réaliser ce travail. Mais par-dessus tout sa disponibilité et ses compétences m'ont permis de progresser et d'entrevoir une partie du travail passionnant qu'il est possible de mener en statistique. Merci aussi pour les sympathiques dîners dans les bouchons lyonnais et les voyages passionnants en Espagne et au Venezuela.

François Wahl m'a accueilli chaleureusement à l'IFP-Lyon lors du stage de DEA, puis m'a soutenu énergiquement pour obtenir une thèse. Je tiens à lui adresser toute ma gratitude pour ses innombrables conseils, qui m'ont ouvert les yeux sur les tenants et aboutissants de la recherche mathématique dans le milieu industriel. Je me souviendrai pendant longtemps de nos très nombreuses discussions, parfois animées mais toujours pertinentes et formatrices.

Durant mon stage de DEA j'ai enfin rencontré Anestis Antoniadis, qui a accepté de diriger cette thèse conjointement avec Fabrice Gamboa. Son aura impressionnante cache un professeur passionné et d'une gentillesse comme j'en ai rarement rencontrée. Ses connaissances semblent être infinies et le côtoyer pendant ces trois années a été un pur bonheur. Ces quelques lignes sont évidemment trop succinctes pour lui exprimer toute ma gratitude mais qu'il sache qu'il est pour beaucoup dans mes choix de carrière pour l'avenir.

Je ne sais si ce trio envisage d'encadrer d'autres thèses dans les années qui viennent, mais je suis persuadé que l'étudiant qui aura la chance de travailler avec eux trouvera une disponibilité, un soutien, une formation et une ambiance de travail extraordinaires. Un immense merci à vous trois !

Je suis également honoré que les professeurs Irène Gijbels et Yannick Baraud aient accepté d'être rapporteurs de cette thèse. Je les remercie pour la lecture attentive de ce manuscrit et pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail. Ma gratitude va également à Béatrice Laurent qui m'a fait le plaisir de participer à mon jury.

Les nombreux échanges mathématiques et amicaux avec Yves Caumel à l'ENSICA ont indéniablement contribué à mon envie de ne pas me contenter de mon diplôme d'ingénieur et de poursuivre des études en mathématiques. Qu'il reçoive ici mes remerciements pour son soutien et ses conseils toujours justes, ainsi que pour les opportunités qu'il m'a offertes pour enseigner.

Durant ces trois années à Lyon, les stagiaires et les doctorants de l'IFP-Lyon que j'ai rencontrés ont contribué à créer une ambiance de travail agréable et chaleureuse. Leur amitié et leurs encouragements m'ont été indispensables pour mener à bien ce travail. Un grand merci à Lucile, Laurent, Nicolas et Julien (pour les nombreuses pauses-café amicales et les

activités hors-IFP), Damien, Régis, Eugenio, Ana Karina, Claude et tous les autres que j'ai moins connus.

Mes amis toulousains m'ont pendant la thèse montré à quel point ils étaient fidèles et je les remercie du fond du coeur pour avoir supporté mes moments de doute et de découragement. Ils ont su me remonter le moral lorsque je m'arrêtais quelques jours à Toulouse ou lorsqu'ils sont venus me rendre visite à Lyon. Merci à vous, tout spécialement à Lydie, Eric, Florian, Rémi, Gaëlle et Vincent.

J'ai également eu la chance de découvrir l'excellent forum internet [les-mathématiques.net](http://les-mathematiques.net) avant de commencer cette thèse. La qualité des différents participants, qu'ils soient enseignants ou étudiants, m'a permis d'y échanger beaucoup d'idées et de vues sur la pratique des mathématiques.

Enfin, je tiens à remercier ma famille et particulièrement mes grands-parents pour leur affection et leur soutien tout au long de mes études.



Introduction

Analyse d'incertitudes et de sensibilité

L'étude de tous les phénomènes physiques, chimiques ou encore économiques, passe par le développement d'un modèle mathématique défini par des équations, des facteurs d'entrée, des paramètres et des sorties, ou plus généralement des variables visant à le caractériser. Une telle modélisation est souvent nécessaire pour mieux comprendre et expliquer un phénomène qui peut être très complexe. C'est le cas par exemple des modèles de cinétique chimique dont l'objectif est de rendre compte des nombreuses réactions chimiques qui se produisent lorsque l'on met en contact des espèces chimiques dans des conditions particulières de température, de pression, etc.

Une bonne modélisation passe par une évaluation de la confiance du modèle. En effet, les entrées et les paramètres sont sujets à de multiples sources d'incertitude. Citons par exemple les erreurs de mesure (un capteur de température ne fournit une mesure que dans les limites de sa précision), les erreurs de reproductibilité expérimentale (une même expérience reproduite dans les mêmes conditions plusieurs fois n'aboutira pas aux mêmes données exactement) ou encore la connaissance partielle d'un ou de plusieurs mécanismes du procédé. Si l'on modélise une réaction de cinétique chimique, la température ou la pression ne sont pas connues précisément, mais à un certain pourcentage près. Il en est de même des concentrations des espèces impliquées dans la réaction. Le schéma réactionnel que l'on choisit pour décrire la réaction n'englobe pas non plus parfaitement tous les phénomènes physiques et chimiques mis en jeu. Puisque certaines entrées et certains paramètres sont incertains, c'est aussi le cas *de facto* des sorties du modèle. Il faut donc évaluer la confiance que l'on peut accorder au modèle, à l'aide d'une étude de l'incertitude des sorties (sachant les incertitudes sur les entrées et les paramètres). Une telle analyse est appelée **analyse d'incertitudes**.

Parmi toutes les entrées et les paramètres qui interviennent dans le modèle que l'on

construit, certains peuvent être assez mal connus (beaucoup d'incertitudes sur leur valeur), mais n'influencer que très peu une sortie du modèle (peu de variations). Au contraire, d'autres peuvent être connus avec peu d'incertitudes, mais avoir un énorme impact sur une sortie (beaucoup de variations). Identifier les entrées et les paramètres influents est par conséquent primordial pour mieux cerner le comportement du modèle ou détecter des anomalies : c'est l'**analyse de sensibilité**.

L'intérêt de cette analyse est multiple. Tout d'abord, elle permet d'améliorer le processus d'ajustement des paramètres. En effet, si un paramètre s'avère très peu sensible, on peut en fixer la valeur et la détermination allège *a priori* d'autant le processus d'ajustement. Par ailleurs, et inversement, l'étude de sensibilité aide à déterminer les zones de grande sensibilité des réponses par rapport aux paramètres, et en concentrant les essais sur celles-ci, on peut estimer les paramètres avec plus de précision. Cela nous permet ainsi de réduire l'incertitude sur les sorties.

De nombreuses méthodes ont déjà été développées ces dernières années pour mener une analyse d'incertitudes et de sensibilité. Un vaste éventail de ces différentes techniques est présenté dans Saltelli, Chan and Scott (2000), avec des exemples issus de divers domaines d'application (chimie, sûreté nucléaire, physique, économie). Certaines d'entre elles ont un champ d'application restreint, dans le sens où elles ne sont utilisables que sur des modèles particuliers, par exemple des modèles linéaires ou encore monotones. D'autres méthodes ont en revanche été élaborées pour être applicables à des modèles les plus généraux possibles.

Notre réflexion initiale sur l'analyse d'incertitudes et de sensibilité repose sur le constat suivant : étant donnée la grande diversité des domaines où ces analyses sont pertinentes, il est préférable de développer des outils et des techniques permettant de traiter des modèles avec aussi peu d'hypothèses que possible. Ce constat est d'autant plus central dans notre démarche que les modèles que nous avons eus à traiter ne vérifient pas les hypothèses habituellement requises par la plupart des méthodes classiques en analyse d'incertitudes et de sensibilité.

Ce travail a été initié à l'IFP (Institut Français du Pétrole). L'IFP développe notamment des procédés de raffinage permettant de valoriser, par des transformations chimiques, les produits issus du fractionnement initial des pétroles bruts. Une bonne connaissance d'un procédé passe par le développement d'un modèle cinétique qui, à partir des constituants qui entrent dans une unité, déduit ceux qui y sont produits. Un tel modèle repose sur des réactions chimiques. Les vitesses de réaction dépendent de paramètres inconnus *a priori*. Le plus souvent, on ne peut pas déduire ces paramètres de considérations théoriques. Pour les déterminer, des expériences sont réalisées dans des installations pilotes. Les paramètres sont ensuite estimés à partir de ces mesures expérimentales : comme celles-ci sont incertaines, les paramètres sont incertains, et un tel problème rentre dans le cadre de l'analyse d'incertitudes. Cette analyse s'avère pertinente pour l'IFP qui cherche à maîtriser la confiance des prédictions de modèles cinétiques, et à l'améliorer en élaborant des stratégies expérimentales adéquates.

La principale difficulté dans ce contexte est que les estimateurs des paramètres ainsi exhibés ne respectent pas deux hypothèses communes à la plupart des outils classiques : d'une part, la loi de ces estimateurs n'est pas connue et il n'est pas possible de générer des

échantillons de cette loi *a priori*. D'autre part, les estimateurs des différents paramètres ne sont pas indépendants. Ces limitations ont motivé notre réflexion et nous ont poussé à rechercher des méthodes originales qui, en se libérant des contraintes de ces hypothèses, ont une portée d'application plus large.

Objectifs et organisation du mémoire de thèse

Nous proposons ici plusieurs approches novatrices qui permettent de travailler sur des modèles très généraux, c'est-à-dire faisant peu d'hypothèses, à la fois sur le modèle lui-même et sur les entrées ou les paramètres qu'il fait intervenir.

Les méthodes classiques d'analyse d'incertitudes et de sensibilité n'utilisent pas en général des outils statistiques extrêmement sophistiqués. Les travaux de Oakley, O'Hagan et Kennedy (O'Hagan (1994), Kennedy and O'Hagan (2001), Oakley and O'Hagan (2004)) sur le formalisme bayésien et la modélisation par processus gaussiens, et plus particulièrement sur leur extension à l'analyse de sensibilité, sont cependant une exception notable. Notre objectif étant de conserver un cadre aussi général que possible, nous avons dû faire appel à des techniques statistiques plus élaborées que celles utilisées habituellement dans ce contexte. Citons par exemple l'étude de la convergence d'une chaîne de Markov à espace d'état non dénombrable, le bootstrap, les polynômes de chaos, la régression à vecteurs de support, la régression non-paramétrique ou encore des méthodes de statistique semi-paramétrique. Chacune de ces méthodes constitue un thème de recherche à part entière, c'est la raison pour laquelle nous ne proposerons ici qu'une présentation rapide de ces concepts et de nombreux points intéressants ne pourront être abordés, par souci de pédagogie. Le lecteur intéressé par ces sujets pourra cependant s'appuyer sur les références citées tout au long de ce mémoire s'il souhaite approfondir ces différents concepts.

Nous avons aussi choisi de centrer notre exposé sur les applications pratiques des méthodes que nous avons développées. En effet, cette thèse a été menée au sein d'un centre de recherche appliquée, ce qui nous a permis d'avoir accès à plusieurs études sur des cas réels de procédés chimiques et ainsi de tester nos méthodes et partager nos conclusions avec des ingénieurs en génie des procédés. Si les outils que nous avons élaborés en analyse de sensibilité ont été étudiés d'un point de vue théorique et validés sur des exemples analytiques, il nous semblait aussi important de les tester sur des problèmes réels.

Le **chapitre 1** est consacré à la présentation de trois modèles de cinétique chimique étudiés par l'IFP. Il s'agit d'un modèle simplifié d'hydrodésulfuration et de deux modèles d'isomérisation d'hydrocarbures, le n-butane et le n-pentane. Ces trois modèles y sont détaillés et seront utilisés pour tester les outils développés en analyse d'incertitudes et de sensibilité tout au long des chapitres suivants.

Afin de justifier notre réflexion sur des méthodes originales, nous proposons dans le **chapitre 2** de faire une synthèse des techniques habituellement mises en oeuvre en analyse d'incertitudes et de sensibilité. L'objectif de ce chapitre est de décrire les hypothèses et les concepts inhérents à ces méthodes. Nous soulignons ainsi les limitations que de telles hypothèses entraînent pour une utilisation sur des problèmes réels. Deux limitations majeures sont mises en avant : l'identification de la loi des estimateurs de paramètres d'un

modèle, et l'hypothèse d'indépendance des facteurs incertains.

Le premier problème est abordé dans le **chapitre 3**, où nous détaillons deux techniques permettant de générer un échantillon des lois suivies par les estimateurs des paramètres d'un modèle donné à partir de mesures expérimentales. La première technique est issue du paradigme bayésien, et fait appel à plusieurs résultats concernant les chaînes de Markov et leur simulation à travers l'utilisation de l'algorithme de Métropolis. La seconde est celle du bootstrap, dont nous rappelons le principe et détaillons l'application à l'estimation de la distribution d'un estimateur du maximum de vraisemblance. Enfin, la dernière partie de ce chapitre présente un travail original et novateur pour estimer une distribution bootstrap à l'aide de surfaces de réponse, en réduisant de manière drastique le nombre de simulations bootstrap nécessaires. Les deux techniques retenues sont l'approximation par polynômes de chaos et la régression à vecteur de support. Toutes ces méthodes sont testées et comparées sur les modèles présentés dans le chapitre 1.

Le problème d'indépendance des paramètres en analyse de sensibilité est quant à lui traité dans le **chapitre 4** par le développement de deux nouvelles méthodes d'estimation des indices de sensibilité. Nous proposons tout d'abord une discussion sur les problèmes d'interprétation et de calcul des indices de sensibilité dans le cas de paramètres corrélés. La première méthode d'estimation basée sur l'utilisation de polynômes locaux est ensuite détaillée et validée, sur des exemples simulés et sur un cas réel. La seconde méthode repose sur l'estimation d'intégrales de fonctionnelles de densité et fait l'objet quant à elle d'un travail théorique important sur l'estimation efficace de certaines fonctionnelles quadratiques. La qualité de cette approche est aussi comparée à celle utilisant les polynômes locaux.

Présentation des modèles cinétiques étudiés

Nous présentons dans ce chapitre les trois modèles de cinétique chimique qui nous serviront tout au long de ce manuscrit pour tester et comparer les différentes méthodes d'analyse d'incertitude et de sensibilité que nous détaillerons dans les chapitres 3 et 4. Ces modèles ont été étudiés à l'Institut Français du Pétrole et des codes de calcul modélisant les phénomènes mis en jeu ont été développés par des ingénieurs en génie des procédés. Nous nous sommes appuyés sur ces codes pour tester nos méthodes.

Le premier modèle que nous étudions est un modèle simplifié d'hydrodésulfuration. Les modèles d'isomérisation du n-butane et du n-pentane seront ensuite présentés. Nous ne détaillerons pas complètement ces modèles pour raison de confidentialité, cependant nous nous sommes efforcés de donner le maximum d'explications pour la compréhension générale de ces procédés et des méthodes que nous appliquerons dans toute la suite du mémoire.

1.1 Modèle simplifié d'hydrodésulfuration

Le modèle d'hydrodésulfuration (HDS) considéré est très simple. Il consiste en une seule réaction :



où S désigne le soufre présent dans un hydrocarbure. La vitesse de la réaction est la suivante :

$$r = kS^\alpha \tag{1.1}$$

où

– S est la concentration de soufre ;

– k et α sont les paramètres (inconnus) du modèle tels que $k > 0$ et $\alpha > 1$.

Sous certaines hypothèses classiques en cinétique chimique, on obtient le modèle suivant :

$$\frac{dS}{dt} = -r = -kS^\alpha.$$

Par résolution analytique il vient alors

$$S_{k,\alpha}(t) = (S(0)^{1-\alpha} - (1-\alpha)kt)^{\frac{1}{1-\alpha}}$$

où $S(0)$ est la concentration initiale de soufre, au temps $t = 0$.

Pour estimer $\theta_0 = (k, \alpha)$, plusieurs expériences sont réalisées dans un réacteur tubulaire. Les données expérimentales recueillies sont résumées dans le tableau 1.1. La concentration initiale de soufre est $S(0) = 14000$ ppm. La première colonne contient l'instant auquel la mesure de soufre est effectuée et la deuxième colonne contient cette mesure de soufre. Ces données sont des données réelles obtenues sur une unité pilote. Notons que certaines mesures sont répétées, en effet, plusieurs campagnes expérimentales ont été lancées sur ce modèle.

t_i	S_i
0.1	2892
0.1	2709
0.2	1109
0.2	1067
0.3	230
0.3	203
0.4	84
0.6	23
0.8	9
1.0	4

TAB. 1.1 – Données expérimentales pour le modèle simplifié d'HDS.

A partir de ces $n = 10$ données expérimentales, on cherche à estimer le vecteur θ_0 des paramètres inconnus k et α . La solution adoptée est l'approche par moindres-carrés pondérés, plus précisément les estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ des paramètres sont définis par

$$\hat{\theta} = (\hat{k}, \hat{\alpha}) = \arg \min_{k>0, \alpha>1} \sum_{i=1}^n \omega_i (S_i - S_{k,\alpha}(t_i))^2$$

où ω_i est le poids attribué à l'expérience i pour $i = 1, \dots, n$ et les $(t_i)_{i=1, \dots, 10}$ sont les temps auxquels on fait la mesure de la concentration de soufre S_i (données du tableau 1.1). Selon les valeurs attribuées à la pondération, l'ajustement des paramètres n'est pas le même et

fournit des estimateurs différents. Deux pondérations ont été envisagées :

- la même pondération est appliquée à toutes les mesures, le modèle est alors considéré comme *homoscédastique*. On a donc $\omega_i = 1$ pour tout $i = 1, \dots, n$;
- la pondération est égale à l'inverse du carré de la mesure. D'un point de vue statistique cela revient à dire que l'écart-type du bruit de mesure est proportionnel à la mesure (cas particulier de modèle *hétéroscédastique*). Dans ce cas $\omega_i = 1/S_i^2$ pour tout $i = 1, \dots, n$.

Si l'on adopte le point de vue du maximum de vraisemblance, ces deux pondérations correspondent aux modèles d'erreurs suivants :

Modèle homoscédastique

$$S_i = S_{k,\alpha}(t_i) + \epsilon_i \quad i = 1, \dots, n$$

où $\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ et σ^2 est la variance des erreurs inconnue.

Modèle hétéroscédastique

$$S_i = S_{k,\alpha}(t_i) + \epsilon_i \quad i = 1, \dots, n$$

où $\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$ avec

$$\Sigma = \sigma^2 \begin{bmatrix} S_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & S_2^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & S_n^2 \end{bmatrix}.$$

Selon le modèle d'erreur choisi, les paramètres optimaux ne sont pas les mêmes :

	\hat{k}	$\hat{\alpha}$
$\omega_i = 1$	1.87	1.25
$\omega_i = 1/S_i^2$	3.32	1.19

Dans toute la suite du manuscrit, nous n'étudierons par souci de concision que le modèle d'erreur homoscédastique, c'est-à-dire

$$S_i = S_{k,\alpha}(t_i) + \epsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (1.2)$$

où $\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ avec σ^2 inconnue. Le travail que nous avons effectué et qui sera présenté dans les chapitres qui suivent peut tout aussi bien s'appliquer au modèle hétéroscédastique.

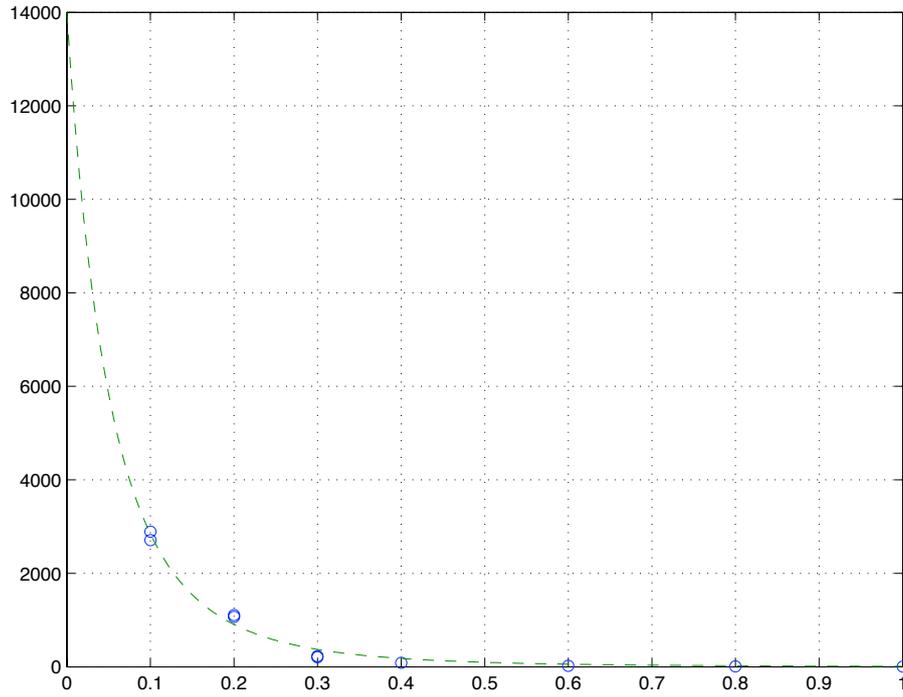


FIG. 1.1 – Evolution de la concentration de soufre prédite par le modèle. Les mesures sont représentées avec des cercles et la prédiction en pointillé. En abscisse la concentration de soufre et en ordonnée le temps.

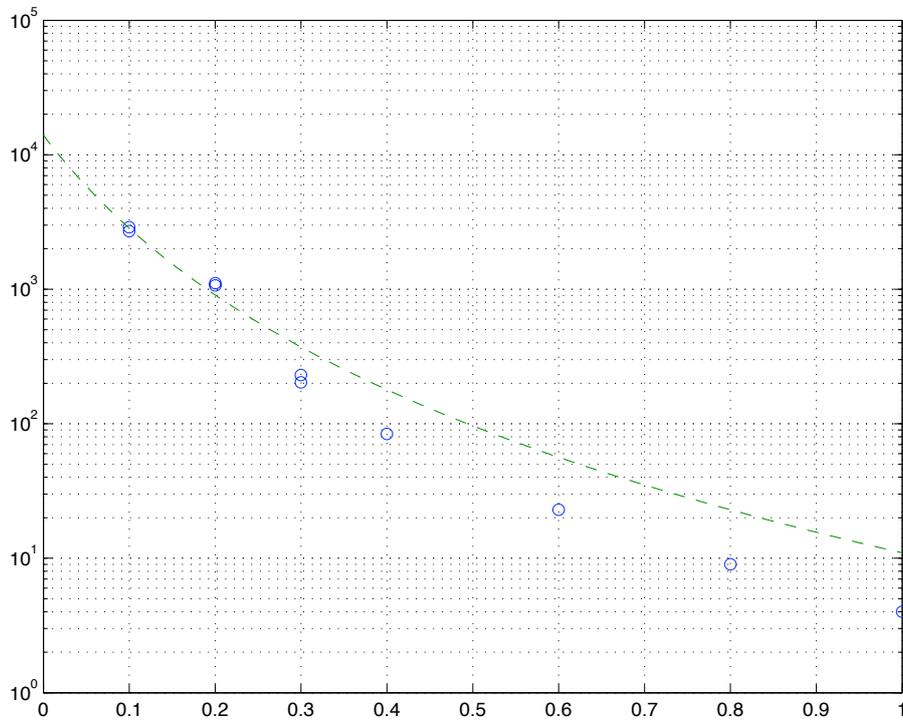


FIG. 1.2 – Evolution de la concentration de soufre prédite par le modèle sur une échelle logarithmique. Les mesures sont représentées avec des cercles et la prédiction en pointillé. En abscisse le logarithme de la concentration de soufre et en ordonnée le temps.

Plaçons-nous donc dans le cadre du modèle (1.2). Les paramètres optimaux $\hat{k} = 1.87$ et $\hat{\alpha} = 1.25$ permettent de vérifier la qualité d'ajustement du modèle. La fonction $S_{\hat{k}, \hat{\alpha}}$ est représentée dans les figures 1.1 et 1.2.

Il est intéressant maintenant d'étudier la région et les intervalles de confiance des estimateurs que nous venons de calculer. Notons $\boldsymbol{\theta} = (k, \alpha)$ pour k et α quelconques et

$$C(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n (S_i - S_{k,\alpha}(t_i))^2 = {}^t \mathbf{r} \mathbf{r}$$

où \mathbf{r} est le vecteur composé des termes $(S_i - S_{k,\alpha}(t_i))$ pour $i = 1, \dots, n$.

De manière classique (voir Antoniadis, Berruyer and Carmona (1992) par exemple), il est possible d'obtenir la région de confiance linéaire au niveau $1 - \gamma$. Elle est donnée par l'équation

$${}^t(\boldsymbol{\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}}) \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}} |_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}} |_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} \end{pmatrix} (\boldsymbol{\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}}) \leq s^2 p F_{p,n-p}^{-1}(1 - \gamma)$$

où $p = 2$ est le nombre de paramètres inconnus, $s^2 = C(\hat{\boldsymbol{\theta}})/(n - p)$ est une estimation de σ^2 et $F_{p,n-p}^{-1}$ est la fonction de répartition inverse de la loi de Fisher à p et $n - p$ degrés de liberté. Remarquons que cette région est une ellipse.

On peut aussi obtenir l'expression des intervalles de confiance linéaires au niveau $1 - \gamma$ pour le j -ième paramètre ($j = 1, 2$) :

$$|\theta_j - \hat{\theta}_j| \leq \sqrt{s^2} \sqrt{rr_j^{-1}} T_{n-p}^{-1}(1 - \gamma/2)$$

où rr_j^{-1} est le j -ième élément diagonale de l'inverse de la matrice ${}^t \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}} |_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} \right) \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}} |_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} \right)$ et T_{n-p}^{-1} est la fonction de répartition inverse de la loi de Student à $n - p$ degrés de liberté.

De manière similaire, la région confiance non-linéaire au niveau $1 - \gamma$ est donnée par (Antoniadis et al. 1992) :

$$C(\boldsymbol{\theta}) - C(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \leq s^2 p F_{p,n-p}^{-1}(1 - \gamma)$$

et les intervalles de confiance par :

$$C(\boldsymbol{\theta}) - C(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \leq s^2 F_{1,n-p}^{-1}(1 - \gamma).$$

Les intervalles et les régions de confiance linéaires et non-linéaires à 95% ont été calculés à partir de ces résultats. Ils sont présentés dans la figure 1.3.

Il est important de noter que \hat{k} et $\hat{\alpha}$ sont des estimateurs qui ne sont pas indépendants (regarder par exemple la région de confiance non-linéaire de la figure 1.3).

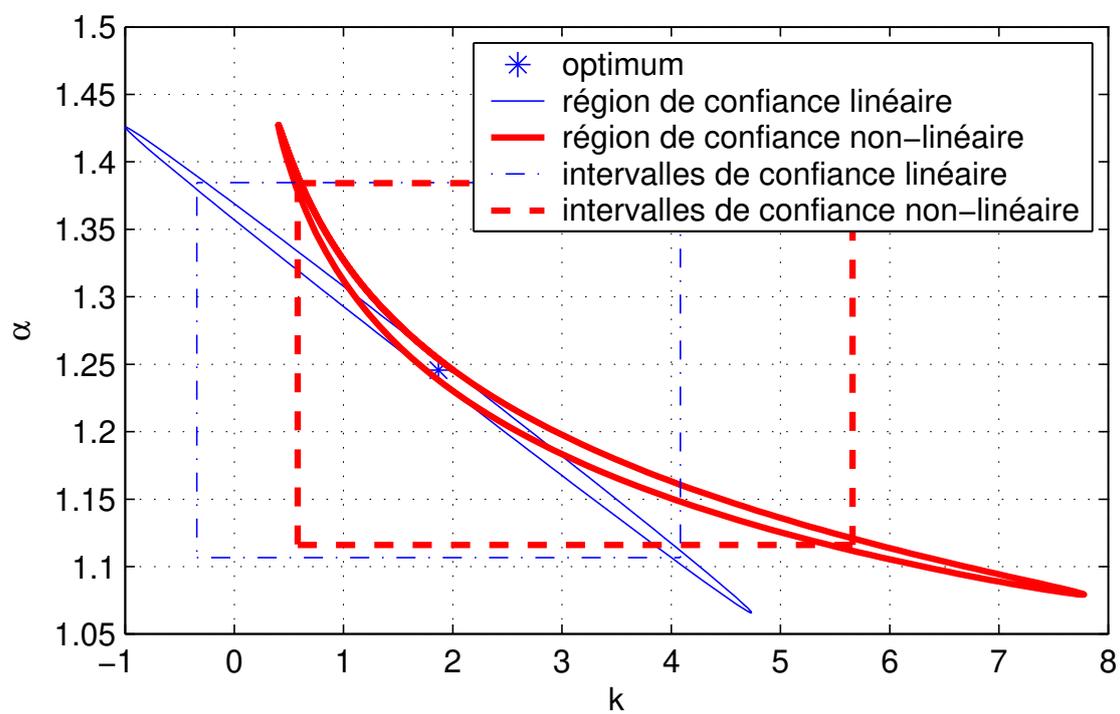


FIG. 1.3 – Comparaison des intervalles et des régions de confiance à 95% pour le modèle simplifié d'HDS.

1.2 Modèles d'isomérisation d'hydrocarbures

Après extraction du pétrole brut, celui-ci est acheminé vers des raffineries dont le but est de transformer ses différents constituants en produits commercialisables, par exemple du carburant automobile.

La première étape dans une raffinerie consiste à séparer les composants légers et lourds du pétrole brut selon leur volatilité. Cette étape est appelée *distillation*. A l'issue de cette séparation, on dispose de coupes légères comme les gaz (molécules de 1 à 4 atomes de carbone) ou l'essence légère (molécules à 5 et 6 atomes de carbone) et de coupes plus lourdes, parmi lesquelles on trouve le kérosène, le gasoil ou les bitumes.

Les essence légères issues de la distillation ont des indices d'octane relativement bas. Depuis la législation sur la teneur en plomb des essences qui limite l'ajout d'additifs à base de plomb, il est donc nécessaire d'améliorer leurs indices d'octane si l'on veut les valoriser comme carburant automobile. On pourra consulter la figure 1.4 pour un schéma résumant cette démarche.

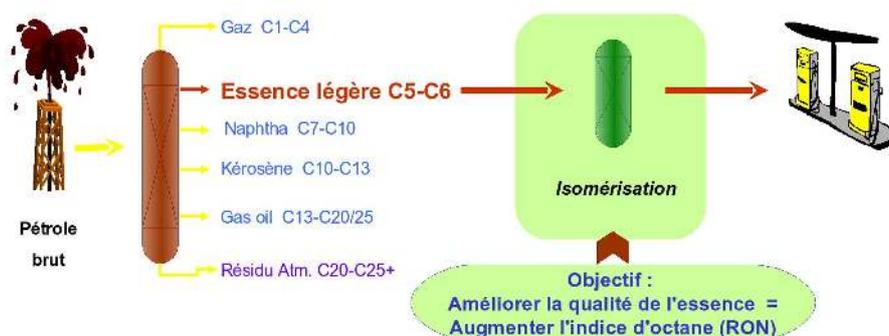


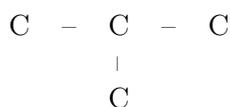
FIG. 1.4 – Schéma simplifié de la transformation du pétrole brut en carburant automobile.

Le procédé le plus intéressant pour atteindre cet objectif est l'isomérisation. Elle consiste à transformer des hydrocarbures paraffiniques à chaîne droite (ou normal-paraffines, notées en toute généralité nP) possédant de bas indices d'octane en hydrocarbures de la même famille à chaîne ramifiée (ou iso-paraffines notées iP) dont les indices d'octane sont nettement plus élevés.

Schématiquement, pour donner un exemple et sans rentrer dans des considérations théoriques, on s'intéresse à la représentation des molécules à quatre atomes de carbone. Une configuration possible pour du butane est celle-ci :



Dans ce schéma, on ne porte que les atomes de carbone (on ignore les atomes d'hydrogène). La molécule que nous avons donnée est du n-butane, car la suite des atomes de carbone forme une chaîne linéaire. Une autre configuration est cependant possible :

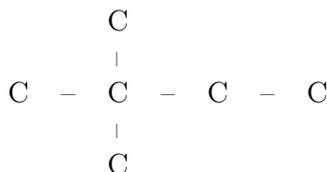


Ici la molécule est branchée : c'est un isomère du butane dénommé isobutane.

Le même principe s'applique quand on s'intéresse à des chaînes plus longues. Par exemple le nC6 (n-hexane) est représenté par :



tandis que l'un des isomères de l'hexane, dénommé diméthylbutane, a pour représentation :



Des images plus élaborées sont fournies dans les figures 1.5 et 1.6, sur lesquelles nous avons également représenté les molécules d'hydrogène.

Nous étudierons ici deux modèles d'isomérisation. Le premier concerne l'isomérisation du n-pentane, c'est-à-dire des molécules à 5 atomes de carbone. Ce procédé se rencontre très fréquemment dans la pratique pétrolière. Le modèle associé est représentatif de cas industriels, c'est la raison pour laquelle nous le détaillons en premier ici. Le second modèle concerne l'isomérisation du n-butane, dont le modèle est beaucoup plus simple. Elle est utilisée dans certaines raffineries où l'isobutane sert à alimenter d'autres procédés pour accroître le rendement en essences de haute qualité.

1.2.1 Modèle d'isomérisation du pentane

Le premier modèle étudié est celui de l'isomérisation du pentane (noté C5), c'est-à-dire des molécules d'hydrocarbures comprenant cinq atomes de carbone (Surla, Casanave, Duchene and Joly 2004). Ce procédé fait intervenir plusieurs réactions chimiques et un certain nombre d'espèces chimiques différentes. Les espèces chimiques prises en compte ici sont les suivantes :

- l'hydrogène qui est nécessaire à la transformation, noté H2 ;
- des paraffines légères (jusqu'à 4 atomes de carbone) qui sont formées lorsque des molécules plus longues se "cassent". Elles sont notées C1, C2, C3 et C4 ;
- des molécules à 5 atomes de carbone. Plus précisément, des paraffines à chaîne droite nC5 (n-pentane), des isomères à chaîne ramifiée (isopentane) et du cyclo-pentane N5. Ces molécules sont représentées dans la première ligne de la figure 1.5 ;
- des molécules à 6 atomes de carbone. Parmi elles, on trouve des paraffines à chaîne droite nC6 (n-hexane), un isomère particulier appelé 2-2-diméthylbutane 22DMB, d'autres isomères que l'on regroupe dans iC6, du cyclo-hexane noté N6 et du benzène noté A6. Ces molécules sont représentées dans les deux dernières lignes de la figure 1.5 ;
- des molécules à 7 atomes de carbone notées C7 si ce sont des paraffines et N7 si ce sont des molécules cycliques saturées ;
- des molécules lourdes, regroupées dans N8.

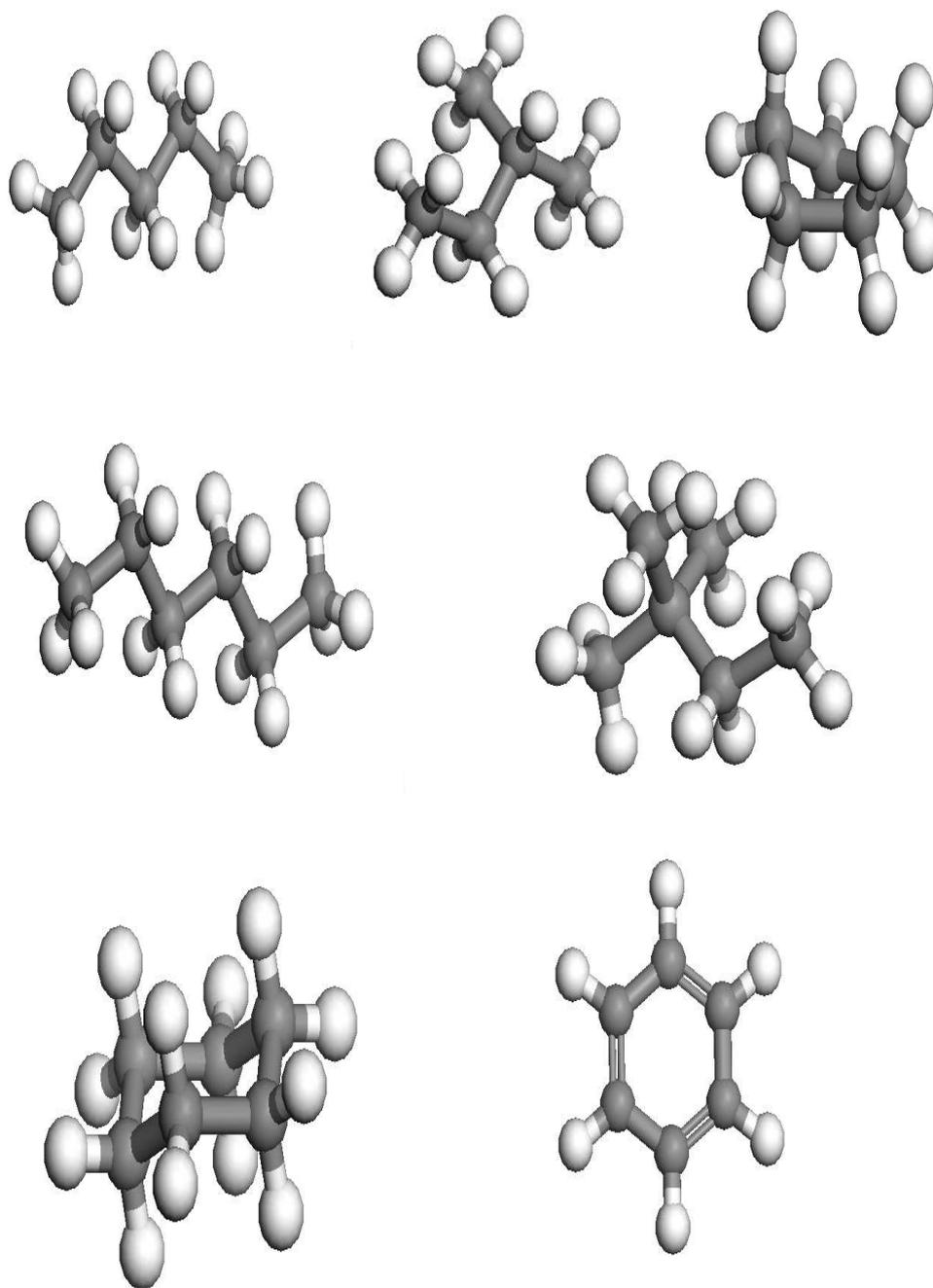
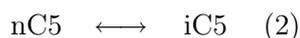
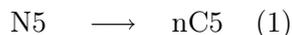


FIG. 1.5 – Molécules de n-pentane, d'isopentane (méthylbutane) et de cyclo-pentane (en haut). Molécules de n-hexane et de 2-2-diméthylbutane (au milieu). Molécules de cyclo-hexane et de benzène (en bas). Les atomes de carbone sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc.

Le schéma cinétique choisi comprend 12 réactions. Ici, par souci de clarté et de concision, nous avons choisi de ne présenter que les réactions qui font intervenir les molécules à cinq et six atomes de carbone :

- Les réactions sur les C5



- Les réactions sur les C6



La réaction (1) concerne le cyclo-pentane, dont le cycle est rompu pour former une paraffine à chaîne droite nC5.

La réaction (2) est l'isomérisation proprement dite des nC5 en iso-paraffines à indice d'octane élevé.

La réaction (3) montre que les liaisons insaturées du benzène A6 se cassent pour former du cyclo-hexane N6, une structure similaire cyclique mais qui ne contient que des liaisons saturées.

La réaction (4) est analogue à la réaction (1), en effet la structure du cyclo-hexane se casse pour former des paraffines à chaîne droite nC6.

La réaction (5) est l'équivalent de la réaction (2) : c'est l'isomérisation des normal-paraffines nC6 en iso-paraffines iC6.

La réaction (6) souligne que les iso-paraffines peuvent aussi se transformer en autres isomères, par exemple le 22DMB.

Les six réactions chimiques que nous venons d'explicitier (ainsi que les six autres non décrites ici) sont réalisées sous certaines conditions de charge (concentrations des espèces chimiques considérées initialement) et certaines conditions opératoires qui sont les suivantes :

- l'âge du catalyseur. En effet, selon si le catalyseur est neuf ou s'il a déjà été utilisé, son efficacité et donc le rendement du procédé d'isomérisation seront modifiés ;
- la température de réaction ;
- la pression ;
- le débit massique auquel on introduit la charge ;
- la vitesse spatiale horaire (ou ppH) qui est le ratio entre le débit massique précédent et la masse du catalyseur ;
- le rapport entre le nombre de moles d'hydrogène et le nombre de moles d'hydrocarbures, noté H₂/HC.

On regroupe généralement ces conditions opératoires et les conditions de charge dans un vecteur noté \mathbf{c} .

Les vitesses des réactions, comme dans l'exemple de l'HDS, dépendent d'abord des concentrations des espèces. Mais elles font intervenir également des paramètres cinétiques. En reprenant l'exemple de l'hydrodésulfuration, la variable k de la formule (1.1) appelée "constante cinétique" n'est constante qu'à température fixée. Cette dépendance est souvent explicitée à travers la loi d'Arrhénius :

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

où k_0 est la constante pré-exponentielle, R la constante des gaz parfait, T la température (en Kelvin) et E l'énergie d'activation. k_0 et E font partie des paramètres cinétiques qui sont inconnus. Sans rentrer dans plus de détails, le formalisme adopté à l'IFP fait également intervenir des constantes d'adsorption des espèces sur le catalyseur et d'autres paramètres liés aux équilibres de réaction et à la thermodynamique. Dans le schéma cinétique choisi, les paramètres du modèle d'isomérisation du n-pentane sont au nombre de 20 et sont regroupés dans un vecteur $\boldsymbol{\theta}$.

Nous disposons d'un modèle de cinétique chimique à partir duquel a été développé un code de calcul qui permet de décrire le procédé d'isomérisation du n-pentane. A partir de la donnée du vecteur \mathbf{c} (conditions opératoires et de charge) et du vecteur $\boldsymbol{\theta}$ (valeurs des paramètres cinétiques) on peut calculer les concentrations des espèces chimiques produites lors de l'isomérisation. Plus précisément, on écrit ce modèle sous la forme

$$\mathbf{y}_{\text{calc}} = \mathbf{f}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$$

où

- $\mathbf{y}_{\text{calc}} = (y_{\text{calc}}^1, \dots, y_{\text{calc}}^{15})$ est le vecteur de dimension 15 des sorties calculées par le code de calcul (concentrations des espèces chimiques) ;
- $\mathbf{c} = (\text{age}, T, P, \text{deb_charge}, \text{ppH}, \text{H}_2/\text{HC}, \text{charge})$ est le vecteur des conditions opératoires et de charge ;
- $\boldsymbol{\theta} = (P_1, \dots, P_{20})$ est le vecteur des 20 paramètres (leur nom est volontairement omis pour raison de confidentialité). Ce sont les paramètres qui interviennent dans les lois cinétiques (constante d'adsorption, énergies d'activation, etc) : ils sont représentatifs des réactions et dépendent du catalyseur ;
- \mathbf{f} est la fonction qui permet de déterminer la sortie \mathbf{y}_{calc} à partir des entrées \mathbf{c} et des paramètres $\boldsymbol{\theta}$. On notera $f^j(\cdot, \cdot)$ la j -ième composante calculée par la fonction \mathbf{f} correspondant à la sortie y_{calc}^j pour $j = 1, \dots, 15$.
D'un point de vue numérique, cette fonction est évaluée par l'intermédiaire d'un programme Fortran (une dizaine de milliers de lignes) dont l'objet principal est la résolution du système d'équations différentielles ordinaires représentant les cinétiques de réaction.

Il est important de noter que les paramètres cinétiques sont inconnus. Notons θ_0 le vecteur des ‘vrais’ paramètres. Classiquement, on cherche à l’estimer à partir de mesures expérimentales. Pour le cas du n-pentane, des expériences ont été menées sur une unité pilote, permettant ainsi de recueillir $n = 59$ données expérimentales $(\mathbf{c}_i, \mathbf{y}_{\text{mes } i})_{i=1, \dots, n} = (c_i, y_{\text{mes } i}^1, \dots, y_{\text{mes } i}^{15})_{i=1, \dots, n}$. Nous détaillerons dans le chapitre 2 la procédure utilisée pour cette estimation. Nous expliquerons également en quoi une analyse d’incertitudes et de sensibilité est intéressante pour étudier ce modèle.

1.2.2 Modèle d’isomérisation du butane

Le deuxième modèle étudié est celui de l’isomérisation du butane (noté C4), c’est-à-dire des molécules d’hydrocarbures comprenant quatre atomes de carbone. Les normal-paraffines ou n-butane seront notées nC4 et les iso-paraffines ou iso-butane seront notées iC4. Ces molécules sont représentées dans la figure 1.6.

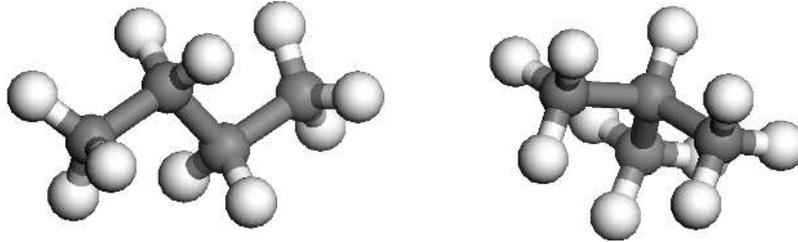
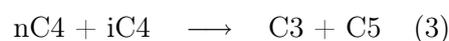
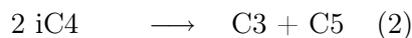
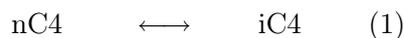


FIG. 1.6 – Molécules de n-butane et d’isobutane. Les atomes de carbone sont représentés en noir et les atomes d’hydrogène en blanc.

Le schéma réactionnel choisi pour l’isomérisation du butane est composé de trois réactions :



où C3 et C5 représentent respectivement les molécules à trois et à cinq atomes de carbone produits lors du procédé. La réaction principale est la réaction réversible (1) qui transforme le n-butane en iso-butane. Les réactions (3) et (4) sont des réactions secondaires.

Comme dans le cas du n-pentane, le modèle de cette isomérisation s'exprime de façon générale sous la forme

$$\mathbf{y}_{\text{calc}} = \mathbf{f}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\theta})$$

où

- $\mathbf{y}_{\text{calc}} = (y_{\text{calc}}^1, y_{\text{calc}}^2, y_{\text{calc}}^3)$, y_{calc}^1 fraction molaire de nC4, y_{calc}^2 fraction molaire de iC4, y_{calc}^3 fraction molaire de C3 et C5 (regroupés). \mathbf{y}_{calc} est donc un vecteur de dimension 3. Cependant, ses composantes ne sont pas indépendantes puisque la somme des fractions molaires vaut 1 ;
- $\mathbf{c} = (T, \text{ppH}, \text{H}_2/\text{HC}, \text{nC4}_0)$ est le vecteur des conditions opératoires des conditions initiales de charge (ici la fraction molaire de nC4 à l'entrée du réacteur entre 0 et 1) ;
- $\boldsymbol{\theta} = (P_1, \dots, P_8)$ est le vecteur des 8 paramètres cinétiques (leur nom est volontairement omis pour raison de confidentialité). Ce sont les paramètres qui interviennent dans les lois cinétiques (constante d'adsorption, énergies d'activation, etc) : ils sont représentatifs des réactions et dépendent du catalyseur ;
- \mathbf{f} est la fonction qui permet de déterminer la sortie \mathbf{y}_{calc} à partir des entrées \mathbf{c} et des paramètres $\boldsymbol{\theta}$. On notera $f^j(\cdot, \cdot)$ la j -ième composante calculée par la fonction \mathbf{f} correspondant à la sortie y_{calc}^j pour $j = 1, \dots, 3$.

Pour estimer le vecteur des vrais paramètres $\boldsymbol{\theta}_0$, des expériences ont été menées sur une unité pilote pour recueillir $n = 67$ données expérimentales $(\mathbf{c}_i, \mathbf{y}_{\text{mes } i})_{i=1, \dots, n}$.

La procédure d'estimation sera détaillée dans le chapitre 2. Nous y montrerons aussi l'intérêt d'une analyse d'incertitudes et de sensibilité pour ce modèle.

1.3 Remarques sur les trois modèles

On peut noter que les trois modèles que nous venons de décrire sont de complexité différente, dans le sens où le nombre de sorties et le nombre de paramètres inconnus n'est pas le même pour chacun d'eux. Nous pourrions ainsi tester si les méthodes que nous proposerons dans les chapitres suivants ont une limitation en terme de dimension ou encore en terme de temps de calcul, puisque plus de sorties et de paramètres impliquent ici un temps de calcul plus élevé pour évaluer la fonction \mathbf{f} du modèle.

Outils classiques en analyse d'incertitudes et de sensibilité

Nous consacrons ce chapitre à la présentation des méthodes qui sont les plus couramment utilisées en analyse d'incertitudes et de sensibilité.

Dans une première partie nous abordons le problème de l'**analyse d'incertitudes** et détaillons le cadre probabiliste qui est à l'heure actuelle le plus adapté pour apporter des réponses pertinentes aux questions que pose cette analyse.

L'**analyse de sensibilité** fait quant à elle l'objet de la deuxième partie de ce chapitre. Nous introduisons tout d'abord les principales quantités d'intérêt pour une telle analyse, les indices de sensibilité. Nous discutons ensuite des méthodes existantes pour les estimer. Enfin, nous mettons en évidence les limitations inhérentes aux méthodes présentées dans ce chapitre dans le but de justifier l'étude de méthodes originales telles que celles que nous exposerons dans le chapitre 4.

Par souci de clarté et de généralité, détaillons tout d'abord les deux formalismes rencontrés habituellement lors de l'analyse d'incertitudes : d'une part le formalisme général et théorique utilisé dans tous les domaines, et d'autre part celui utilisé spécifiquement en cinétique chimique. Dans la suite de ce document, nous privilégierons le formalisme général lorsque nous aborderons des points théoriques tandis que les exemples donnés sur le modèle simplifié d'HDS ou sur les modèles d'isomérisations emprunteront le second formalisme.

Remarquons tout d'abord que les entrées et la sortie seront notées ici avec des majuscules, car dans la suite du manuscrit nous utiliserons le formalisme probabiliste où les entrées et les sorties sont des variables aléatoires.

Les notations standard en analyse de sensibilité sont les suivantes :

$$Y = \eta(\mathbf{X}) \quad (2.1)$$

où

- Y représente la sortie du modèle, de dimension 1. S'il y a plusieurs sorties, elles sont étudiées séparément ;
- $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)$ est le vecteur d -dimensionnel des entrées. Seules sont explicitées les entrées considérées comme incertaines, les entrées déterministes sont implicitement incluses dans la fonction η ;
- $\eta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ est la fonction permettant de calculer la sortie Y en fonction des entrées \mathbf{X} . Elle peut être analytique, implicite ou sous la forme d'un code de calcul complexe.

Nous avons vu au chapitre précédent qu'un modèle de cinétique chimique peut quant à lui s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{f}(\mathbf{c}; \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}$$

où

- \mathbf{Y} représente le vecteur des q sorties du modèle ;
- \mathbf{c} est le vecteur des m variables dites contrôlées. Elles correspondent d'une part à des conditions opératoires (pression, température, etc), et d'autre part à des conditions initiales de charge, c'est-à-dire les fractions molaires des espèces que l'on introduit dans le réacteur. Chacune de ces variables a soit une valeur, soit une plage de variation connue par les experts du procédé ;
- $\boldsymbol{\theta}_0 \in \mathbb{R}^p$ est le vecteur des paramètres "intrinsèques" aux réactions chimiques (constantes d'adsorption, énergies d'activation, etc). Ce vecteur est inconnu, il sera appelé vecteur des "vrais" paramètres ;
- $\mathbf{f} : \mathbb{R}^{m+p} \rightarrow \mathbb{R}^q$ est une fonction qui permet de déterminer les sorties \mathbf{Y} à partir de la connaissance de \mathbf{c} et des paramètres. Cette fonction est dans la majorité des cas calculée à l'aide d'un code de calcul complexe. Celui-ci réunit au sein d'un même module des connaissances concernant les hydrocarbures et des techniques numériques car le schéma réactionnel s'exprime comme des équations différentielles dont l'expression analytique est inconnue et qu'il faut intégrer numériquement. \mathbf{f} se présente alors sous la forme d'un programme informatique ;
- $\boldsymbol{\epsilon}$ est le vecteur aléatoire de dimension q des erreurs expérimentales. Dans le chapitre 3, nous précisons sa loi pour proposer une procédure d'estimation par maximum de vraisemblance.

A l'aide d'une procédure d'estimation (que nous détaillerons au chapitre 3) qui repose sur des mesures expérimentales $(\mathbf{c}_i, \mathbf{Y}_i)_{i=1, \dots, n}$, on propose d'estimer le vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ par un estimateur noté $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Cet estimateur est ensuite utilisé pour faire de la prédiction, c'est-à-dire pour prédire la valeur des sorties pour d'autres conditions opératoires et de charge. Dans ce but, on utilise le modèle :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{f}(\mathbf{c}; \hat{\boldsymbol{\theta}}) \quad (2.2)$$

où :

- \mathbf{Y} représente le vecteur des q sorties du modèle ;

- \mathbf{c} est le vecteur des m variables dites contrôlées ;
- $\hat{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{R}^p$ est le vecteur des estimateurs des paramètres ;
- $\mathbf{f} : \mathbb{R}^{m+p} \rightarrow \mathbb{R}^q$ est la même fonction que précédemment.

On peut remarquer les liens évidents entre les deux modèles (2.1) et (2.2), mais nous insistons particulièrement sur les liens entre \mathbf{X} , \mathbf{c} et $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. En effet, les estimateurs des paramètres du vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ font par définition partie du vecteur \mathbf{X} des entrées incertaines. En revanche, il est possible de faire un choix en ce qui concerne le vecteur des variables contrôlées \mathbf{c} . Si l'on suppose que ces variables sont parfaitement déterministes, elles sont alors implicitement incluses dans \mathbf{f} . Mais l'on peut vouloir considérer un bruit de mesure supplémentaire sur ces variables (précision des relevés de température ou de pression, etc.). Il est donc nécessaire de les inclure aussi dans \mathbf{X} . Ce dernier cas ne rend pas plus difficile une analyse d'incertitudes ou de sensibilité. En effet, il peut être intéressant et pertinent d'étudier l'impact de l'incertitude des conditions opératoires (par exemple les variations de la température peuvent avoir un effet considérable) sur les sorties du modèle. Dans ce document, nous nous limiterons au cas où les variables contrôlées \mathbf{c} sont déterministes, et donc on a l'équivalence entre les deux modèles avec $\mathbf{X} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$ et \mathbf{c} inclus dans \mathbf{f} .

Dans toute la suite de ce manuscrit, nous appellerons **facteur** d'un modèle toute variable d'entrée incertaine, tout paramètre incertain ou tout estimateur introduit dans la fonction η . Nous nous intéresserons donc à l'influence des facteurs d'un modèle sur les sorties de ce modèle par propagation à travers la fonction η du modèle.

2.1 Analyse d'incertitudes

Dans cette section nous présentons tout d'abord l'objectif d'une analyse d'incertitudes. Nous posons ensuite les bases du cadre probabiliste qui est le plus adapté à une telle analyse. En effet, il rend compte d'incertitudes sur des variables. Nous donnons aussi quelques indications sur les méthodes les plus couramment utilisées en pratique pour mener à bien cette étude.

2.1.1 Principe général

Nous avons vu dans l'introduction de ce chapitre que l'analyse d'incertitudes consistait à étudier l'impact des facteurs incertains d'un modèle sur ses sorties. Avant de détailler les manières de juger de cet impact, nous proposons de préciser quelles sont les sources d'incertitudes généralement considérées.

Les incertitudes auxquelles est soumis tout modèle construit pour représenter un phénomène sont regroupées en deux grands types :

1. Les incertitudes dites *épistémiques*, elles sont inhérentes à la modélisation. Par exemple lors du passage du phénomène réel au modèle théorique censé le représenter, on peut manquer de connaissance sur le phénomène ou disposer de modèles (de chimie, de mécanique, etc) qui ne rendent que partiellement compte de la réalité. De plus, il est possible que l'on décide d'utiliser des théories moins précises mais beaucoup plus simples à mettre en oeuvre en pratique. Par ailleurs, on peut citer aussi le passage

d'un modèle mathématique au modèle informatique correspondant, qui par exemple utilise un schéma numérique pour résoudre une équation différentielle de manière approximative. Une manière de réduire ce type d'incertitudes est d'ajouter de l'information ou de sacrifier la simplicité des modèles pour affiner la précision ;

2. Les incertitudes dites *stochastiques* (ou aléatoires), elles sont dues à la variabilité naturelle inhérente à toute mesure expérimentale (erreurs de mesure et de reproductibilité). Par exemple, à tout essai et à toute mesure les concentrations des espèces chimiques n'ont de valeur garantie que dans la limite de la précision de l'instrument de mesure utilisé. La température de réaction n'est contrôlée de même que dans une certaine mesure. De plus, cette incertitude se propage lorsque l'on s'intéresse à des paramètres inconnus du phénomène et que l'on souhaite les estimer à partir de mesures expérimentales. C'est par exemple le cas pour les modèles de cinétique chimique où les paramètres cinétiques ne sont pas connus mais sont estimés à partir de mesures effectuées sur une installation pilote. Certaines de ces incertitudes peuvent être réduites (en augmentant le nombre de données expérimentales, en améliorant la précision des instruments de mesure, etc) alors que d'autres sont irréductibles.

C'est la combinaison de ces deux types d'incertitudes qui implique, par propagation à travers le modèle, que les sorties sont elles aussi incertaines.

Intéressons-nous maintenant plus précisément aux incertitudes sur les sorties. En effet nous n'avons pas encore abordé un point essentiel de l'analyse d'incertitudes : sous quelle forme attend-on le résultat concernant les sorties ? La réponse à cette question dépend principalement de l'utilisation que l'on veut en faire ultérieurement.

Si l'on se place dans un cadre déterministe, on voudra par exemple faire une étude des pires cas qui consiste à faire varier les facteurs incertains dans un intervalle donné, et d'en déduire un intervalle contenant les sorties. Cette méthode produit cependant des intervalles non-optimaux au sens probabiliste. Elle suppose implicitement que les facteurs peuvent varier uniformément sur leur intervalle de valeurs. C'est une hypothèse *a priori* très forte et rarement vérifiée.

Mentionnons aussi la théorie de l'évidence de Dempster-Schafer (Shafer 1976) qui est une généralisation de l'approche bayésienne en probabilité. L'application de cette théorie à l'analyse d'incertitudes est relativement récente et ne permet pas encore de fournir des résultats aussi complets qu'une approche probabiliste. Cependant elle fait partie des domaines de recherche actuels en analyse d'incertitudes.

Dans un cadre probabiliste, comme nous le décrirons dans la section suivante, on peut s'intéresser à la distribution de probabilité des sorties, à leurs premiers moments, à des intervalles de confiance associés à des risques ou encore à des probabilités de dépassement de seuil. Notons par ailleurs que les méthodes peuvent beaucoup varier selon la forme attendue du résultat. Il importe donc avant tout d'identifier l'objectif d'une analyse d'incertitudes pour obtenir des résultats sous une forme adéquate.

2.1.2 Cadre probabiliste pour l'analyse d'incertitudes

L'approche probabiliste se base sur un modèle de type (2.1)

$$Y = \eta(\mathbf{X})$$

où le vecteur \mathbf{X} contient tous les facteurs incertains. On associe alors au vecteur des facteurs \mathbf{X} une loi de probabilité. Dans le cas où les facteurs sont indépendants, ceci revient à donner une loi de probabilité à chaque composante de \mathbf{X} indépendamment. Par exemple si l'un des facteurs est la température sous laquelle une réaction chimique se produit, on pourra supposer qu'elle suit une loi normale centrée sur une valeur nominale et d'écart-type donné par la précision de l'appareil de mesure que l'on utilise pour la déterminer. Une fois cette étape d'identification de loi des facteurs terminée, il est clair que par propagation à travers la fonction η la sortie Y est elle aussi aléatoire et possède donc une loi de probabilité. A cette étape de l'analyse d'incertitudes, il faut identifier la forme sous laquelle on souhaite obtenir des résultats sur l'incertitude de Y :

- On s'intéresse à la loi de probabilité de Y . Dans ce cas, à partir de la loi du vecteur \mathbf{X} il faut en déduire celle de Y . En notant $F_{\mathbf{X}}$, la distribution de probabilité de \mathbf{X} il faut alors calculer

$$\begin{aligned} F_Y(t) = \mathbb{P}(Y \leq t) &= \mathbb{P}(\eta(\mathbf{X}) \leq t) \\ &= \int_{\eta(\mathbf{x}) \leq t} dF(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Cette intégrale n'est malheureusement calculable analytiquement que dans des cas très simples. En général elle est approchée par la distribution empirique de Y , obtenue par échantillonnage Monte-Carlo sur la loi de \mathbf{X} ;

- Si seuls les premiers moments de Y sont utiles pour une étude ultérieure, il n'est pas nécessaire de chercher la loi de probabilité de Y . En effet on désire estimer $\mathbb{E}(Y^k)$ pour certaines valeurs de k . Cet objectif est réalisé de manière classique en utilisant les estimateurs des moments

$$\overline{Y^k} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\eta(\mathbf{X}_i))^k$$

où $(\mathbf{X}_i)_{i=1, \dots, n}$ est un échantillon i.i.d. selon la loi de \mathbf{X} ;

- On est seulement intéressé par un intervalle de confiance sur Y ou une probabilité de dépassement d'un seuil. On cherche donc à calculer des quantités de la forme $\mathbb{P}(a < Y < b)$ ou $\mathbb{P}(Y > M)$ en vue de déterminer a et b ou M par exemple. Dans ce cas, on peut utiliser des méthodes classiques d'estimation de quantiles. Si la probabilité $\mathbb{P}(Y > M)$ est faible on peut penser à utiliser des techniques plus sophistiquées telles que FORM ou SORM basées sur des développements limités, voir Devictor (1996) ou Schuëller, Pradlwarter and Koutsourelakis (2003).

Dans l'étude de modèles de cinétique chimique que nous menons ici, il nous est demandé principalement d'identifier la loi de probabilité des sorties d'un modèle ou de calculer des intervalles de confiance à 95%. Considérons, par exemple, le modèle simplifié d'hydrodésulfuration présenté dans la section 1.1. Rappelons que la concentration de soufre à un instant t est donnée analytiquement par

$$S_{k,\alpha}(t) = (S(0)^{1-\alpha} - (1-\alpha)kt)^{\frac{1}{1-\alpha}}$$

où $S(0)$ est la concentration de soufre initiale et k et α sont les paramètres du modèle. Supposons par exemple que l'on souhaite déterminer l'incertitude sur la concentration de soufre à l'instant $t = \frac{1}{2}$ avec une concentration initiale $S(0) = 14000$ ppm.

Les deux facteurs sont incertains car ce sont des estimateurs (variables aléatoires) obtenus à partir de mesures expérimentales bruitées. On va supposer que les estimateurs des deux paramètres sont indépendants et qu'ils sont distribués de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\log(\hat{k}) &\sim \mathcal{N}(0; 1) \\ \hat{\alpha} &\sim \mathcal{N}(1.25; 0.0025),\end{aligned}$$

c'est-à-dire que \hat{k} suit une loi log-normale et $\hat{\alpha}$ suit une loi normale.

On génère alors un échantillon $(\hat{k}_i, \hat{\alpha}_i)_{i=1, \dots, n}$ indépendant et identiquement distribué (i.i.d.) de taille $n = 10000$ de ces deux lois, et pour chaque réalisation de l'échantillon on calcule

$$S_i = \left(14000^{1-\alpha} - \frac{1}{2}(1 - \hat{\alpha}_i)\hat{k}_i \right)^{\frac{1}{1-\hat{\alpha}_i}}$$

et l'on obtient ainsi un échantillon $(S_i)_{i=1, \dots, n}$ i.i.d. de taille $n = 10000$ de la concentration de soufre à l'instant $t = \frac{1}{2}$ pour une concentration initiale de $S(0) = 14000$. La distribution calculée à partir de cet échantillon est représentée dans la figure 2.1.

Nous terminons cette section par une remarque fondamentale sur les méthodes que nous venons de décrire : on a supposé implicitement que l'on connaît la distribution des facteurs que l'on considère comme incertains pour pouvoir propager ces incertitudes sur les sorties. S'il est raisonnable d'utiliser des lois *a priori* sur certaines entrées ou paramètres du modèle (erreurs de mesure gaussiennes, paramètres strictement positifs parfois log-normaux), en revanche les estimateurs des paramètres obtenus à partir de mesures expérimentales à travers une procédure de minimisation ont, en général, une loi inconnue. Dans la prochaine section, nous supposerons que toutes les lois suivies par les facteurs sont connues. Nous nuancerons ce point de vue en conclusion de ce chapitre et soulignerons le travail supplémentaire à effectuer pour obtenir les distributions d'estimateurs de paramètres non déductibles de considérations *a priori*.

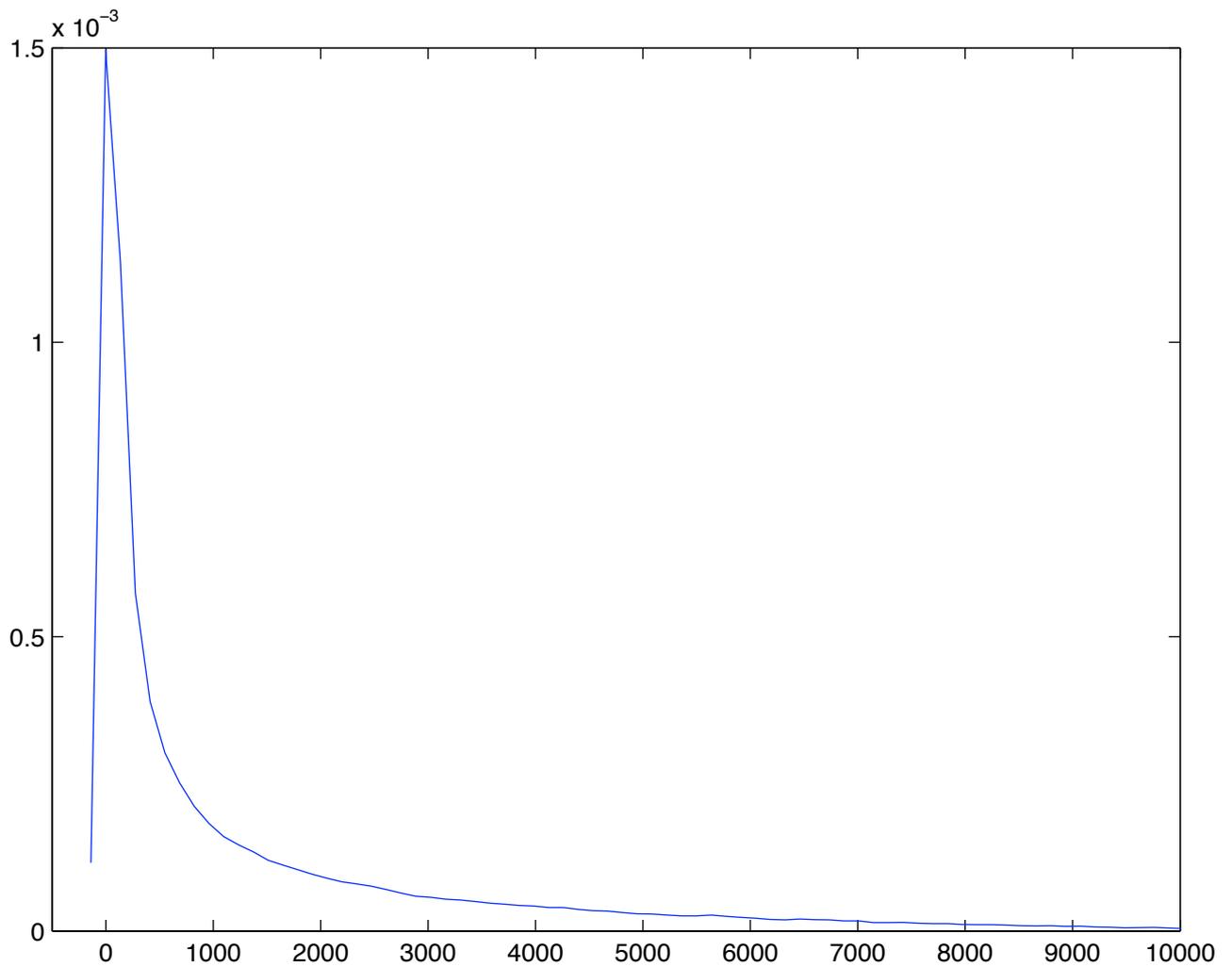


FIG. 2.1 – Distribution empirique de la concentration de soufre (en ppm) dans le modèle simplifié d'HDS au temps $t = 0.5$ pour une concentration initiale $S(0) = 14000$ ppm. Elle est obtenue par échantillonnage des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ supposés suivre une loi lognormale et une loi normale indépendantes.

2.2 Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité est une étude plus détaillée de l'incertitude. En effet si l'analyse d'incertitude nous permet d'étudier l'incertitude "totale" sur la sortie comme on l'a vu au paragraphe précédent, l'analyse de sensibilité va quant à elle quantifier l'impact de la variation de chaque facteur sur la variation de la sortie. Cela permet de mettre en évidence les facteurs dont la variation influence le plus les variations de la sortie. Une telle étude peut être utile pour savoir, par exemple, si la solution trouvée est robuste (c'est-à-dire si elle ne va pas être modifiée pour des petites variations des facteurs) ou encore de savoir sur quels facteurs il est important de concentrer les "efforts" d'estimation pour diminuer les variations de la sortie. Les objectifs principaux d'une analyse de sensibilité sont au nombre de quatre, voir Saltelli, Tarantola, Campolongo and Ratto (2004) :

1. La *hiérarchisation des facteurs* ('*Factors Proritisation*' en anglais) : l'objectif est d'identifier le facteur le plus influent, ou plus précisément de classer les facteurs du plus influent au moins influent ;
2. La *calibration des facteurs* ('*Factors Fixing*') : le but est d'identifier les facteurs que l'on peut fixer car ils n'influencent pas la variance de la sortie ;
3. La *réduction de la variance* ('*Variance Cutting*') : l'objectif est de réduire la variance de la sortie à un niveau prédéterminé en fixant le moins de facteurs possible ;
4. Le '*Factors Mapping*' : si le domaine des sorties est séparé en sous-domaines distincts, le but est d'exhiber les facteurs qui influencent le plus l'appartenance de la sortie à un des sous-domaines.

Notons que pour l'étude des modèles cinétiques, nous nous intéressons principalement à la hiérarchisation des facteurs. Il convient donc de trouver des "mesures", c'est-à-dire des quantités calculées à partir du modèle, dont l'interprétation permet d'apporter une réponse à ce problème. De telles mesures sont généralement appelées *mesures d'importance*.

Dans toute cette section nous utiliserons le formalisme général (2.1). Plusieurs mesures d'importance existent pour quantifier la part de chaque facteur sur l'incertitude de la sortie. Certaines sont des indicateurs locaux, autour d'un point de fonctionnement ou d'un optimum. Une étude locale peut s'avérer insuffisante voir erronée et il est souvent nécessaire d'envisager de construire des mesures d'importance globales. Nous détaillons quelques-unes de ces méthodes dans les paragraphes qui suivent, en les regroupant selon une classification proposée par Saltelli et al. (2000) : les méthodes de screening, les méthodes locales et les méthodes de variance.

2.2.1 Méthodes de screening

La principale caractéristique des méthodes de screening est qu'elles fournissent une information partielle mais calculable à faible coût de temps de calcul sur les facteurs les plus influents dans le modèle. Elles sont typiquement utilisées comme première étape d'une analyse de sensibilité lorsque le nombre de facteurs est très grand, et que l'on veut rapidement exhiber un groupe constitué des quelques facteurs vraiment influents. On applique dans un second temps des méthodes plus précises sur les facteurs de ce groupe. Par souci de concision, nous proposons de ne détailler que la classe de méthodes de screening connue sous le nom de *One-At-a-Time* (ou OAT) car elles sont très répandues. Le lecteur intéressé

par ce type de méthodes trouvera une introduction détaillée dans le chapitre 4 de l'ouvrage de Saltelli et al. (2000).

L'approche OAT en toute généralité repose sur l'idée de faire varier un seul facteur en ayant fixé au préalable les autres à une valeur nominale (par exemple leur moyenne). C'est un inconvénient puisque l'on conduit ainsi une étude locale autour de la valeur nominale alors que le facteur peut avoir un intervalle de variation important. La méthode de Morris (1991) que nous avons choisi de détailler ici ne souffre pas de cet inconvénient. Supposons que chaque composante X_i , $i = 1, \dots, d$ du vecteur des facteurs \mathbf{X} prenne p valeurs dans l'ensemble $\{0, 1/(p-1), 2/(p-1), \dots, 1\}$ et soit Δ un multiple de $1/(p-1)$ fixé au préalable. Notons $\Omega = \{0, 1/(p-1), 2/(p-1), \dots, 1\}^d$ l'ensemble des valeurs que peut prendre \mathbf{X} . Morris définit l'effet élémentaire du i -ième facteur en un point \mathbf{x} par

$$d_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta} [\eta(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + \Delta, x_{i+1}, \dots, x_d) - \eta(\mathbf{x})]$$

où $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$ est choisi de telle sorte que le point perturbé soit aussi dans l'ensemble Ω . Le nombre de d_i pour i fixé est donc $p^{d-1}(p - \Delta(p-1))$ puisqu'il y a p valeurs possibles pour les $j \neq i$ variables fixées et $p - \Delta(p-1)$ pour la i -ième. Morris remarque que pour i fixé, la moyenne et la variance de d_i (obtenues en échantillonnant \mathbf{x} sur Ω) contiennent des indications à propos de l'importance du i -ème facteur sur la sortie. Une moyenne élevée est synonyme de facteur globalement influent sur la sortie alors qu'une variance élevée indique soit un facteur en interaction avec d'autres, soit un facteur dont l'effet est non-linéaire. Si l'on note r la taille de l'échantillon de \mathbf{x} tirés sur Ω pour calculer la moyenne et la variance des d_i , le nombre d'évaluations de la fonction η est avec cette méthode de $2rd$. Remarquons que Morris a proposé une autre approche permettant de réduire ce nombre à $2rk^2/(k+1)$. Après avoir calculé la moyenne μ_i et la variance σ_i^2 de chaque d_i pour $i = 1, \dots, d$, on trace sur un graphique les points de coordonnées (μ_i, σ_i^2) . Ce graphique permet de distinguer selon leur position les facteurs qui sont influents de ceux qui ne le sont pas ou encore les facteurs avec interactions, etc. Typiquement, les facteurs proches de l'origine ne sont pas influents : on ne retiendra alors que les autres pour effectuer une étude plus précise de leur influence.

2.2.2 Méthodes locales

Les méthodes locales, comme leur nom l'indique, proposent une information sur l'impact d'un facteur qui varie autour d'une valeur nominale (*point de fonctionnement*) fixée. Ces méthodes sont très souvent utilisées en cinétique chimique (Turanyi 1990), où il est classique d'étudier l'influence des variations de paramètres cinétiques autour d'une valeur donnée. Si l'on considère le modèle (2.1) : $Y = \eta(\mathbf{X})$ et que l'on souhaite étudier l'impact des facteurs autour d'un point de fonctionnement \mathbf{x}_0 , les méthodes locales proposent d'estimer les dérivées partielles

$$\frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0}$$

pour $i = 1, \dots, d$. Les facteurs sont alors classés selon la valeur de ses dérivées partielles, les plus influents ayant la dérivée la plus élevée. Ce classement selon les dérivées partielles

souffre cependant d'un défaut majeur : il ne tient pas compte des ordres de grandeur des composantes de \mathbf{X} . Il est alors plus raisonnable de faire le même classement à l'aide des dérivées partielles normalisées

$$\frac{\mathbf{x}_{i0}}{Y_0} \frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0}$$

où \mathbf{x}_{i0} est la i -ième composante de \mathbf{x}_0 et $Y_0 = \eta(\mathbf{x}_0)$. Enfin, remarquons que nous n'avons pour l'instant pas utilisé le formalisme probabiliste pour étudier les sensibilités. Il est possible d'inclure simplement des considérations probabilistes dans les méthodes locales. En effet il suffit de reprendre le principe de classement des facteurs selon les dérivées partielles, mais en prenant en compte les variations possibles des facteurs (leur écart-type) autour de leur valeur nominale (leur moyenne). Dans ce cas, on doit calculer

$$\frac{\sigma(X_i)}{\sigma(Y)} \frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0} \quad (2.3)$$

où l'on note $\sigma(X_i)$ l'écart-type du facteur X_i et $\sigma(Y)$ l'écart-type de la sortie Y . Nous verrons dans la section 2.2.3 que ces quantités apparaissent comme un cas particulier des méthodes de variance.

Toutes les approches locales que nous venons de présenter partagent la même limitation : elles ne fournissent qu'une information valable autour d'un point de fonctionnement donné et cette information est seulement de premier ordre (seules les dérivées premières interviennent dans le calcul). Si les variations des facteurs sont peu importantes et que le modèle est proche de la linéarité, ce classement peut suffire pour distinguer les facteurs influents de ceux qui ne le sont pas. En revanche, dans le cas général il est plus raisonnable de s'intéresser aux méthodes de variance que nous présentons dans la section suivante. Notons enfin que les dérivées partielles doivent être estimées pour faire un tel classement. Si elles ne sont pas calculables explicitement, il faut se tourner vers des méthodes d'approximation numérique, comme les différences finies, les méthodes adjointes ou la dérivation automatique de codes.

2.2.3 Méthodes basées sur la variance

La mesure d'importance globale la plus répandue est une mesure basée sur les variances : en pratique, l'impact de la variation de chaque facteur sur la variation de la sortie est calculé par un indice dit de sensibilité. Ces méthodes reposent sur le modèle (2.1) et se placent dans le cadre probabiliste défini précédemment, l'incertitude sur le vecteur des facteurs \mathbf{X} étant alors modélisée par une loi de probabilité. Par exemple, pour une sortie Y et un facteur X_i , on définit l'indice de sensibilité de premier ordre S_i par :

$$S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))}{\text{Var}(Y)}, \quad i = 1, \dots, d.$$

On peut intuitivement interpréter cette quantité et par là même justifier son utilisation pour juger de l'impact des facteurs. $\mathbb{E}(Y|X_i)$ est la fonction de X_i uniquement qui approche le mieux la variable Y (au sens de l'écart quadratique si on suppose les variables de carré intégrable). Par conséquent $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))$ est la variance de la sortie si elle était fonction

uniquement de X_i . Plus cette quantité est proche de $\text{Var}(Y)$ (c'est-à-dire plus S_i est proche de 1), plus le facteur X_i explique la variance de Y . Autrement dit, dans un tel cas le facteur X_i est influent.

Par ailleurs, un facteur donné peut influencer aussi la sortie à travers ses interactions dans le modèle avec les autres facteurs. De manière équivalente, on peut définir alors l'indice de sensibilité de second ordre :

$$S_{i,j} = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i, X_j)) - \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i)) - \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_j))}{\text{Var}(Y)}, \quad i, j = 1, \dots, d, \quad i \neq j$$

Plus généralement, pour des facteurs dont les indices forment un sous-ensemble $A \subset \{1, \dots, d\}$, on définit

$$S_A = \frac{\sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i : i \in B))}{\text{Var}(Y)}. \quad (2.4)$$

L'indice de sensibilité total est alors défini par :

$$S_{T_i} = S_i + \sum_{j \neq i} S_{i,j} + \sum_{j < k, j \neq i, k \neq i} S_{i,j,k} + \dots, \quad i = 1, \dots, d.$$

Au-delà de leur interprétation intuitive, ces indices apparaissent naturellement lors d'une décomposition ANOVA de la variance de Y . Van Der Vaart (1998) souligne qu'il semblerait que cette décomposition ait pris le nom de "Hoeffding" en hommage à l'article de Hoeffding (1948), qui la présente. Le lemme de décomposition est le suivant :

Lemme 2.1 (Décomposition de Hoeffding). *Soient X_1, \dots, X_n des variables aléatoires indépendantes et soit un sous-ensemble d'indices $A \subset \{1, \dots, n\}$. On note H_A l'ensemble des variables aléatoires de carré intégrable du type*

$$g_A(X_i : i \in A),$$

pour des fonctions mesurables g_A ayant $|A|$ arguments telles que

$$\forall B : |B| < |A|, \quad \mathbb{E}(g_A(X_i : i \in A) | X_j : j \in B) = 0.$$

Alors la projection d'une variable aléatoire T de carré intégrable quelconque sur H_A est donnée par

$$P_A T = \sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \mathbb{E}(T | X_i : i \in B).$$

De plus, si $T \perp H_B$ (au sens L^2) pour tout sous-ensemble $B \subset A$, alors $\mathbb{E}(T | X_i : i \in A) = 0$. Par conséquent, la somme de tous les espaces H_B avec $B \subset A$ contient toutes les fonctions de $(X_i : i \in A)$ de carré intégrable.

On pourra trouver une démonstration de ce lemme dans Van Der Vaart (1998). Par exemple, si l'on prend $A = \{i\}$, on a

$$P_{\{i\}} T = \mathbb{E}(T | X_i) - \mathbb{E}(T).$$

De même, si $A = \{i, j\}$, on a

$$P_{\{i,j\}}T = \mathbb{E}(T|X_i, X_j) - \mathbb{E}(T|X_i) - \mathbb{E}(T|X_j) + \mathbb{E}(T).$$

Remarquons aussi que les espaces H_A sont construits de manière à être orthogonaux. Dans notre cas, la décomposition de Hoeffding peut se simplifier. En effet si $T = T(X_1, \dots, X_n)$ avec X_1, \dots, X_n i.i.d., on a

$$T = \sum_{r=0}^n \sum_{|A|=r} g_A(X_i : i \in A)$$

où

$$g_A(X_i : i \in A) = \sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \mathbb{E}(T|X_i : i \in B).$$

Comme les H_A sont orthogonaux, on peut alors calculer la variance de T :

$$\text{Var}(T) = \sum_{r=0}^n \sum_{|A|=r} \text{Var}(g_A(X_i : i \in A))$$

où

$$\text{Var}(g_A(X_i : i \in A)) = \text{Var} \left(\sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \mathbb{E}(T|X_i : i \in B) \right)$$

et on peut montrer après quelques manipulations élémentaires sur les espérances conditionnelles que

$$\text{Var}(g_A(X_i : i \in A)) = \sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \text{Var}(\mathbb{E}(T|X_i : i \in B)).$$

En normalisant par $\text{Var}(T)$, on a alors la décomposition suivante :

$$1 = \sum_{r=0}^n \sum_{|A|=r} \frac{\sum_{B \subset A} (-1)^{|A|-|B|} \text{Var}(\mathbb{E}(T|X_i : i \in B))}{\text{Var}(T)}$$

qui peut encore s'écrire

$$1 = \sum_{r=0}^n \sum_{|A|=r} S_A \tag{2.5}$$

en utilisant la formule (2.4). Autrement dit, les indices de sensibilité apparaissent naturellement dans cette décomposition, et leur somme vaut 1. C'est une propriété fondamentale des indices de sensibilité lorsque les facteurs sont indépendants. Elle permet une interprétation directe et aisée des parts de variance dues à chacun des facteurs et à ses interactions avec les autres. Notons qu'une telle décomposition n'est pas possible dans le cas général sans l'hypothèse d'indépendance des X_i . On pourra consulter Peccati (2004) pour une condition nécessaire et suffisante pour qu'une décomposition de Hoeffding soit possible.

Nous insistons aussi sur le fait que les indices ainsi définis sont bien globaux, dans le sens

où ils prennent en compte l'ensemble des variations des facteurs. De plus, ils ne supposent aucune forme particulière sur le modèle étudié, qui peut donc être fortement non-linéaire et non-monotone. Remarquons enfin que les indices de sensibilité de premier ordre rejoignent les indices locaux définis en (2.3) si l'on développe la fonction η en utilisant la formule de Taylor. En effet, soit $\mathbf{x}_0 = \mathbb{E}(\mathbf{X})$ la moyenne du vecteur \mathbf{X} , développons la fonction η autour de ce point au premier ordre en négligeant les terme d'ordre supérieur. On obtient ainsi la fonction

$$\tilde{\eta}(\mathbf{X}) = \eta(\mathbf{x}_0) + \sum_{i=1}^d \frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0} (X_i - x_{i0}).$$

Les indices de sensibilité de premier ordre calculés avec $\tilde{\eta}$ au lieu de η sont alors

$$\begin{aligned} \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(\tilde{\eta}(\mathbf{X})|X_i))}{\text{Var}(Y)} &= \frac{\text{Var}(X_i)}{\text{Var}(Y)} \left(\frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0} \right)^2 \\ &= \left(\frac{\sigma(X_i)}{\sigma(Y)} \frac{\partial \eta}{\partial X_i} \Big|_{\mathbf{X}=\mathbf{x}_0} \right)^2 \end{aligned}$$

et l'on reconnaît le carré de la quantité locale (2.3) introduite précédemment. Autrement dit, les indices de sensibilité de premier ordre généralisent cette quantité locale lorsque la fonction η est proche de la linéarité ou lorsque les variations des facteurs autour de leur moyenne sont très faibles (ce qui permet une très bonne approximation par un développement de Taylor tronqué au premier ordre).

Le but des méthodes dites "de variance" ont toutes pour objectif principal d'estimer les indices de sensibilité dont nous venons de rappeler la définition. Certaines d'entre elles font appel à des techniques simples, alors que d'autres utilisent des concepts plus sophistiqués. Nous verrons en conclusion de cette section que le principal critère de comparaison entre ces différentes techniques est le nombre d'évaluations de la fonction η qu'elles nécessitent pour obtenir une estimation raisonnable. En effet le coût de calcul d'une telle évaluation peut être important et il convient d'utiliser de manière optimale les évaluations de η . Nous décrivons ici quatre méthodes particulièrement intéressantes pour estimer les indices de sensibilité : la méthode de Sobol', la méthode FAST, la méthode de McKay et la méthode de Oakley et O'Hagan.

Méthode de Sobol'

Cette méthode est due à Sobol' (1990 en russe, Sobol' (1993) pour la traduction en anglais). Pour décrire son approche, définissons tout d'abord l'espace Ω^d des paramètres d'entrée supposé être le cube unité de dimension d , *i.e.* la région :

$$\Omega^d = \{\mathbf{x} | 0 \leq x_i \leq 1; i = 1, \dots, d\}$$

L'idée principale de Sobol' est de décomposer la fonction $\eta(\mathbf{x})$ en somme de fonctions dont la dimension augmente :

$$\eta(x_1, \dots, x_d) = \eta_0 + \sum_{i=1}^k \eta_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq d} \eta_{i,j}(x_i, x_j) + \dots + \eta_{1,2,\dots,d}(x_1, \dots, x_d)$$

Sobol' impose que η_0 soit une constante et que l'intégrale de chacune des fonctions ci-dessus par rapport à n'importe laquelle de ses variables soit nulle, *i.e.*

$$\int_0^1 \eta_{i_1, \dots, i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_t} = 0 \quad \text{si } 1 \leq t \leq s$$

Une conséquence de la décomposition et de la condition précédente (voir Sobol' (1993)) est que toutes les fonctions de la décomposition sont orthogonales, *i.e.* si $(i_1, \dots, i_s) \neq (j_1, \dots, j_l)$, alors

$$\int_{\Omega^d} \eta_{i_1, \dots, i_s} \eta_{j_1, \dots, j_l} d\mathbf{x} = 0$$

Et d'autre part, on a aussi

$$\eta_0 = \int_{\Omega^d} \eta(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Sobol' a démontré l'unicité de cette décomposition. Chacun des termes qui la composent peut être calculé via des intégrales multiples :

$$\begin{aligned} \eta_i(x_i) &= -\eta_0 + \int_0^1 \dots \int_0^1 \eta(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i} \\ \eta_{i,j}(x_i, x_j) &= -\eta_0 - \eta_i(x_i) - \eta_j(x_j) + \int_0^1 \dots \int_0^1 \eta(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim (ij)} \end{aligned}$$

où par convention $d\mathbf{x}_{\sim i}$ et $d\mathbf{x}_{\sim (ij)}$ représente respectivement l'intégration par rapport à toutes les variables sauf x_i , et x_i et x_j . Des formules analogues peuvent être obtenues pour les termes d'ordre supérieur.

Les indices de sensibilité apparaissent alors naturellement de cette décomposition. En effet la variance totale D de $\eta(\mathbf{x})$ est définie par

$$D = \int_{\Omega^d} \eta^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \eta_0^2,$$

tandis que les variances partielles sont calculées à partir de chaque terme de la décomposition

$$D_{i_1, \dots, i_s} = \int_0^1 \dots \int_0^1 \eta_{i_1, \dots, i_s}^2(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_1} \dots dx_{i_s}$$

où $1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq d$ et $s = 1, \dots, d$.

En élevant au carré et en intégrant par rapport à Ω^d la décomposition, on obtient

$$D = \sum_{i=1}^d D_i + \sum_{1 \leq i < j \leq d} D_{i,j} + \dots + D_{1,2, \dots, d}$$

Ainsi, une mesure de sensibilité de la sortie par rapport aux paramètres $(x_{i_1}, \dots, x_{i_s})$ est donnée par

$$S_{i_1, \dots, i_s}^{\text{SOBOL}} = \frac{D_{i_1, \dots, i_s}}{D}$$

Notons que la décomposition de Sobol' est **strictement équivalente** à la décomposition de Hoeffding que nous avons présentée précédemment dans le cas où les X_i , $i = 1, \dots, d$

sont indépendants et distribués selon une loi uniforme sur $[0, 1]$. L'indépendance permet de généraliser ce résultat à des X_i , $i = 1, \dots, d$ indépendants et de loi quelconque par une simple transformation (en passant par la fonction de répartition par exemple). Les indices $S_{i_1, \dots, i_s}^{\text{SOBOL}}$ sont donc strictement égaux aux indices S_{i_1, \dots, i_s} définis précédemment, c'est la raison pour laquelle on peut rencontrer dans la littérature le terme "indices de Sobol" à la place d'indices de sensibilité.

L'apport important de Sobol' est qu'il propose une méthode pour estimer les indices de sensibilité à travers l'évaluation numérique des différentes intégrales intervenant dans la décomposition. Il suggère l'utilisation d'une méthode de Monte-Carlo. Cependant, à cause du fléau de la dimension quand le vecteur des facteurs \mathbf{X} est de dimension d élevée, il est recommandé d'utiliser des méthodes plus sophistiquées qu'une méthode de Monte-Carlo classique. On pourra consulter Owen (2005) pour un exposé sur les méthodes de Quasi-Monte Carlo par exemple. Ces méthodes ne règlent pas entièrement le problème de la dimension dans le sens où une estimation précise des indices de sensibilité quand d est grand requiert, en général, un grand nombre d'évaluations de la fonction η .

Méthode FAST

La méthode FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test) a été développée particulièrement pour l'analyse d'incertitude et de sensibilité (Cukier, Fortuin, Shuler, Petschek and Schaibly 1973). Elle permet d'estimer d'une part l'espérance et la variance de la sortie, et d'autre part de calculer la contribution de chaque facteur à cette variance lorsqu'ils sont indépendants. L'idée centrale de la méthode FAST est d'approcher une intégrale d -dimensionnelle par rapport à \mathbf{x} à l'aide d'une intégrale simple par rapport à s par la transformation

$$x_i = G_i(\sin \omega_i s) \quad i = 1, \dots, d,$$

où $s \in [-\pi, \pi]$ est une variable scalaire, $\{\omega_i\}$ est un ensemble de fréquences entières et G_i des fonctions dites de transformation.

En choisissant correctement $\{\omega_i\}$ et G_i (Cukier et al. 1973), l'espérance $\mathbb{E}(Y)$ de la sortie Y peut être approchée par

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \eta(s) ds,$$

où $\eta(G_1(\sin \omega_1 s), \dots, G_d(\sin \omega_d s)) = \eta(s)$. En notant A_j et B_j les coefficients de Fourier définis par

$$A_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \eta(s) \cos(js) ds$$

et

$$B_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \eta(s) \sin(js) ds,$$

la variance de Y est approchée par

$$\begin{aligned}\text{Var}(Y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \eta^2(s) ds - \mathbb{E}(Y)^2 \\ &\simeq \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (A_j^2 + B_j^2) - (A_0^2 + B_0^2) \\ &\simeq 2 \sum_{j=1}^n (A_j^2 + B_j^2) = \hat{D}^{\text{FAST}}\end{aligned}$$

Un choix pertinent pour G_i est par exemple $x_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin(\sin \omega_i s)$ pour des paramètres uniformes sur $[0, 1]$ (Saltelli et al. 2000).

Ces derniers résultats sont utilisés pour l'analyse d'incertitude.

En ce qui concerne l'analyse de sensibilité, on montre que la contribution du facteur X_i à la variance totale de Y peut être approchée par

$$\hat{D}_{\omega_i} = 2 \sum_{p=1}^M (A_{p\omega_i}^2 + B_{p\omega_i}^2)$$

où M est l'harmonique maximum que l'on considère, habituellement 4 ou 6 .

Ainsi, une mesure de sensibilité de la sortie par rapport au facteur X_i est donnée par

$$S_i^{\text{FAST}} = \frac{\hat{D}_{\omega_i}}{\hat{D}^{\text{FAST}}}$$

On peut montrer (Saltelli et al. 2000) que cette mesure de sensibilité est équivalente à l'indice de sensibilité défini précédemment, soit :

$$S_i \approx S_i^{\text{FAST}} = \frac{\hat{D}_{\omega_i}}{\hat{D}^{\text{FAST}}}$$

Cette approche est surtout intéressante vis-à-vis du nombre d'évaluations de la fonction η qu'il est nécessaire d'effectuer pour estimer les indices de sensibilité. On trouvera dans Saltelli et al. (2000) un tableau comparatif (p197) entre la méthode de Sobol' et la méthode FAST qui montre qu'en général il faut à peu près deux fois moins d'évaluations de η avec FAST qu'avec la méthode de Sobol'.

Méthode de McKay

La méthode de McKay (1995) est basée sur l'idée que les numérateurs des indices de sensibilité de premier ordre $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))$, $i = 1, \dots, d$ peuvent être estimés à partir d'échantillons conditionnels. Plus précisément, soit $(X_j^i)_{j=1, \dots, n}$ un échantillon de taille n tiré selon la loi du i -ième facteur X_i . On construit alors des échantillons $(Y_{jk})_{k=1, \dots, r}$ de taille r tiré selon la loi conditionnelle de $Y|X_i = x_j^i$ pour $j = 1, \dots, n$. En notant

$$\bar{Y}_j = \frac{1}{r} \sum_{k=1, \dots, r} Y_{jk} \text{ et } \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \bar{Y}_j$$

les estimateurs respectifs de $\mathbb{E}(Y|X_i = x_j^i)$ et $\mathbb{E}(Y)$, McKay définit les quantités

$$SST = \frac{1}{Nr} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^r (Y_{jk} - \bar{Y})^2 \text{ et } SSB = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\bar{Y}_j - \bar{Y})^2$$

qui estiment respectivement $\text{Var}(Y)$ et $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))$. L'estimateur des indices de sensibilité de premier ordre S_i est donc SSB/SST . Remarquons que pour une telle procédure, le nombre d'évaluations de η est de $d \times n \times r$ ($n \times r$ évaluations pour chacun des d facteurs). McKay propose d'utiliser une technique d'échantillonnage par hypercube-latin répliqué (*Replicated Latin Hypercube Sampling* ou r-LHS), voir McKay (1995). Cette approche permet de réduire le nombre d'évaluations à $n \times r$ car le même échantillon est utilisé pour estimer l'indice de sensibilité de premier ordre de tous les facteurs simultanément. On pourra consulter aussi le chapitre 5 de Saltelli et al. (2004) ou l'article de Ratto, Tarantola and Saltelli (2001) qui étend la méthode de McKay à des facteurs qui ne sont pas indépendants.

Méthode de Oakley et O'Hagan

L'approche proposée par Oakley and O'Hagan (2004) rentre dans le cadre de la modélisation de surfaces de réponse par processus gaussiens et est liée à la technique du krigage (*kriging* en anglais) développée initialement dans le cadre de la géostatistique. L'idée principale est d'approcher la fonction η par une fonction dont l'évaluation numérique est beaucoup plus rapide. On trouvera une très bonne introduction à cette modélisation dans Santner, Williams and Notz (2003) dont nous reprenons les notations. Nous explicitons quelque peu cette approche car nous y ferons référence au chapitre 4. Le détail des calculs permet principalement de montrer que leur approche repose sur l'évaluation d'intégrales multiples, difficilement calculables en dehors de cas simples ou de faible dimension.

Pour fixer les notations et introduire les notions que nous utiliserons par la suite, rappelons tout d'abord quelques généralités sur la prédiction statistique. En toute généralité, plaçons nous dans le cadre où l'on veut prédire une variable aléatoire Y_0 à partir d'observations $\mathbf{Y}^n = {}^t(Y_1, \dots, Y_n)$. Soit $\hat{Y}_0 = \hat{Y}_0(\mathbf{Y}^n)$ un prédicteur de Y_0 basé sur les observations \mathbf{Y}^n . Deux classes de prédicteurs sont particulièrement étudiées :

- Les prédicteurs linéaires : $\hat{Y}_0 = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Y_i$;
- Les prédicteurs linéaires sans biais : $\hat{Y}_0 = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Y_i$ tels que $\mathbb{E}_F(\hat{Y}_0) = \mathbb{E}_F(Y_0)$ où F désigne la loi jointe de (Y_0, \mathbf{Y}^n) .

Le critère de prédiction le plus utilisé est l'erreur quadratique moyenne (*Mean Squared Prediction Error*, ou MSPE), c'est-à-dire que l'on recherche le prédicteur qui minimise la quantité

$$\text{MSPE}(\hat{Y}_0, F) = \mathbb{E}_F((\hat{Y}_0 - Y_0)^2).$$

On peut montrer que si (Y_0, \mathbf{Y}^n) suit une loi F pour laquelle l'espérance conditionnelle $E(Y_0|\mathbf{Y}^n)$ existe, alors le prédicteur $\hat{Y}_0 = \mathbb{E}(Y_0|\mathbf{Y}^n)$ est le meilleur prédicteur MSPE de Y_0 . Santner et al. (2003) s'intéressent plus particulièrement au meilleur prédicteur linéaire sans biais (*Best Linear Unbiased Predictor*, ou BLUP), c'est-à-dire le prédicteur linéaire

sans biais qui atteint le plus petit MSPE parmi tous les prédicteurs linéaires sans biais.

Venons-en maintenant à la modélisation par processus gaussiens. Supposons que l'on a effectué n évaluations numériques de la fonction η , par exemple en n points $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. À partir de ces évaluations, on cherche à approcher la fonction η . L'approche par processus gaussiens suppose que la fonction déterministe $\eta(\mathbf{x})$ pour $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ est une réalisation du processus aléatoire

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^p f_j(\mathbf{x})\beta_j + Z(\mathbf{x}) = {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} + Z(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

où $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_p(\mathbf{x}))$ sont des fonctions de régression connues, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)$ est un vecteur de coefficients de régression inconnus et Z est un processus gaussien stationnaire sur \mathcal{X} de moyenne nulle, de variance σ^2 et de fonction de corrélation R . On cherche ici à prédire la fonction η en un point \mathbf{x}_0 à partir d'observations $(Y(\mathbf{x}_1), \dots, Y(\mathbf{x}_n)) = (\eta(\mathbf{x}_1), \dots, \eta(\mathbf{x}_n))$.

Ceci est équivalent à prédire $Y_0 = Y(\mathbf{x}_0)$ à partir de $\mathbf{Y}^n = (Y(\mathbf{x}_1), \dots, Y(\mathbf{x}_n))$ en utilisant les notations précédentes. On peut montrer facilement que le modèle (2.6) implique que la loi jointe F de (Y_0, \mathbf{Y}^n) est :

$$\begin{pmatrix} Y_0 \\ \mathbf{Y}^n \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}_{1+n} \left(\begin{pmatrix} {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \\ \mathbf{f} \end{pmatrix} \boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & {}^t \mathbf{r}(\mathbf{x}_0) \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}_0) & \mathbf{R} \end{pmatrix} \right)$$

où

- \mathbf{f} est la matrice $n \times p$ composée des éléments $F_{ij} = f_j(\mathbf{x}_i)$ qui sont les fonctions de régression pour les points observés ;
- $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = (R(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1), \dots, R(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n))$ est le vecteur $n \times 1$ des corrélations de \mathbf{Y}^n avec $Y(\mathbf{x})$;
- \mathbf{R} est la matrice $n \times n$ composées des éléments $R_{ij} = R(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ qui sont les corrélations de \mathbf{Y}^n .

Rappelons que $\boldsymbol{\beta}$ et σ^2 sont inconnus. Le BLUP de Y_0 (qui atteint aussi le minimum du MSPE) est alors

$$\widehat{Y}_0 = {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\widehat{\boldsymbol{\beta}} + {}^t \mathbf{r}(\mathbf{x}_0)\mathbf{R}^{-1} (\mathbf{Y}^n - \mathbf{f}\widehat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (2.7)$$

où $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = ({}^t \mathbf{f}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{f})^{-1} {}^t \mathbf{f}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y}^n$.

La formulation explicite de ce prédicteur n'est valide que lorsque l'on suppose que la fonction de corrélation R est connue. En pratique cependant, R est choisie *a priori* dans une classe de fonctions de corrélations standard, elle n'est donc connue qu'à un vecteur de paramètres $\boldsymbol{\psi}$ près. Par exemple, les fonctions de corrélation les plus souvent employées sont :

- Les fonctions de corrélation exponentielles,

$$R(\mathbf{h}) = \exp \left(- \sum_{i=1}^d \left| \frac{h_i}{\theta_i} \right|^{p_i} \right)$$

où $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_d)$, $0 < p_i \leq 2$ et $\theta_i > 0$ pour $i = 1, \dots, d$. Le cas particulier où $p_i = 2$, $i = 1, \dots, d$ conduit à la fonction de corrélation gaussienne. On a ici $\boldsymbol{\psi} = (p_1, \dots, p_d, \theta_1, \dots, \theta_d)$;

– Les fonctions de corrélation de Matérn,

$$R(\mathbf{h}) = \prod_{i=1}^d \frac{1}{\gamma(\nu)2^{\nu-1}} \left(\frac{2\sqrt{\nu}|h_i|}{\theta_i} \right)^\nu K_\nu \left(\frac{2\sqrt{\nu}|h_i|}{\theta_i} \right)$$

où $\theta_i > 0$ pour $i = 1, \dots, d$, $\nu > 0$ et $K_\nu(\dots)$ est la fonction de Bessel modifié d'ordre ν . Dans ce cas, $\boldsymbol{\psi} = (\theta_1, \dots, \theta_d, \nu)$.

Le vecteur $\boldsymbol{\psi}$ étant inconnu, la formule (2.7) n'est donc pas directement applicable. Lorsque l'on possède une estimation de $\boldsymbol{\psi}$, et par conséquent une estimation \widehat{R} de R , on considère alors le meilleur estimateur linéaire sans biais empirique (*Empirical BLUP*, ou EBLUP) défini par

$$\widehat{Y}_0 = {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \widehat{\boldsymbol{\beta}} + {}^t \widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}_0) \widehat{\mathbf{R}}^{-1} (\mathbf{Y}^n - \mathbf{f} \widehat{\boldsymbol{\beta}})$$

où $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = ({}^t \mathbf{f} \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{f})^{-1} {}^t \mathbf{f} \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{Y}^n$, $\widehat{\mathbf{R}}$ et ${}^t \widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}_0)$ étant obtenus à partir de l'estimation \widehat{R} de la fonction de corrélation R .

Dans le cadre de cette modélisation, il est possible aussi de construire un modèle bayésien hiérarchique, dans le sens où l'on se donne des lois *a priori* sur les paramètres inconnus $\boldsymbol{\beta}$, σ^2 et $\boldsymbol{\psi}$. On a alors le modèle

$$\left(\begin{array}{c} Y_0 \\ \mathbf{Y}^n \end{array} \right) | \boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\psi} \sim \mathcal{N}_{1+n} \left(\left(\begin{array}{c} {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \\ \mathbf{f} \end{array} \right) \boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \left(\begin{array}{cc} 1 & {}^t \mathbf{r}(\mathbf{x}_0) \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}_0) & \mathbf{R} \end{array} \right) \right)$$

et il faut spécifier la loi du vecteur $(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\psi})$. On pourra trouver des explications supplémentaires sur la modélisation hiérarchique dans Santner et al. (2003). Si l'on considère un modèle hiérarchique complet, on est amené à se donner un *a priori* sur $\boldsymbol{\psi}$. Cependant, en général, il n'est pas alors possible d'obtenir une expression analytique de la loi *a posteriori* et il faut utiliser des techniques d'intégration numérique intensive, par exemple les algorithmes de *Markov Chain Monte Carlo* (MCMC). C'est la raison pour laquelle il est préférable d'utiliser plutôt une estimation de $\boldsymbol{\psi}$, voir Kennedy and O'Hagan (2001). C'est la démarche adoptée par Oakley and O'Hagan (2004). Ils se placent dans le cadre d'un EBLUP, c'est-à-dire qu'ils ne se donnent pas de loi *a priori* sur $\boldsymbol{\psi}$ (ils l'estiment dans un second temps) et proposent une loi *a priori* sur le vecteur $(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$ de la forme

$$P(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \propto \sigma^{-(d+p+2)/2} \exp \left(- \left[{}^t (\boldsymbol{\beta} - \mathbf{z}) \mathbf{V}^{-1} (\boldsymbol{\beta} - \mathbf{z}) + a \right] / 2\sigma^2 \right)$$

où $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^p$, $a \in \mathbb{R}$ et $\mathbf{V} \in \mathcal{M}_p(\mathbb{R})$ sont fixés. Cette loi est connue sous le nom de distribution normale inverse gamma, en effet dans ce cas la loi de $\boldsymbol{\beta}$ sachant σ^2 est une loi normale de moyenne \mathbf{z} et de matrice de variance-covariance $\sigma^2 \mathbf{V}$ et la loi de a/σ^2 est une loi gamma de paramètre d . On en déduit alors que

$$\frac{Y_0 - m^*(\mathbf{x}_0)}{\widehat{\sigma} \sqrt{c^*(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0)}} | \mathbf{Y}^n \sim t_{d+n} \quad (2.8)$$

où

$$\begin{aligned}
m^*(\mathbf{x}_0) &= {}^t\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\widehat{\boldsymbol{\beta}} + {}^t\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}_0)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}(\mathbf{Y}^n - \mathbf{f}\widehat{\boldsymbol{\beta}}), \\
c^*(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}'_0) &= \widehat{\mathbf{R}}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}'_0) - {}^t\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}_0)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}'_0) \\
&\quad + ({}^t\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) - {}^t\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}_0)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f})({}^t\mathbf{f}\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f})^{-1}({}^t\mathbf{f}(\mathbf{x}'_0) - {}^t\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}'_0)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f}), \\
\widehat{\boldsymbol{\beta}} &= \mathbf{V}^*(\mathbf{V}^{-1}\mathbf{z} + {}^t\mathbf{f}\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{Y}^n), \\
\hat{\sigma}^2 &= \left(a + {}^t\mathbf{z}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{z} + {}^t\mathbf{Y}^n\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{Y}^n - {}^t\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V}^*)^{-1}\widehat{\boldsymbol{\beta}} \right) / (n + d - 2), \\
\mathbf{V}^* &= (\mathbf{V}^{-1} + ({}^t\mathbf{f}\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f})^{-1})^{-1}.
\end{aligned}$$

Nous avons repris ici les notations de Oakley and O'Hagan (2004), une démonstration de ce résultat peut être trouvée dans Santner et al. (2003) ou O'Hagan (1994). Remarquons que le résultat (2.8) implique que le EBLUP de $\eta(\mathbf{x}_0)$ est précisément $m^*(\mathbf{x}_0)$.

A partir de ce prédicteur, Oakley et O'Hagan proposent de construire des estimateurs des indices de sensibilité. Supposons par exemple que l'on veuille estimer l'espérance conditionnelle de $\eta(\mathbf{X})$ sachant \mathbf{X}_A pour $A \subset \{1, \dots, d\}$, un sous-ensemble du vecteur \mathbf{X} composé des facteurs dont l'indice appartient à A :

$$\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A = \mathbf{x}_A) = \int_{\mathcal{X}_{-A}} \eta(\mathbf{x}) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A)$$

où $F_{-A|A}$ est la distribution conditionnelle du vecteur composé des facteurs dont l'indice n'est pas dans A sachant les facteurs dont l'indice est dans A . Si l'on remplace $\eta(\mathbf{x})$ par $Y(\mathbf{x})$, cette expression est une fonctionnelle linéaire du processus gaussien $Y(\mathbf{x})$ et sa loi *a posteriori* est aussi une loi de Student à $n + d$ degrés de liberté après l'avoir centrée et réduite comme on l'a fait en (2.8). On calcule facilement la moyenne *a posteriori*, c'est-à-dire l'EBLUP de l'espérance conditionnelle :

$$\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A = \mathbf{x}_A)) = \mathbf{N}_A(\mathbf{x}_A)\widehat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{T}_A(\mathbf{x}_A)\mathbf{e}$$

où \mathbb{E}^* représente l'espérance par rapport à la loi *a posteriori* de $Y(\mathbf{x})$ et :

$$\begin{aligned}
\mathbf{N}_A(\mathbf{x}_A) &:= \int_{\mathcal{X}_{-A}} {}^t\mathbf{f}(\mathbf{x}) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A), \\
\mathbf{T}_A(\mathbf{x}_A) &:= \int_{\mathcal{X}_{-A}} {}^t\widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A), \\
\mathbf{e} &:= \widehat{\mathbf{R}}^{-1}(\mathbf{Y}^n - \mathbf{f}\widehat{\boldsymbol{\beta}}).
\end{aligned}$$

Remarquons que l'on a aussi $\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X}))) = N\widehat{\boldsymbol{\beta}} + T\mathbf{e}$ où N et T sont obtenus avec $A = \emptyset$. On peut aussi calculer les covariances *a posteriori*, notées Cov^* :

$$\begin{aligned}
&\text{Cov}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A = \mathbf{x}_A), \mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_B = \mathbf{x}'_B)) \\
&= \hat{\sigma}^2 \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-B}} c^*(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}'_B) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-B|B}(\mathbf{x}_{-B}|\mathbf{x}'_B) \\
&= \hat{\sigma}^2 \left[U_{A,B}(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}'_B) - \mathbf{T}_A(\mathbf{x}_A)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}{}^t\mathbf{T}_B(\mathbf{x}'_B) \right. \\
&\quad \left. + \left(\mathbf{N}_A(\mathbf{x}_A) - \mathbf{T}_A(\mathbf{x}_A)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f} \right) \mathbf{W}^t \left(\mathbf{N}_B(\mathbf{x}'_B) - \mathbf{T}_B(\mathbf{x}'_B)\widehat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{f} \right) \right]
\end{aligned}$$

où

$$U_{A,B}(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}'_B) = \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-B}} \widehat{R}(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}'_B) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-B|B}(\mathbf{x}_{-B}|\mathbf{x}_B),$$

$$\mathbf{W} = ({}^t \mathbf{f} \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{f})^{-1}.$$

Notre but ici est d'estimer les indices de sensibilité de la forme S_A . Leurs numérateurs sont des fonctionnelles quadratiques de $Y(\mathbf{x})$ et leurs distributions *a posteriori* ne sont pas calculables analytiquement. Oakley et O'Hagan notent qu'il est possible cependant de calculer la moyenne de leur distribution *a posteriori*, qui est un prédicteur du numérateur des indices de sensibilité. Si l'on écrit que

$$\begin{aligned} \text{Var}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2) - \mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A))^2 \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2) - \mathbb{E}(\eta(\mathbf{X}))^2, \end{aligned}$$

les résultats précédents permettent de calculer $\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2)$, il nous reste juste à exprimer la moyenne *a posteriori* de $\mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2)$:

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2)) \\ &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \mathbb{E}^*(Y(\mathbf{x})Y(\mathbf{x}^*)) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A) \\ &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} [\hat{\sigma}^2 c^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) + m^*(\mathbf{x})m^*(\mathbf{x}^*)] dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A) \end{aligned}$$

où dF_A est la distribution marginale de \mathbf{X}_A et \mathbf{x}^* représente le vecteur composé à partir de \mathbf{x}_A et \mathbf{x}'_{-A} de la même manière que \mathbf{x} est composé de \mathbf{x}_A et \mathbf{x}_{-A} . La première partie de l'intégrale s'écrit

$$\begin{aligned} &\int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \hat{\sigma}^2 c^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A) \\ &= \hat{\sigma}^2 \left[\mathbf{U}_A - \text{tr}(\widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{P}_A) + \text{tr} \left(\mathbf{W}(\mathbf{Q}_A - \mathbf{M}_A \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{f} - {}^t \mathbf{f} \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{M}_A + {}^t \mathbf{f} \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{P}_A \widehat{\mathbf{R}}^{-1} \mathbf{f}) \right) \right] \end{aligned}$$

et la deuxième partie s'écrit

$$\begin{aligned} &\int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} m^*(\mathbf{x})m^*(\mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A) \\ &= \text{tr}({}^t \mathbf{e} \mathbf{P}_A \mathbf{e}) + 2\text{tr}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{M}_A \mathbf{e}) + \text{tr}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{N}_A \widehat{\boldsymbol{\beta}}) \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_A &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \widehat{R}(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A), \\ \mathbf{P}_A &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) {}^t \widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A), \\ \mathbf{Q}_A &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) {}^t \mathbf{f}(\mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A), \\ \mathbf{M}_A &= \int_{\mathcal{X}_A} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \int_{\mathcal{X}_{-A}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) {}^t \widehat{\mathbf{r}}(\mathbf{x}^*) dF_{-A|A}(\mathbf{x}_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_{-A|A}(\mathbf{x}'_{-A}|\mathbf{x}_A) dF_A(\mathbf{x}_A). \end{aligned}$$

Finalement, le prédicteur de S_A est donné par

$$\frac{\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|\mathbf{X}_A)^2)) - \mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X}))^2)}{\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})^2)) - \mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X}))^2)}$$

où $\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})^2))$ est calculé à partir du résultat précédent en prenant $A = \emptyset$.

Dans l'approche de Oakley et O'Hagan, la fonction η ne doit être évaluée qu'en n points servant à calculer le EBLUP. En effet, une fois cette prédiction effectuée, le prédicteur des indices de sensibilité ne fait intervenir que des intégrales par rapport à la loi des facteurs \mathbf{X} . En pratique, le choix des n points se base sur des considérations de planification expérimentale (Sacks, Welch, Mitchell and Wynn 1989). Cette technique permet donc de réduire de manière significative le nombre d'évaluations de la fonction η . On pourra trouver des tests comparatifs entre cette méthode et la méthode de Sobol' dans Oakley and O'Hagan (2004), ces derniers exhibant par exemple un modèle pour lequel la méthode de Sobol' requiert plusieurs milliers d'évaluations de η pour atteindre une précision comparable à leur méthode avec 200 évaluations.

En ce qui concerne les intégrales multiples intervenant dans le calcul du prédicteur (N_A , T_A , $U_{A,B}$, U_A , P_A , Q_A et M_A), les auteurs signalent qu'elles peuvent être évaluées numériquement si elles ne sont pas calculables analytiquement. Si les facteurs sont indépendants, il est en effet possible de faire une telle évaluation numérique : les fonctions à intégrer sont séparables et sous l'hypothèse d'indépendance les densités conditionnelles sont elles aussi séparables. Ainsi les intégrales multiples sont réduites à un produit d'intégrales simples qu'il est facile d'approcher numériquement. En revanche, lorsque les facteurs ne sont pas indépendants, cette astuce ne fonctionne plus et pose problème pour le calcul du prédicteur, nous aborderons ce point plus précisément dans le chapitre 4.

Remarquons enfin que la modélisation par processus gaussiens que nous venons de détailler rentre dans le cadre de la régression régularisée dans les espaces de Hilbert à noyau auto-reproduisant, voir Vasquez (2005) ou Seeger (2004). Nous proposons dans le chapitre 3 une courte introduction à ce type de régression.

2.3 Limitations et nouvelles pistes

Dans le cadre de l'analyse d'incertitudes, il apparaît qu'une condition nécessaire à la propagation des incertitudes à travers un modèle est de connaître la distribution des facteurs incertains. S'il est possible d'utiliser des considérations *a priori* pour certains d'entre eux, ce n'est pas le cas pour les estimateurs de paramètres qui sont calculés à partir de mesures expérimentales. Il est donc important de trouver des techniques permettant d'estimer les distributions de ce type de facteurs, c'est l'objet du chapitre suivant.

Par ailleurs, en ce qui concerne l'analyse des sensibilités, nous venons de voir plusieurs méthodes permettant d'estimer les indices de sensibilité d'un modèle par rapport à chacun des facteurs dont il dépend. Les méthodes de Sobol', FAST et McKay reposent sur l'hypothèse d'indépendance des paramètres. Ce n'est malheureusement pas le cas pour les modèles de cinétique chimique que nous étudions.

Il est possible d'étendre la méthode de McKay pour des facteurs corrélés, voir par exemple

Ratto et al. (2001). Cependant, de nombreuses évaluations de la fonction η sont requises pour atteindre une précision raisonnable. La méthode de Oakley et O'Hagan demande quant à elle peu d'évaluations de η et ne fait pas d'hypothèse d'indépendance *a priori*. Néanmoins, quand l'espace des facteurs est de grande dimension, les intégrales multiples qu'elle demande d'évaluer numériquement posent problème à cause du fléau de la dimension. Nous détaillerons ce point dans le chapitre 4. Il est donc très intéressant de développer de nouvelles approches pour réussir à estimer les indices de sensibilité de modèles où les facteurs ne sont pas indépendants. C'est l'objet du chapitre 4 qui présentent deux méthodes originales pour traiter le cas de facteurs corrélés.

Analyse d'incertitudes

Dans ce chapitre nous détaillons trois procédures pour approcher la distribution des estimateurs obtenus à partir de mesures expérimentales : l'échantillonnage par algorithme de Métropolis, le bootstrap et l'approximation du bootstrap par des surfaces de réponse.

Dans la première partie nous décrivons le problème de l'obtention de la loi jointe des estimateurs des paramètres à partir de mesures expérimentales.

La deuxième partie est consacrée à l'algorithme de Métropolis (Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller and Teller 1953), nous y montrons que si d'un point de vue général il est possible d'utiliser cette méthode, il est difficile de l'appliquer sur les cas réels que nous avons à traiter faute de résultats fiables sur la convergence des chaînes de Markov multidimensionnelles à valeurs réelles.

Dans la troisième partie nous présentons la technique du bootstrap (Efron 1979) qui permet d'approcher, sous certaines hypothèses, la distribution d'un estimateur. Nous détaillons son application aux divers modèles cinétiques du chapitre 1. Ces simulations montrent cependant qu'une approximation raisonnable de la distribution des estimateurs des paramètres cinétiques ne peut se faire qu'avec un nombre conséquent de minimisations de problèmes de moindres carrés non-linéaires. Le bootstrap est donc peu praticable sur des modèles complexes.

Pour cette raison, nous proposons dans les deux dernières parties de ce chapitre une méthode novatrice permettant d'approcher la distribution bootstrap d'un estimateur à l'aide de surfaces de réponse. Cette approche limite le nombre de minimisation moindres carrés. Deux techniques ont été retenues pour mettre en oeuvre cette méthode : l'approximation par polynômes de chaos et la régression SVM.

3.1 Loi jointe des estimateurs de paramètres cinétiques

Commençons tout d'abord par détailler le problème de l'obtention de la loi jointe des paramètres d'un modèle cinétique tel que ceux présentés au chapitre 1.

Rappelons qu'un modèle cinétique s'écrit de manière générale sous la forme d'une régression non-linéaire

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i \quad i = 1, \dots, n$$

où \mathbf{Y}_i est la i -ième observation du vecteur des q sorties $\mathbf{Y} = (Y^1, \dots, Y^q)$, \mathbf{c}_i est la i -ième observation du vecteur des m variables contrôlées $\mathbf{c} = (c^1, \dots, c^m)$, $\boldsymbol{\theta}_0$ est le vecteur des p paramètres cinétiques inconnus du modèle, $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon^1, \dots, \epsilon^q)$ est un bruit i.i.d centré supposé gaussien et n est le nombre de mesures expérimentales effectuées. Supposons que $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$ où $\boldsymbol{\Sigma}$ est diagonale (erreurs indépendantes d'une sortie à l'autre) et que $\boldsymbol{\theta}_0 \in \Theta$ avec Θ compact. Le vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$ peut alors être estimé par l'estimateur classique du maximum de vraisemblance

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})).$$

En pratique, nous ne connaissons pas la matrice $\boldsymbol{\Sigma}$ des erreurs. Deux choix sont possibles : les variances sont fixées *a priori* à l'aide de considérations expérimentales, ou une procédure itérative permet d'adapter leur valeur aux données que l'on possède (Antoniadis et al. 1992).

On s'intéresse à la loi jointe de l'estimateur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$. Si $n \rightarrow \infty$, on est assuré que cet estimateur tend vers une loi gaussienne si la fonction \mathbf{f} est suffisamment régulière (ce qui est le cas dans les modèles de cinétique), voir par exemple le chapitre consacré aux M-estimateurs dans Van Der Vaart (1998). Or en pratique le nombre n de mesures dont on dispose est peu élevé, par exemple $n = 10$ pour le modèle simplifié d'hydrodésulfuration ou $n = 63$ pour le modèle d'isomérisation du butane. L'approximation par une loi gaussienne n'est donc pertinente qu'au premier ordre et il nous faut trouver une ou plusieurs méthodes pour affiner cette approximation : les trois méthodes citées dans l'introduction et que nous avons explorées sont détaillées dans la suite de ce chapitre.

3.2 Algorithme de Métropolis

Dans cette section nous proposons d'écrire la loi des estimateurs de paramètres cinétiques que nous venons d'explicitier sous la forme d'une loi *a posteriori* (approche bayésienne). Cette écriture permet ensuite de se donner une chaîne de Markov de loi limite égale à la loi des estimateurs, et de générer la chaîne par algorithme de Métropolis. L'idée générale est qu'asymptotiquement l'algorithme va fournir des observations selon la loi limite c'est-à-dire selon la loi des estimateurs qui nous intéresse. Cependant, nous verrons que le défaut majeur de cette méthode repose sur le caractère asymptotique de la méthode. Comment juger en pratique si le nombre d'itérations de la chaîne est suffisant pour supposer que l'on a atteint le comportement limite ? Nous donnons quelques éléments à la fin de la section en discutant plusieurs méthodes proposées dans la littérature pour tenter de répondre à cette question.

3.2.1 Approche bayésienne pour la loi jointe des estimateurs des paramètres

Lors de l'étude d'un modèle cinétique, nous disposons de n mesures expérimentales. A partir de ces données, on peut faire une estimation du vecteur des paramètres cinétiques inconnus par maximum de vraisemblance comme décrit précédemment en 3.1, notons-la $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$. On peut alors calculer le vecteur $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i$ des résidus observés du modèle ajusté par :

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i = \mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) \quad i = 1, \dots, n.$$

L'idée est d'exprimer la loi de l'estimateur des paramètres par la règle de Bayes, en présupposant une loi *a priori* sur la loi de l'estimateur et sur la loi des résidus. La loi *a posteriori* de l'estimateur s'écrit alors de manière formelle

$$\begin{aligned} P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n | \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n) &= \frac{P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n)}{P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n)} \\ &= \frac{P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)}{P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n)} \\ &= \frac{1}{C} P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) \end{aligned}$$

où $P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ est la loi *a priori* des résidus sachant l'estimateur des paramètres, $P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ la loi *a priori* de l'estimateur des paramètres et C une constante (inconnue) vis-à-vis de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$.

Il nous reste maintenant à nous donner les lois *a priori* sur l'estimateur des paramètres et sur les résidus. De manière classique, nous pouvons tout d'abord considérer les résidus comme gaussiens, ce qui nous amène à supposer que

$$P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_n | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) = \prod_{i=1}^n P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$$

avec

$$P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) = \frac{1}{(2\pi)^{q/2} \sqrt{\det \hat{\boldsymbol{\Gamma}}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i^t \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i\right)$$

où $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \text{diag}(\hat{\sigma}_1^2, \dots, \hat{\sigma}_q^2)$ est la matrice diagonale des variances empiriques des résidus calculées à partir des observations. En ce qui concerne la loi *a priori* de l'estimateur des paramètres, considérer la normalité asymptotique rappelée en 3.1 est une approche naturelle :

$$P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} (\hat{\boldsymbol{\theta}}_n - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}})^t (\hat{\boldsymbol{\theta}}_n - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}})\right).$$

Remarquons que la moyenne *a priori* de l'estimateur des paramètres est la valeur estimée $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$. En effet, c'est la seule information dont on dispose sur l'estimateur des paramètres. Par ailleurs, on supposera ici que les estimateurs des paramètres ont été normalisés au préalable (par exemple en les divisant par leurs valeurs observées) et que ces estimateurs sont indépendants *a priori*, d'où une matrice de variance-covariance égale à l'identité *a priori*.

Les lois *a priori* étant données, la seule inconnue dans la loi *a posteriori* de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ est la constante C , qui peut s'écrire en fonction des deux lois *a priori* que nous venons d'exhiber :

$$\begin{aligned} C &= P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}) \\ &= \int P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}) d\hat{\boldsymbol{\theta}}_n \\ &= \int P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}|\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) d\hat{\boldsymbol{\theta}}_n. \end{aligned}$$

La constante C (en $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$) s'exprime donc comme une intégrale de dimension p (nombre de paramètres cinétiques) des deux lois *a priori*. Si à première vue cette intégrale peut se calculer analytiquement car elle ne fait intervenir que des densités de lois normales, ce n'est pas du tout le cas en réalité car la matrice de variance-covariance $\boldsymbol{\Sigma}$ dépend de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ et il nous est impossible d'explicitier cette dépendance. La seule manière d'estimer C est donc l'intégration numérique. Or approcher une intégrale multidimensionnelle est problématique en grande dimension (voir par exemple Owen (2005)), ce qui est le cas des modèles cinétiques qui en général dépendent d'une dizaine de paramètres ($p \approx 10$).

Il existe néanmoins une méthode permettant de générer des observations selon une loi complexe, notamment une loi connue à une constante près. C'est l'algorithme de Métropolis que nous décrivons dans la section suivante.

3.2.2 Principe de l'algorithme

En pratique, générer des échantillons de distributions complexes peut s'avérer extrêmement difficile. Il existe néanmoins diverses méthodes permettant de résoudre ce problème, parmi lesquelles les méthodes classiques d'échantillonnage basées sur les chaînes de Markov. Il est possible de prouver qu'avec ces méthodes la distribution recherchée est approximativement générée, tout du moins dans la limite où la longueur de la chaîne augmente. En notant $\mathbf{X} = \{X^1, \dots, X^p\}$ le vecteur des p variables que l'on veut échantillonner et $\mathbf{X}_n = \{X_n^1, \dots, X_n^p\}$ la réalisation de ces variables à l'étape n de la chaîne, cette dernière est uniquement définie par la donnée de la distribution initiale \mathbf{X}_0 et des probabilités de transition de \mathbf{X}_n connaissant \mathbf{X}_{n-1} . Ces probabilités sont choisies de telle sorte que la distribution de \mathbf{X} soit une mesure invariante de la chaîne, ce qui nous assure de générer asymptotiquement un échantillon de même loi que \mathbf{X} . En effet on a le théorème (voir par exemple Brémaud (1999)) :

Théorème 3.1. *Une chaîne de Markov $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ irréductible, apériodique et récurrente positive converge en loi vers son unique mesure invariante quelque soit sa distribution initiale.*

Parmi les méthodes basées sur les chaînes de Markov, on trouve l'algorithme classique de Metropolis, introduit historiquement dans l'article de Metropolis et al. (1953). On se contente dans cette section de ne présenter que le cas continu car c'est le cas des procédés chimiques que nous avons étudiés. Son principe est le suivant.

Supposons que l'on souhaite générer un échantillon de la distribution jointe $\pi(\mathbf{x})$ d'un vecteur aléatoire $\mathbf{X} = \{X^1, \dots, X^p\}$. L'algorithme de Metropolis répond à ce problème en répétant des changements aléatoires des éléments de \mathbf{X} . Ce procédé peut être vu comme

l'opération d'une chaîne de Markov construite à partir de probabilités de transition notées $(B_k)_{k=1\dots p}$. La façon dont elles opèrent pour générer un nouvel état, noté \mathbf{x}' , à partir de l'état actuel, noté \mathbf{x} , est décrite de la manière suivante :

1. On sélectionne un état "candidat", \mathbf{x}^* , dont toutes les composantes autres que la k -ième (l'indice k est choisi au hasard) sont les mêmes que celles de \mathbf{x} , tandis que \mathbf{x}^*_{k} est tirée à partir d'une distribution préalablement choisie, qui généralement ne dépend que de \mathbf{x}_k , caractérisée par les probabilités $S_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*)$;
2. On accepte cet état candidat avec une probabilité $A(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*)$; dans le cas contraire on le rejette et on retient l'état actuel.

En détail, cette procédure d'acceptation/rejet se fait en générant un nombre aléatoire u suivant une loi uniforme sur $[0, 1[$, et en fixant le nouvel état comme suit :

$$\mathbf{x}' = \begin{cases} \mathbf{x}^* & \text{si } u < A(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) \\ \mathbf{x} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.1)$$

Habituellement, la fonction d'acceptation $A(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ utilisée est de la forme

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{x}')S_k(\mathbf{x}', \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')} \right).$$

Nous montrons ci-dessous que $\pi(\mathbf{x})$ est une distribution stationnaire de la chaîne de Markov utilisée dans l'algorithme de Métropolis et que cette chaîne de Markov est irréductible aperiodique et récurrente positive.

En effet soit $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ une chaîne définie sur un ensemble d'états Ω construite en suivant la procédure que nous venons de décrire. Le noyau de transition de la chaîne est

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})A(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

donc

$$\begin{aligned} \pi(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ &= \pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \right) \\ &= \min (\pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})) \\ &= \min (\pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \\ &= \pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{x})S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})} \right) \\ &= \pi(\mathbf{y})S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})A(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \\ &= \pi(\mathbf{y})P(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

ce qui montre que $\pi(\mathbf{x})$ est une distribution réversible, et par conséquent une distribution stationnaire de la chaîne. De plus, si $S_k(\cdot, \cdot)$ est non nul, la chaîne est immédiatement irréductible. Donc $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ est irréductible et possède une distribution stationnaire, ce qui implique qu'elle est récurrente positive (car $\pi(\mathbf{x})$ est évidemment finie). Pour montrer l'apériodicité, on peut enfin noter que $P(\mathbf{x}, \mathbf{x}) > 0$ pour un \mathbf{x} .

Remarque 3.2. En pratique les probabilités S_k sont fréquemment choisies de telle sorte qu'elles vérifient la condition de symétrie

$$S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega$$

et dans ce cas la fonction d'acceptation se simplifie :

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{x}')}{\pi(\mathbf{x})} \right).$$

Revenons au problème des modèles cinétiques, où nous voulons générer un échantillon de la loi de l'estimateur des paramètres cinétiques $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$. On a admis dans la section précédente que cette loi s'écrit

$$P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n | \hat{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{1}{C} P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$$

où $P(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ et $P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ sont connues mais C est inconnue. Si l'on utilise l'algorithme de Métropolis pour générer un échantillon de $P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n | \hat{\boldsymbol{\epsilon}})$, on peut construire une chaîne de Markov $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ de noyau de transition

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ &= S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{y}) S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{\pi(\mathbf{x}) S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \right) \\ &= S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \min \left(1, \frac{C P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{C P_{\mathbf{x}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P_{\mathbf{x}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \right) \\ &= S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \min \left(1, \frac{P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) S_k(\mathbf{y}, \mathbf{x})}{P_{\mathbf{x}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n) P_{\mathbf{x}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n) S_k(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \right) \end{aligned}$$

où $P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ désigne la loi de $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ sachant $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n = \mathbf{y}$ et $P_{\mathbf{y}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ la loi de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ en \mathbf{y} . Remarquons que cette expression ne fait plus intervenir la constante inconnue C . C'est la raison pour laquelle cet algorithme est fréquemment utilisé pour générer un échantillon d'une loi connue à une constante près car le noyau de transition de la chaîne qu'il construit permet de s'affranchir de la constante. Pour une description très complète de l'utilisation de l'algorithme de Métropolis en inférence bayésienne, on pourra consulter Neal (1993).

Ainsi, nous avons construit une chaîne de Markov $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ dont la distribution stationnaire est la loi $P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n | \hat{\boldsymbol{\epsilon}})$. Par conséquent, asymptotiquement, les réalisations de la chaîne de Markov $(\mathbf{X}_n)_{n \geq 0}$ seront distribuées selon $P(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n | \hat{\boldsymbol{\epsilon}})$. Cependant, une question cruciale reste à examiner : si l'on est assuré qu'asymptotiquement on obtient bien un échantillon distribué selon la loi que l'on souhaite simuler, comment en pratique décider à partir de quelle itération de la chaîne les réalisations seront distribuées selon cette loi invariante ? Obtenir une réponse satisfaisante à cette question est primordial lorsque l'on travaille sur des cas pratiques tels que les modèles cinétiques du chapitre 1 et fait l'objet de la section suivante.

3.2.3 Diagnostics de convergence d'une chaîne de Markov

Un grand nombre de méthodes ont été développées ces quinze dernières années pour diagnostiquer la convergence d'une chaîne de Markov vers sa distribution stationnaire. Pour

une comparaison de plusieurs de ces méthodes, on pourra consulter Cowles and Carlin (1996) et Brooks and Roberts (1998). Nous ne donnons dans ce paragraphe qu'un éventail qui nous a paru représentatif et intéressant parmi toutes ces méthodes. Certaines techniques décrites ici n'ont pas été utilisées car leurs hypothèses ne sont pas vérifiées par les modèles de cinétique chimique. Cependant, nous tenions à les citer dans ce document car leurs limitations font l'objet de recherches actuelles, notamment pour lever l'hypothèse classique d'espace d'état fini.

Certaines d'entre elles proposent de lancer en parallèle plusieurs chaînes de Markov démarant de points initiaux différents alors que d'autres proposent de lancer une seule longue chaîne. C'est la première distinction que l'on peut faire entre ces méthodes. La simulation de chaînes en parallèle permet de mieux explorer l'espace d'état et d'avoir des échantillons indépendants. Mais la convergence est alors gouvernée par la chaîne la plus lente et la loi initiale est seulement basée sur des informations partielles sur la loi invariante. Une chaîne unique est quant à elle moins coûteuse en ressources de calcul et fournit un biais plus faible. Nous ne discuterons pas plus en détail de ces différences, mais notons simplement que le débat "une seule chaîne" contre "plusieurs chaînes en parallèle" n'est pas encore clos.

La seconde distinction habituellement mise en avant, que nous adopterons pour classer ces méthodes dans les sections suivantes, se fait en regroupant les techniques en trois catégories :

- Analyse de la sortie : ces procédures sont basées sur le contrôle statistique d'une ou plusieurs sorties de la chaîne de Markov, elles sont généralement peu coûteuses en temps de calcul ;
- Etude théorique : ces méthodes exploitent certains aspects théoriques de l'algorithme d'échantillonnage ;
- Constructions probabilistes : ces techniques reposent sur l'utilisation de propriétés des chaînes des Markov permettant de proposer d'autres solutions pour la génération de la loi stationnaire.

Dans la suite de cette section nous ne présenterons que certaines méthodes appartenant à ces trois catégories, le lecteur intéressé pourra consulter la littérature abondante sur ce sujet fournie dans Cowles and Carlin (1996) et Brooks and Roberts (1998), ainsi que dans les articles cités dans les paragraphes qui suivent. Nous adoptons ici la présentation de Brooks and Roberts (1998).

Techniques d'analyses statistiques des sorties

Les deux premières techniques que nous allons détailler sont basées sur la génération de m chaînes de Markov $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(m)}$ en parallèle.

Canty (1995) suggère un diagnostic en deux étapes pour tester la convergence d'une variable d'intérêt unidimensionnelle ψ fonction des sorties de la chaîne \mathbf{X} . Comme on lance m chaînes en parallèle, on dispose d'observations $\psi_i^{(k)}$ de la variable ψ à la i -ième itération de la chaîne k pour $i \geq 0$ et $k = 1, \dots, m$. Avant de commencer à étudier la conver-

gence proprement dite, il propose de vérifier si l'algorithme a commencé à générer une loi suffisamment éloignée de la loi initiale. Pour cela il se place à l'instant n et trace le diagramme quantile-quantile (Filliben 1975) des deux échantillons $\mathbf{A}_0 = (\psi_0^{(1)}, \dots, \psi_0^{(m)})$ et $\mathbf{A}_n = (\psi_n^{(1)}, \dots, \psi_n^{(m)})$. Il ajuste alors une droite $a + bx$ sur les points de ce diagramme par moindres carrés :

$$\hat{b} = \frac{S_{nn} - S_{00} + \sqrt{(S_{nn} - S_{00})^2 + 4S_{0n}^2}}{2S_{0n}},$$

$$\hat{a} = \bar{\psi}_n - \hat{b}\bar{\psi}_0$$

où

$$\bar{\psi}_n = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \psi_n^{(k)}, \quad \bar{\psi}_0 = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \psi_0^{(k)},$$

$$S_{nn} = \sum_{k=1}^m (\psi_n^{(k)} - \bar{\psi}_n)^2, \quad S_{00} = \sum_{k=1}^m (\psi_0^{(k)} - \bar{\psi}_0)^2,$$

$$S_{0n} = \sum_{k=1}^m (\psi_0^{(k)} - \bar{\psi}_0) (\psi_n^{(k)} - \bar{\psi}_n).$$

Sous l'hypothèse que \mathbf{A}_0 et \mathbf{A}_n suivent la même loi la vraie valeur du couple (a, b) est $(0, 1)$, une mesure de la différence entre ces deux échantillons peut ainsi être construite avec la distance entre (\hat{a}, \hat{b}) et $(0, 1)$, par exemple

$$D_n = D(\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_n) = \left(\max \left(|\hat{a}|, \frac{|\hat{a}|}{\hat{b}} \right) \right)^2 + \left(\max \left(\hat{b}, \frac{1}{\hat{b}} \right) - 1 \right)^2.$$

Grâce à un intervalle de confiance obtenu par bootstrap sur \mathbf{A}_n on peut alors tester si la distance observée D_n est significativement grande, ce qui signifie qu'à l'instant n la chaîne échantillonne selon une loi différente de la loi initiale. Il n'est pas nécessaire de tester l'éloignement à la loi initiale après chaque itération, il est recommandé de faire le test toutes les p itérations où p est un entier fixé par l'utilisateur, par exemple $p = 50$. Une fois que l'on a trouvé l'entier n à partir duquel la loi est significativement différente de la loi initiale on peut commencer à tester la convergence. Canty (1995) remarque d'une part que pour que la convergence soit atteinte, il faut que les m chaînes échantillonnent selon la loi invariante de ψ , et d'autre part que s'il y a convergence la chaîne transverse doit être distribuée selon cette loi. Il suggère donc de tester si toutes les chaînes échantillonnent à partir de la même distribution et si c'est aussi la distribution de la chaîne transverse. Après n itérations supplémentaires il compare les m échantillons $(\psi_i^{(k)})_{i=n+1, \dots, 2n}$ pour $k = 1, \dots, m$ à l'échantillon transverse $\mathbf{A}_{2n} = (\psi_{2n}^{(1)}, \dots, \psi_{2n}^{(m)})$ à l'aide de la distance précédente D . Le maximum de ces m distances est retenu comme distance maximale, et un intervalle de confiance est calculé pour cette distance maximale à l'aide d'un bootstrap sur \mathbf{A}_{2n} qui sert à tester si elle est significativement petite. Si c'est le cas, alors on peut supposer que toutes les chaînes échantillonnent à partir de la même loi. Cependant cela n'implique pas forcément que la convergence a lieu, et Canty (1995) laisse cette appréciation finale

hautement subjective à l'utilisateur et ne propose pas de généralisation pour une variable d'intérêt ψ multidimensionnelle, ce qui est un inconvénient majeur pour les problèmes qui nous intéressent.

La deuxième méthode que nous détaillons est une généralisation de celle de Gelman and Rubin (1992) qui comme Canty (1995) travaillent sur une variable d'intérêt ψ unidimensionnelle mais se basent sur des considérations de variances. La technique proposée par Brooks and Gelman (1998) en est une extension aux variables multidimensionnelles. Son principe est de fournir une base pour estimer à quel point la chaîne est proche de la convergence et, en particulier, à quel point on peut espérer améliorer cette situation avec des itérations supplémentaires. La procédure est la suivante : on simule en parallèle m chaînes indépendantes de longueur $2n$, chacune étant initialisée à différents points de départ dispersés en fonction de toute information dont on pourrait disposer sur la loi stationnaire. On élimine les n premières itérations ('burn-in') et on ne garde que les n dernières. En notant ψ un vecteur d'intérêt fonction des composantes de \mathbf{X} (on peut bien entendu prendre $\psi = \mathbf{X}$), on calcule alors \mathbf{B}/n , la matrice de variance-covariance des moyennes des m chaînes (dite matrice de variance-covariance *inter-chaînes*) :

$$\mathbf{B}/n = \frac{1}{m-1} \sum_{k=1}^m \left(\bar{\psi}^{(k)} - \bar{\psi} \right)^t \left(\bar{\psi}^{(k)} - \bar{\psi} \right)$$

où

$$\bar{\psi}^{(k)} = \frac{1}{n} \sum_{i=n+1}^{2n} \psi_i^{(k)} \quad \text{et} \quad \bar{\psi} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \bar{\psi}^{(k)}$$

en notant $\psi_i^{(k)}$ la i -ième itération de ψ de la chaîne k . On peut aussi calculer \mathbf{W} , la matrice de variance-covariance *intra-chaînes* :

$$\mathbf{W} = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{k=1}^m \sum_{i=n+1}^{2n} \left(\bar{\psi}_i^{(k)} - \bar{\psi}^{(k)} \right)^t \left(\bar{\psi}_i^{(k)} - \bar{\psi}^{(k)} \right).$$

Dans la méthode originale de Gelman and Rubin (1992), à partir de ces variances inter- et intra-chaînes (ce ne sont pas des matrices dans leur méthode car ils travaillent avec une variable d'intérêt ψ unidimensionnelle), les auteurs construisent un facteur \hat{R}_c appelé *potential scale reduction factor* assimilable à des constantes près à un ratio de ces variances qui indique, selon s'il est très supérieur à 1 ou au contraire très proche de 1, si l'on peut conclure que les m chaînes sont proches de la loi stationnaire. Dans le cas multidimensionnel, à partir de \mathbf{B} et \mathbf{W} on construit un facteur \hat{R}_p qui borne toutes les valeurs de \hat{R}_c que l'on pourrait calculer sur les composantes unidimensionnelles de ψ :

$$\hat{R}_p = \frac{n-1}{n} + \frac{m+1}{m} \lambda_1$$

où λ_1 est la plus grande valeur propre de $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}/n$. Brooks and Gelman (1998) nomment le facteur \hat{R}_p *multivariate potential scale reduction factor*. L'avantage de ce facteur est inhérent au fait qu'il résume de manière fiable chacune des mesures unidimensionnelles en

une seule valeur, avec un surcoût calculatoire peu important. Cependant les auteurs recommandent de combiner plusieurs approches. Par exemple, pour des problèmes en grande dimension, l'approche multidimensionnelle devrait être couplée avec l'approche unidimensionnelle pour chacune des composantes du vecteur d'intérêt.

Les deux dernières méthodes que nous décrivons dans ce paragraphe sont basées sur l'étude d'une seule longue chaîne \mathbf{X} et d'une variable d'intérêt unidimensionnelle ψ fonction de \mathbf{X} . Yu and Mykland (1998) proposent d'utiliser un graphe de sommes cumulées et suggèrent que ce graphe peut mettre en relief certains aspects de l'échantillonnage indiquant à l'utilisateur à quel point il explore rapidement ou lentement l'espace d'état dans la direction de la variable d'intérêt. La procédure est la suivante : soit $\mathbf{X}_0, \dots, \mathbf{X}_n$ la séquence obtenue par l'algorithme d'échantillonnage et $\psi = T(\mathbf{X})$ la variable d'intérêt unidimensionnelle que l'on décide d'étudier. En notant n_0 le temps de 'burn-in', on construit les sommes cumulées à partir de $T(\mathbf{X}_{n_0+1}), \dots, T(\mathbf{X}_n)$. La moyenne de $T(\mathbf{X})$ est estimée par

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n - n_0} \sum_{i=n_0+1}^n T(\mathbf{X}_i)$$

et les sommes cumulées par

$$\hat{S}_t = \sum_{i=n_0+1}^t (T(\mathbf{X}_i) - \hat{\mu})$$

pour $t = n_0 + 1, \dots, n$. Le graphe que les auteurs proposent d'étudier est obtenu en traçant \hat{S}_t en fonction de t pour $t = n_0 + 1, \dots, n$ en reliant les points successifs par des segments. Yu and Mykland (1998) affirment que la vitesse à laquelle la chaîne explore l'espace des états est indiquée par l'aspect plus ou moins lisse du graphe, plus précisément un graphe lisse suggère une exploration lente alors qu'un graphe en dents de scie indique une exploration rapide, cet argument étant justifié par les travaux de Lin (1992). Mais en pratique juger de l'aspect lisse d'un graphe est fortement subjectif, c'est la raison pour laquelle Yu and Mykland (1998) propose d'ajouter un graphe de sommes cumulées de référence, basé sur un échantillon de variables gaussiennes i.i.d de moyenne et de variance égales aux moments estimés de $T(\mathbf{X})$. Selon eux, ce graphe de référence approche, au second ordre, le graphe 'idéal' pour un échantillon i.i.d. de la loi stationnaire. Ainsi, une comparaison favorable des deux graphes, en considérant l'aspect lisse et la largeur des écarts, indique que la chaîne explore correctement l'espace d'état de la variable d'intérêt $\psi = T(\mathbf{X})$. Pour rendre l'interprétation de ce graphe plus objective, Brooks (1996) suggère de son côté de calculer un indicateur permettant de juger objectivement du caractère lisse d'un graphe. Il remarque qu'un graphe lisse est composé de segments de pentes égales ou comparables, alors qu'un graphe en dents de scie est formé de segments de pentes alternativement positives et négatives, de sorte que chaque point correspond à un optimum local. Ainsi, si l'on compte le nombre de tels points, on peut définir un indicateur associé au graphe. En notant

$$d_t = \begin{cases} 1 & \text{si } S_{t-1} > S_t \text{ et } S_t < S_{t+1} \\ & \text{ou } S_{t-1} < S_t \text{ et } S_t > S_{t+1}, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

pour tout $t = n_0 + 1, \dots, n$, alors l'indicateur

$$D_{n_0, n} = \frac{1}{n - n_0} \sum_{t=n_0+1}^{n-1} d_t$$

prend des valeurs comprises entre 0 et 1, où une valeur de 0 indique un graphe complètement lisse et une valeur de 1 un maximum d'optimums locaux. Brooks (1996) a montré que l'on peut considérer $D_{n_0, n}$ comme une réalisation d'un loi binomiale de moyenne $1/2$ et de variance $1/4(n - n_0)$. La loi des grands nombres assure alors que pour de grandes valeurs de $n - n_0$ l'indicateur $D_{n_0, n}$ est approximativement gaussien, ce qui implique que la non-convergence de la chaîne peut être détectée si $D_{n_0, n}$ n'est pas dans l'intervalle $\frac{1}{2} \pm u_{\alpha/2} \sqrt{\frac{1}{4(n_0 - n)}}$. Si l'introduction de l'indicateur D permet de rendre beaucoup plus objectif ce diagnostic à l'origine plutôt subjectif, remarquons tout de même que cette technique ne s'applique qu'à une variable d'intérêt monodimensionnelle.

La dernière technique que nous détaillons est celle de Hjorth and Vadeby (2003) et fait appel à la mesure de Kullback-Leibler empirique. On pourra consulter aussi Hjorth and Vadeby (2005). Partant de la séquence d'échantillonnage $\mathbf{X}_0, \dots, \mathbf{X}_n$ et de la variable d'intérêt ψ , cette méthode est basée sur la comparaison de la loi empirique de ψ sur l'échantillon complet avec les lois empiriques de ψ sur des sous-suites de cet échantillon. Cette comparaison est effectuée à travers la distance de Kullback-Leibler (Cover and Thomas 1991) pour deux lois, définie de la manière suivante. Pour deux distributions de probabilité F_0 et F_1 , de densités f_0 et f_1 par rapport à une mesure μ ,

$$KL(F_1, F_0) = \int \ln \left(\frac{f_0(x)}{f_1(x)} \right) f_0(x) d\mu(x)$$

est la distance de Kullback-Leibler (KL) entre les deux distributions F_0 et F_1 . Hjorth and Vadeby (2003) proposent une version adaptée de la distance KL pour mesurer la variabilité des distributions empiriques de sous-suites d'un échantillon. Après un période de 'burn-in', on dispose de n valeurs simulées ψ_i , $i = 1, \dots, n$. Cette suite est séparée en N sous-suites de longueur $t = n/N$ et ses valeurs en H classes E_j , $j = 1, \dots, H$ où on choisit n multiple de NH . Des valeurs raisonnables pour ces paramètres suggérées par les auteurs sont n entre 10^3 et 10^6 , N entre 4 et 20 et H entre 10 et 10^2 . Soit donc F_0 la distribution empirique obtenue à partir de la totalité de la suite, c'est-à-dire $F_0(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}(\psi_i \leq x)$,

et F_s la distribution empirique obtenue à partir de la s -ième sous-suite $(\psi_i)_{(s-1)t+1 \leq i \leq st}$ pour $s = 1, \dots, N$. En ordonnant les valeurs $\psi_{(1)} \leq \psi_{(2)} \leq \dots \leq \psi_{(n)}$ on définit ensuite $e_0 = -\infty$, $e_j = \psi_{(jT/H)}$ pour $j = 1, \dots, H$ et $e_H = +\infty$, ce qui permet de construire $E_j = (e_{j-1}, e_j)$, $j = 1, \dots, H$ partition de l'axe réel déterminée par les données. La distance de Kullback-Leibler adaptée est alors basée sur cette partition :

$$\begin{aligned} KL_s &= KL \left(\frac{F_s + \epsilon F_0}{1 + \epsilon}, F_0 \right) \\ &= \sum_{j=1}^H \ln \left(F_0(E_j) \left(\frac{F_s(E_j) + \epsilon F_0(E_j)}{1 + \epsilon} \right)^{-1} \right) F_0(E_j) \end{aligned}$$

où $F(E_j) = F(e_j) - F(e_{j-1})$ et ϵ est un réel introduit pour éviter une possible singularité de la distance KL. Il est possible de simplifier cette expression lorsque toutes les observations sont distinctes (par exemple dans le cas continu sur lequel nous travaillons), en effet dans ce cas $F_0(E_j) = 1/H$. En prenant de surcroît $\epsilon = \epsilon_0 = HN/n$ on a alors

$$\begin{aligned} KL_s &= \sum_{j=1}^N \ln \left(\frac{(1 + \epsilon_0)t/H}{tF_s(E_j) + \epsilon_0 t/H} \right) \\ &= \ln \left(\frac{n}{NH} + 1 \right) - \frac{1}{H} \sum_{j=1}^H \ln(n_{sj} + 1) \end{aligned}$$

où $n_{sj} = tF_s(E_j)$ est le nombre d'observations de la s -ième sous-suite prenant des valeurs dans l'intervalle E_j . Enfin, les auteurs définissent

$$\begin{aligned} KL &= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N KL_s \\ &= \ln \left(\frac{n}{NH} + 1 \right) - \frac{1}{NH} \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^H \ln(n_{sj} + 1). \end{aligned}$$

Hjorth and Vadeby (2003) interprètent finalement cette distance KL à l'aide d'un développement en série entière pour juger de la convergence de la chaîne. Remarquons que des simulations sont nécessaires dans le cas général pour fixer une valeur critique, ce qui fait de cette méthode une méthode essentiellement empirique.

Signalons enfin que d'autres méthodes d'analyse statistique des sorties existent, parmi lesquelles on compte les méthodes spectrales et en particulier celle de Geweke (1992).

Méthodes théoriques

Les méthodes dites 'théoriques' sont nombreuses, parmi lesquelles on trouve une catégorie de techniques dédiées à l'algorithme d'échantillonnage de Gibbs. En effet la structure de cet algorithme est très particulière et permet de prendre en compte certaines de ses propriétés théoriques pour diagnostiquer la convergence. Comme cet algorithme n'est pas applicable à notre problème car il requiert des informations supplémentaires sur la loi à échantillonner (c'est la raison pour laquelle nous avons choisi l'algorithme de Métropolis), nous ne détaillerons pas les méthodes réservées à l'algorithme de Gibbs. Le lecteur intéressé pourra consulter, entre autres, Ritter and Tanner (1992), Zellner and Min (1995), Liu, Liu and Rubin (1993) ou encore Roberts and Polson (1994). Nous décrivons ici seulement deux méthodes qui peuvent s'appliquer à l'algorithme de Métropolis.

La méthode de Yu (1995) s'appuie sur l'estimation de densité par estimateur à noyau. On dispose de simulations $\mathbf{X}_0, \dots, \mathbf{X}_n$ d'une chaîne dont la loi stationnaire a pour densité $\pi(\mathbf{x}) = c \tilde{\pi}(\mathbf{x})$ où $\tilde{\pi}$ est connue et c est la constante de normalisation, rappelons que c'est exactement la situation que nous rencontrons comme expliqué en 3.2.1. En premier lieu, l'auteur définit un estimateur à noyau de π à l'itération t :

$$\hat{\pi}_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t K_{h_t}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)$$

où $K_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^q} K\left(\frac{|\mathbf{x}|}{h}\right)$ avec $K(\cdot)$ noyau unidimensionnel symétrique borné d'intégrale 1, h_n un paramètre d'échelle et q dimension du vecteur \mathbf{X} . La constante de normalisation est alors estimée par

$$\hat{c}_{h_t} = \frac{1}{t(t-1)} \sum_{i \neq j}^t \frac{K_{h_t}(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)}{\tilde{\pi}(\mathbf{X}_j)}.$$

L'auteur propose de choisir un sous-ensemble compact A du support de la loi stationnaire. Elle estime alors la distance L^1 entre $\hat{\pi}_t$ et π par

$$\hat{D}_t(A) = \int_A |\hat{\pi}_t(\mathbf{x}) - \hat{c}_{h_t} \tilde{\pi}(\mathbf{x})| d\mathbf{x}$$

et le ratio entre l'espérance de l'erreur L^1 de l'estimateur à noyau avec la simulation de la chaîne de Markov et l'espérance de l'erreur L^1 du même estimateur à noyau basé sur un échantillon i.i.d. par

$$\widehat{eff}_t(A) = \frac{\hat{D}_t(A)}{2\hat{e}_t(A)}$$

où

$$\hat{e}_t(A) = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\int K^2(|\mathbf{x}|) d\mathbf{x} \right]^{1/2} \int_A (\hat{c}_{h_t} \tilde{\pi}(\mathbf{x}))^{1/2} d\mathbf{x}.$$

En choisissant les temps $t = t_0, 2t_0, \dots$ où l'on veut tester la convergence de la chaîne, on construit alors deux graphiques pour le diagnostic : le graphe de l'erreur $L^1 \hat{D}_t(A)$ en fonction de t et le graphe de l'efficacité $\widehat{eff}_t(A)$ en fonction de t . Des valeurs de $\hat{D}_t(A)$ plus grandes que 0.3 montrent que la chaîne n'a pas produit un échantillon satisfaisant de $\pi(\mathbf{x})$. De plus, des valeurs de $\widehat{eff}_t(A)$ ne se stabilisant pas autour de 2 suggèrent un mélange lent. Remarquons cependant que cette méthode possède plusieurs inconvénients. Tout d'abord le choix de valeurs critiques égales à 0.3 pour $\hat{D}_t(A)$ et à 2 pour $\widehat{eff}_t(A)$ sont relativement arbitraires même si l'on peut lancer plusieurs chaînes en parallèle et tracer ces graphiques pour chacune d'entre elles dans le but de les comparer entre eux. L'autre inconvénient réside dans le choix du sous-ensemble A car Yu (1995) souligne que les graphiques peuvent fournir un diagnostic faux si l'échantillon et A omettent le même mode de π . Enfin, il est crucial de remarquer que si la dimension q du vecteur \mathbf{X} est grande, l'évaluation numérique des intégrales intervenant dans $\hat{D}_t(A)$ et $\hat{e}_t(A)$ s'avère problématique à cause du fléau de la dimension. Dans l'article original de Yu (1995) cette méthode n'a pas été utilisée sur des exemples de dimension plus grande que 2.

Brooks, Dellaportas and Roberts (1997) proposent quant à eux une approche visant à obtenir une borne supérieure de la distance L^1 entre les estimations de la densité de \mathbf{X} obtenues sur différentes chaînes en parallèle. Les auteurs utilisent des idées similaires à l'échantillonnage par rejet, voir par exemple Smith and Gelfand (1992). Les auteurs suggèrent de lancer m chaînes en parallèle $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(m)}$ et de découper chacune d'entre elles en blocs de n_0 observations. Pour le l -ième bloc de la k -ième chaîne on définit alors

$$K_{kl}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n_0} \sum_{i=(l-1)n_0+1}^{ln_0} P(\mathbf{X}_i^{(k)}, \mathbf{x})$$

où l'on rappelle que $P(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ est le noyau de transition de la chaîne. Ainsi, $K_{kl}(\mathbf{x})$ est un estimateur de la densité de \mathbf{X} dans le bloc l de la chaîne k . Finalement, les auteurs calculent une moyenne des distances entre chaînes :

$$B_l = \frac{1}{m(m-1)} \sum_{k \neq k'} \hat{r}_{kk'}(l)$$

où $\hat{r}_{kk'}$ est donné par

$$\hat{r}_{kk'} = 1 - \min \left(1, \frac{K_{kl}(\mathbf{x})}{K_{k'l}(\mathbf{x})} \right)$$

pour un \mathbf{x} échantillonné selon la densité $K_{kl}(\cdot)$, et estime la distance L^1 entre $K_{kl}(\cdot)$ et $K_{k'l}(\cdot)$, voir Brooks et al. (1997). Les auteurs proposent d'étudier les valeurs de B_l pour différents blocs pour diagnostiquer la convergence, en effet ils suggèrent que la convergence est indiquée par un saut caractéristique dans les valeurs de B_t qui est une manifestation du phénomène de 'cutoff' de Diaconis (1996). Le phénomène de 'cutoff' est expliqué brièvement à la fin du paragraphe suivant.

Constructions probabilistes

Les diagnostics de convergence qualifiés de 'probabilistes' reposent sur des propriétés probabilistes inhérentes aux chaînes de Markov. Les premiers d'entre eux se basent sur les temps de couplage et les temps de régénération d'une chaîne de Markov.

On pourra citer la méthode de Johnson (1996) basée sur l'inégalité de couplage, inégalité qui est aussi utilisée de manière plus sophistiquée dans la construction de Propp and Wilson (1996) où ils présentent une méthode généralement appelée 'perfect sampling'. La méthode de Johnson (1996) fournit un graphique dont l'interprétation est aisée, cependant elle demande en général des temps de calcul très importants pour calculer les densités conditionnelles. L'idée de Propp and Wilson (1996) est théoriquement très attrayante car elle fournit un échantillonnage *exact* de la densité de \mathbf{X} , mais en pratique elle n'est pour l'instant applicable qu'à une classe de problèmes très restreinte dont notre problème en cinétique chimique ne fait pas partie. Ce sont les raisons pour lesquelles nous ne détaillerons pas ces méthodes ici.

En ce qui concerne l'utilisation des temps de régénération d'une chaîne de Markov, on peut citer deux méthodes relativement efficaces : celle de Mykland, Tierney and Yu (1995) et celle de Robert (1996). Elles sont cependant toutes les deux fortement limitées en pratique : en effet dans le cas d'un espace d'état Ω discret les temps de régénération d'une chaîne sont facilement calculables et les deux diagnostics peuvent être mis en oeuvre, ce qui n'est pas le cas d'un espace d'état non fini car alors le calcul de ces temps n'est possible que dans des cas très spécifiques. Etant donné que nous travaillons ici sur une chaîne à espace d'états Ω non-dénombrable, nous ne pourrions pas utiliser ces méthodes.

Le second type de diagnostic probabiliste s'appuie sur l'étude du comportement de la distance $\mathbb{L}^2 \|\pi_n - \pi\|$ où π_n est la loi de la chaîne après n itérations.

La première idée pour étudier ce comportement repose sur la possibilité de développer π_n en fonction des valeurs propres de la matrice de transition P sous certaines hypothèses et en supposant que l'espace d'état est fini. On peut ensuite estimer ces valeurs propres

avec différentes approches, comme celle de Garren and Smith (1995) ou celle de Raftery and Lewis (1992), pour connaître le comportement de π_n autour de π au premier ordre. Ces deux méthodes présentent deux inconvénients majeurs : d'une part elles sont limitées aux chaînes à espace d'état fini et d'autre part les conditions nécessaires pour obtenir un développement de π_n sont très difficiles à obtenir en pratique.

Une autre idée a été proposée par Ycart (1999) et est basée sur le phénomène de 'cutoff' précédemment évoqué. Un des exemples les plus connus de ce phénomène est celui de la marche aléatoire sur un hypercube de dimension p . En notant π_n la loi après n itérations d'une chaîne démarrant d'un point initial de coordonnées toutes égales et π sa distribution stationnaire, la distance $\|\pi_n - \pi\|$ reste proche de 1 pendant un certain temps, puis diminue brutalement vers une valeur inférieure et converge exponentiellement vers 0 après. Le temps auquel cette chute se produit est dans cet exemple égal à $\frac{1}{4}p \log p$ et est appelé temps de 'cutoff' (Diaconis 1996). Ycart (1999) montre qu'un tel phénomène se produit aussi pour les échantillons d'une chaîne de Markov en considérant plusieurs chaînes lancées en parallèle. Il démontre ensuite que la chaîne transverse atteint sa loi stationnaire à un temps de 'cutoff' égal à $\frac{\log p}{2 \log(1/\alpha)}$ où α est la valeur propre de P la plus proche en valeur absolue de 1. Ce temps lui permet alors de proposer un algorithme muni d'un test d'arrêt pour produire un échantillon de la loi stationnaire de la chaîne initiale \mathbf{X} . Bien qu'extrêmement attrayante, cette méthode est malheureusement limitée aux chaînes à espace d'état fini et n'a pas, à notre connaissance, encore été étendue dans un cadre général.

Résumé

Parmi toutes les méthodes que nous venons de présenter, aucune n'est de manière flagrante et générale plus efficace que les autres. Habituellement, il est conseillé, pour traiter un problème pratique, de combiner plusieurs de ces méthodes pour disposer de divers diagnostics basés sur des considérations intrinsèquement différentes et obtenir ainsi une vision large et relativement objective d'une possible convergence. On pourra consulter Cowles and Carlin (1996) et Brooks and Roberts (1998) pour quelques recommandations.

En ce qui concerne notre problème, seul un petit nombre de ces méthodes peuvent s'appliquer, principalement les méthodes d'analyse statistique des sorties. En effet l'espace d'état de notre chaîne est non-dénombrable et les contraintes en terme de temps de calcul sont fortes. Les techniques qui satisfont ces deux critères sont les suivantes :

- le test de Cauty (1995) sur un diagramme quantile-quantile des distributions inter- et intra-chaînes. On effectuera le test sur chacune des marginales de \mathbf{X} ;
- le diagnostic multidimensionnel de Brooks and Gelman (1998) sur le ratio de variances inter- et intra-chaînes ;
- le graphique CUSUM de Yu and Mykland (1998) pour étudier l'aspect lisse du graphe des sommes cumulées en tenant compte de l'indice défini par Brooks (1996). Un graphique sera construit pour chacune des marginales de \mathbf{X} ;

- la distance de Kullback-Leibler de Hjorth and Vadeby (2003) sur chacune des marginales de \mathbf{X} .

Dans la section suivante, nous présentons l'application de l'algorithme de Métropolis au modèle cinétique de l'isomérisation du n -butane, la convergence étant étudiée à l'aide des quatre méthodes que nous venons de mentionner.

3.2.4 Application à l'isomérisation du n -butane

Rappelons que le modèle d'isomérisation du n -butane s'écrit

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i.$$

Rappelons aussi les significations physiques des différentes variables :

- $\mathbf{Y} = (Y^1, Y^2, Y^3)$, Y^1 fraction molaire de nC_4 , Y^2 fraction molaire de iC_4 et Y^3 fraction molaire de C_3 et C_5 (regroupés) ;
- $\mathbf{c} = (T, \text{ppH}, H_2/HC, nC_4_0)$ est le vecteur des conditions opératoires ;
- $\boldsymbol{\theta}_0 = (P_1, \dots, P_8)$ est le vecteur des 8 paramètres inconnus.

On dispose de $n = 63$ mesures expérimentales $(\mathbf{Y}_i, \mathbf{c}_i)_{i=1, \dots, n}$. On applique alors l'algorithme de Métropolis en suivant la procédure décrite en 3.2.1.

Nous lançons tout d'abord 10^5 itérations burn-in. Nous effectuons alors 10^6 itérations supplémentaires avant de stopper l'algorithme. C'est à ce point là que nous testons la convergence de la chaîne.

Regardons tout d'abord le graphe des sommes cumulées de Yu and Mykland (1998) sur les 10^5 dernières itérations. C'est une méthode pour chaîne monodimensionnelle, il faut donc tracer un graphe pour chacun des 8 paramètres. Nous représentons dans la figure 3.1 ce graphe pour le paramètre 1, les autres étant en tout point similaires. Si l'on compare le résultat à la gaussienne de référence comme suggéré par Yu and Mykland (1998) (voir section précédente), la chaîne semble explorer correctement et rapidement l'espace d'état. Cette méthode semble donc indiquer que l'algorithme a convergé.

Si l'on applique maintenant la technique de Brooks (1996) en calculant l'indice permettant de juger l'aspect lisse d'un graphe pour chaque paramètre, on trouve un intervalle à 0.95% égal à $[0.49969; 0.5003]$. Les valeurs de $D_{n_0, n}$ sont données dans le tableau 3.1.

P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8
0.50245	0.48545	0.48315	0.48195	0.49575	0.50275	0.49385	0.49155

TAB. 3.1 – Valeurs de l'indicateur $D_{n_0, n}$ pour les huit paramètres du modèle d'isomérisation du n -butane.

Etant donné qu'aucun paramètre n'a un indice compris dans l'intervalle à 0.95%, ce diagnostic nous indique que l'algorithme n'a pas encore convergé.

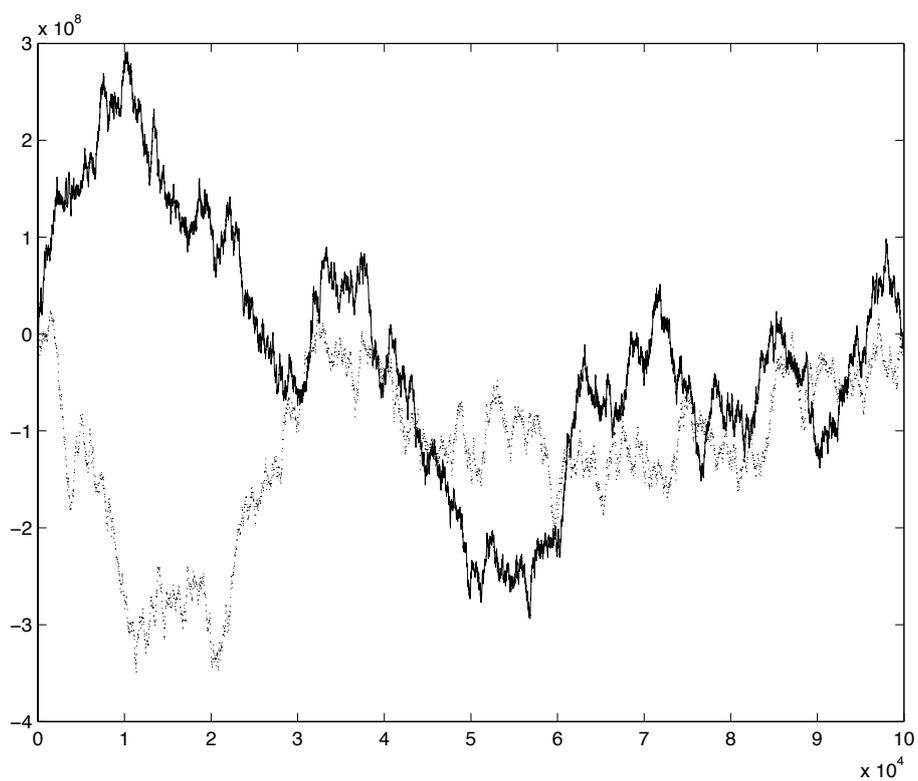


FIG. 3.1 – Graphe des sommes cumulées pour le paramètre P1 du modèle d'isomérisation du n-butane. En trait plein les sommes cumulées sur les réalisations de la chaîne et en trait pointillé les sommes cumulées de la gaussienne de référence.

Si l'on applique la méthode de Hjorth and Vadeby (2003), celle-ci donne les valeurs de KL résumées dans le tableau 3.2 ci-dessous.

P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8
0.0027	0.0031	0.0031	0.0031	0.0028	0.0022	0.0027	0.0021

TAB. 3.2 – Valeurs de l'indicateur KL pour les huit paramètres du modèle d'isomérisation du n-butane.

Toutes ces valeurs sont inférieures au seuil empirique proposé par Hjorth and Vadeby (2003) : cette méthode suggère que chacune des marginales a convergé.

Pour appliquer les méthodes de Canty (1995) et Brooks and Gelman (1998) nous avons lancé $m = 10$ chaînes simultanément. Les deux méthodes indiquent que la chaîne n'a pas encore convergé.

L'analyse des conclusions fournies par ces différents diagnostics montre qu'il n'est pas possible d'affirmer de manière certaine que l'algorithme a convergé après ces 10^6 itérations. Pour pouvoir comparer malgré tout les distributions obtenues par l'algorithme de Métropolis avec celles qui seront obtenues par la suite avec d'autres méthodes (voir par exemple la figure 3.3), nous montrons ces distributions pour chacun des 8 paramètres. Elles sont comparées à une loi normale sous la forme de droites de Henry dans la figure 3.2. En théorie il faudrait lancer des itérations supplémentaires en attendant d'atteindre une conclusion plus nette de ces diagnostics. Cependant, obtenir 10^6 itérations est déjà très coûteux en temps CPU (de l'ordre de plusieurs semaines), il est donc illusoire d'essayer de lancer des calculs supplémentaires sur ce modèle. C'est la raison pour laquelle nous avons envisagé d'autres méthodes pour obtenir la loi jointe des paramètres que nous détaillons dans la suite de ce chapitre.

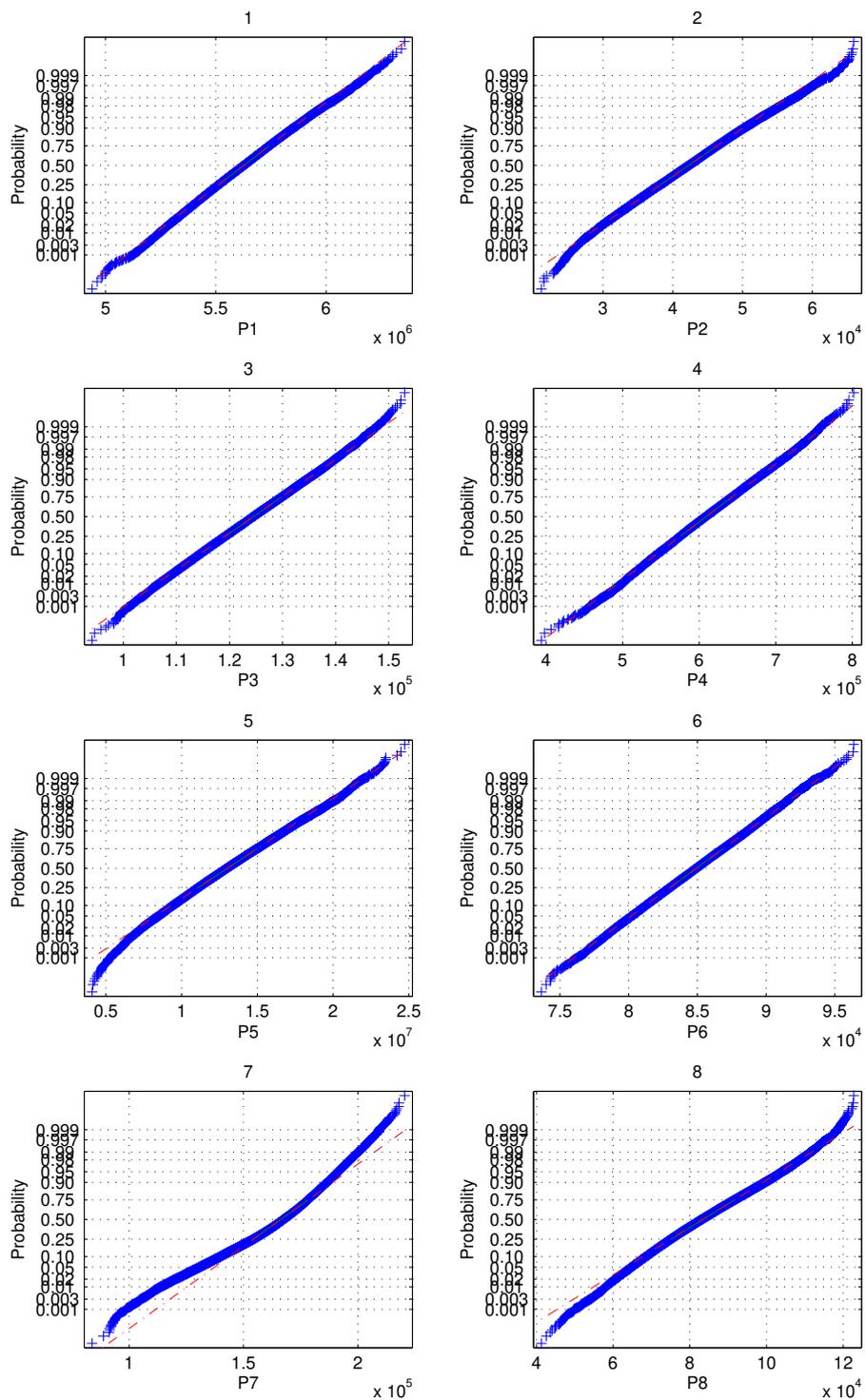


FIG. 3.2 – Droites de Henry des distributions des paramètres P1 à P8 du modèle d'isomérisation du n-butane approchées par algorithme de Metropolis.

3.3 Le bootstrap

3.3.1 Principe

La technique du bootstrap a été introduite par Efron en 1979 (Efron 1979) comme une méthode alternative pour l'estimation du biais et de la variance d'un estimateur ainsi que pour la construction de régions de confiance pour diverses statistiques bâties à partir de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées. Si certains des résultats ont été étendus aux cas non i.i.d. (modèles ARMA (Härdle, Horowitz and Kreiss 2003), *block bootstrap* (Lahiri 2003), *sieve bootstrap* (Bühlmann 1997), ou encore le bootstrap autorégressif non-paramétrique (Franke, Kreiss and Mammen 2002)), nous nous intéresserons uniquement ici au cas simple de variables indépendantes et identiquement distribuées. Cette méthode consiste à approcher la distribution d'une fonction statistique bâtie sur des observations.

Supposons par exemple que l'on dispose d'un échantillon i.i.d. (X_1, \dots, X_n) de distribution F et on considère $\hat{\theta}_n$ un estimateur d'un paramètre θ_0 de la distribution F . On s'intéresse à la distribution de la variable aléatoire $\hat{\theta}_n - \theta_0$ sous F . Cette loi est une fonction de la loi des observations F . L'idée du bootstrap est de construire un estimateur de $\hat{\theta}_n - \theta_0$ en remplaçant simplement F par un estimateur \hat{F} . Comme on a calculé $\hat{\theta}_n$ à partir d'observations générées selon F , on calcule alors $\hat{\theta}_n^*$ de la même manière mais à partir d'observations générées selon \hat{F} . On s'attend à ce que la distribution de $\hat{\theta}_n^* - \hat{\theta}_n$ sous \hat{F} approche la distribution de $\hat{\theta}_n - \theta_0$ sous F , à condition que \hat{F} approche F . On s'intéressera à la consistance de l'estimateur bootstrap un peu plus loin dans cette section.

Intéressons-nous pour le moment au choix de l'estimateur \hat{F} de la distribution F . Les deux choix les plus classiques sont :

- La distribution empirique des observations (X_1, \dots, X_n)

$$\hat{F}(x) = \hat{F}_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}(X_i \leq x)$$

soit $\hat{F} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{X_i}$. C'est le *bootstrap empirique* ;

- Un estimateur paramétrique de la distribution F . Si l'on suppose que la distribution F appartient à une famille paramétrique F_{γ_0} (où γ_0 est le paramètre de la loi), on peut estimer γ_0 par un estimateur $\hat{\gamma}_n$ consistant et on prend alors

$$\hat{F} = F_{\hat{\gamma}_n},$$

c'est le *bootstrap paramétrique*.

D'autres choix sont possibles, nous renvoyons le lecteur à Horowitz (1997) pour quelques exemples. Si le bootstrap paramétrique fournit une meilleure approximation que le bootstrap empirique lorsque l'on est assuré que F appartient à une famille paramétrique (car $F_{\hat{\gamma}_n}$

est plus proche de F que \hat{F}_n), ce n'est plus le cas si l'on n'a aucune connaissance *a priori* sur F (auquel cas l'hypothèse d'appartenance à une famille paramétrique peut donner de mauvais résultats si on choisit cette famille très éloignée de F).

Intéressons nous maintenant à la consistance de l'estimateur bootstrap que nous commençons par définir. De manière simplifiée, l'estimateur bootstrap est consistant s'il converge vers la distribution limite de $\hat{\theta}_n - \theta_0$ au sens suivant :

Définition 3.3 (Consistance de l'estimateur bootstrap). *Soit (X_1, \dots, X_n) un échantillon i.i.d. de taille n issu d'une distribution F , $\hat{\theta}_n$ un estimateur d'un paramètre θ_0 fonction de F et soit \hat{F} un estimateur de la distribution F . En notant $\hat{\theta}_n^*$ l'estimateur de θ_0 selon \hat{F} , on dit que l'estimateur bootstrap $\hat{\theta}_n^* - \hat{\theta}_n$ est consistant si et seulement si pour tout $\epsilon > 0$*

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} P_n \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} |P_n(\hat{\theta}_n^* - \hat{\theta}_n \leq x) - P_\infty(\hat{\theta}_n - \theta_0 \leq x)| > \epsilon \right) = 0$$

où P_n est la probabilité sous \hat{F} et $P_\infty(\hat{\theta}_n - \theta_0 \leq x)$ est la distribution limite de $\hat{\theta}_n - \theta_0$.

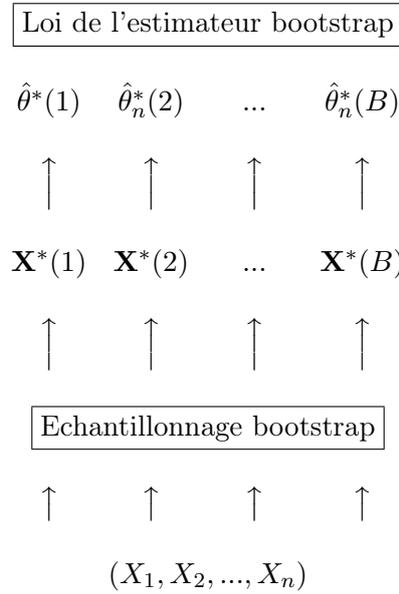
Un théorème dû à Mammen (1992) donne des conditions nécessaires et suffisantes pour que l'estimateur bootstrap soit consistant dans le cas où la distribution à estimer est une fonctionnelle linéaire de F . Nous ne donnons pas ici ce théorème, mais seulement sa conséquence la plus utile : l'estimateur bootstrap de la moyenne est consistant si $\mathbb{E}(X^2) < +\infty$. Par Delta méthode (voir par exemple Van Der Vaart (1998)) et sous certaines hypothèses de régularité, on montre que les estimateurs bootstrap de la variance et des quantiles sont consistants. Remarquons que l'on peut également montrer que l'estimateur bootstrap de la moyenne quand F est une distribution de Cauchy ou l'estimateur du maximum d'un échantillon ne satisfont pas les hypothèses. Il est néanmoins possible de généraliser le bootstrap pour traiter ce genre de cas, notamment le *wild bootstrap* (Stute, Gonzalez Manteiga and Presedo Quindimil 1998) ou le *bootstrap généralisé* (Mason and Newton 1992).

Enfin, on peut aussi utiliser les mêmes arguments pour montrer que l'estimateur bootstrap des moindres carrés ordinaires et du maximum de vraisemblance sont aussi consistants. Ces estimateurs sont ceux qui nous intéressent ici.

A titre d'illustration, approchons F par la distribution empirique \hat{F}_n , c'est-à-dire que l'on effectue un tirage avec remise dans l'échantillon initial (X_1, \dots, X_n) (on choisit au hasard un élément dans l'échantillon, puis un autre et ainsi de suite, sachant que l'on a le droit de tirer plusieurs fois le même élément). On obtient un échantillon de l'estimateur bootstrap par Monte-Carlo de la manière suivante :

- On génère un échantillon $\mathbf{X}^* = (X_1^*, \dots, X_n^*)$ en échantillonnant selon \hat{F} . Ici cela revient à choisir avec remise dans l'échantillon (X_1, \dots, X_n) ;
- On calcule $\hat{\theta}_n^*$ à partir de \mathbf{X}^* .

On répète cette opérations B fois pour avoir un échantillon $(\hat{\theta}_n^*(1), \dots, \hat{\theta}_n^*(B))$ de l'estimateur bootstrap (voir tableau 3.3). Notons que n doit être suffisamment grand pour que \hat{F}_n soit proche de F . De plus, on choisit en général $B = n$.



TAB. 3.3 – Principe du bootstrap.

3.3.2 Un exemple : bootstrap des résidus pour le modèle linéaire

Nous proposons dans cette section de décrire en détail la procédure bootstrap pour le modèle linéaire par souci de pédagogie. La démarche présentée sur ce modèle élémentaire sera par la suite étendue aux estimateurs du maximum de vraisemblance. Le modèle linéaire est noté :

$$Y = X\beta + u$$

où Y est un vecteur $n \times 1$, X une matrice $n \times p$, β le vecteur des coefficients à estimer $p \times 1$ et u le vecteur des erreurs aléatoires $n \times 1$. On note X_i un rang d'observations i ($i = 1 \dots n$) de la matrice X , correspondant à une ligne. Les paramètres estimés par la méthode des moindres carrés ordinaires (MCO) $\hat{\beta}$ et les résidus \hat{u} sont donnés par :

$$\hat{\beta} = ({}^t X X)^{-1} {}^t X Y$$

et

$$\hat{u} = Y - X\hat{\beta}$$

Le modèle théorique bootstrap est le suivant :

$$Y^* = X\hat{\beta} + u^*$$

où $\hat{\beta}$ est l'estimateur MCO et u^* est un terme aléatoire issu des résidus \hat{u} de la régression initiale, dont nous décrivons la construction ci-dessous.

L'application de la procédure bootstrap consiste à répéter B fois les étapes suivantes :

- à chaque itération b ($b = 1 \dots B$), on ré-échantillonne les résidus $\hat{u} = (\hat{u}_i)_{i=1 \dots n}$ pour obtenir un échantillon bootstrap des résidus $\hat{u}^* = (u_i^*)_{i=1 \dots n}$;

- on constitue alors un échantillon $Y^* = (Y_i^*)_{i=1 \dots n}$:

$$Y_i^*(b) = \hat{Y}_i + u_i^*(b)$$

- la procédure d'estimation par MCO est appliquée sur le modèle linéaire afin d'obtenir l'estimateur bootstrap. Pour le b -ième échantillon, ce dernier s'écrit :

$$\hat{\beta}^*(b) = ({}^t X X)^{-1} {}^t X Y^*(b)$$

Ces étapes sont répétées B fois ($b = 1 \dots B$).

3.3.3 Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance

Plaçons-nous dans le cadre d'un modèle régression non-linéaire comme présenté en (3.1)

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

où l'on estime le vecteur des paramètres inconnus $\boldsymbol{\theta}_0$ par l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})).$$

Le résultat de cette minimisation à partir de n données expérimentales nous donne une valeur notée $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$. De manière formelle, on peut écrire que

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n = \psi(\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_n)$$

où les \mathbf{Y}_i sont des vecteurs aléatoires indépendants distribués comme $\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$. Si l'on connaissait la vraie valeur du paramètre $\boldsymbol{\theta}_0$ et la vraie loi des erreurs $\boldsymbol{\epsilon}_i$, on pourrait générer de nouvelles réalisations des \mathbf{Y}_i à partir desquelles on pourrait calculer de nouvelles réalisations du vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$, nous donnant ainsi accès à un échantillon de sa loi. Cependant $\boldsymbol{\theta}_0$ et la loi des $\boldsymbol{\epsilon}_i$ sont inconnus. L'idée du bootstrap est de les remplacer par des approximations obtenues à l'aide des données $(\mathbf{c}_i, \mathbf{Y}_i)_{i=1, \dots, n}$. Tout d'abord, $\boldsymbol{\theta}_0$ est remplacé naturellement par $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$. Deux choix s'offrent ensuite à nous pour estimer la loi des erreurs $\boldsymbol{\epsilon}_i$. La première possibilité, qui conduit au bootstrap empirique, est d'approcher la loi des erreurs par la distribution empirique des résidus

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_i = \mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) \quad i = 1, \dots, n.$$

La seconde possibilité, qui est celle que nous avons utilisée, est d'approcher la loi des erreurs par une loi gaussienne dont les paramètres sont estimés à partir des résidus $\widehat{\epsilon}_i$: c'est le bootstrap paramétrique. Notons de manière générique ν_i les variables distribuées selon l'une ou l'autre de ces deux lois. Les nouvelles données bootstrap sont alors générées selon le modèle

$$\mathbf{Y}_i^* = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \nu_i$$

et l'estimateur bootstrap de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n$ est de manière formelle

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \psi(\mathbf{Y}_1^*, \dots, \mathbf{Y}_n^*)$$

soit encore

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_i^* - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})) \boldsymbol{\Sigma}^{-1t} (\mathbf{Y}_i^* - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})) \\ &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \nu_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ &\quad {}^t \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \nu_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right). \end{aligned} \quad (3.2)$$

En pratique, on génère donc plusieurs réalisations des ν_i à partir desquelles on calcule les réalisations correspondantes de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$. En collectant ces réalisations, on obtient un échantillon de la loi de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ qui approche celle de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n$ puisque le bootstrap est consistant pour le maximum de vraisemblance.

3.3.4 Application à l'isomérisation du n-butane

Le premier modèle d'erreur (noté (0)) que nous avons supposé pour les produits de l'isomérisation du n-butane est de la forme

$$\mathbf{Y}_i^{(0)} = \mathbf{f}^{(0)}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \epsilon_i.$$

Pour justifier une procédure bootstrap sur l'estimateur du maximum de vraisemblance de ce modèle, il est nécessaire de faire une étude des résidus de ce modèle pour vérifier par exemple si les résidus ϵ sont gaussiens. A partir des $n = 63$ données expérimentales $(\mathbf{c}_i, \mathbf{Y}_i^{(0)})$ dont nous disposons on fait une estimation comme dans la section 3.1 que l'on note $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$. On calcule ensuite les résidus

$$\widehat{\epsilon}_i^{(0)} = \mathbf{Y}_i^{(0)} - \mathbf{f}^{(0)}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) \quad i = 1, \dots, n$$

et une étude classique analyse chaque sortie séparément en s'intéressant d'une part à la normalité des résidus et d'autre part à leur répartition pour vérifier l'homoscédasticité. Cette étude fait apparaître de manière flagrante que les résidus sont hétéroscedastiques. Si cette constatation invalide notre modèle initial, elle a une conséquence encore plus problématique dans le cas où l'on voudrait utiliser le bootstrap empirique sur ce modèle : d'une part les erreurs ne sont pas i.i.d. et d'autre part la probabilité d'attribuer des résidus de valeur élevée sur des données de valeur faible est grande. Par conséquent on a de grandes

chances de générer de nouvelles données expérimentales négatives, ce qui est incorrect d'un point de vue physique car, rappelons-le, les sorties $\mathbf{Y}_i^{(0)}$ sont des concentrations d'espèces chimiques et sont donc positives.

Nous avons alors proposé le modèle suivant

$$\log(\mathbf{Y}_i^{(0)}) = \log(\mathbf{f}^{(0)}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0)) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

où l'on note $\log(\mathbf{u})$ le vecteur composé du logarithme des composante du vecteur \mathbf{u} , ce qui conduit au modèle de régression non-linéaire

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

où $\mathbf{Y}_i = \log(\mathbf{Y}_i^{(0)})$ et $\mathbf{f} = \log(\mathbf{f}^{(0)})$. Une analyse des résidus montre cette fois que les résidus sont approximativement gaussien et homoscedastique, ce qui nous permet d'utiliser le modèle théorique bootstrap associé suivant :

$$\mathbf{Y}_i^* = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\epsilon}_i^*$$

et de lancer le bootstrap avec la formule (3.2). Les résultats de la procédure bootstrap sur les distributions des estimateurs des paramètres pour $B = 10000$ sont présentés dans la figure 3.3, où elles sont comparées à des lois gaussiennes par l'intermédiaire de droites de Henry.

Cette technique donne accès à un échantillon de taille 10000 de la distribution des estimateurs des paramètres du modèle d'isomérisation du n-butane. Une fois l'échantillon obtenu, par Monte-Carlo, on mène une analyse d'incertitudes sur ce modèle. Un exemple est fourni pour la sortie nC4 sous la forme d'un histogramme dans la figure 3.4 pour une condition opératoire particulière.

3.3.5 Limitations de l'approche par bootstrap

Nous venons de voir que la technique du bootstrap permettait d'avoir un échantillon d'une loi qui approche celle de l'estimateur des paramètres cinétiques. Néanmoins, il est important de souligner que cette procédure peut être très coûteuse en temps de calcul. En effet chaque réalisation de l'estimateur bootstrap $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est obtenue par maximum de vraisemblance sur un espace de p paramètres, par exemple pour l'isomérisation du n-butane $p = 8$. Si l'on veut un échantillon de taille $B = 10000$, cela correspond donc à 10000 optimisations. Pour donner une idée du temps de calcul engendré par une telle procédure, notons qu'un échantillon de taille 10000 pour l'isomérisation du n-butane requiert plusieurs jours de temps CPU (à cause du coût de l'optimisation numérique pour calculer le maximum de vraisemblance). S'il est possible d'utiliser des processeurs en parallèle puisqu'une procédure bootstrap est facilement parallélisable, le problème ne peut être réglé entièrement dès que l'on commence à s'intéresser à des modèles cinétiques plus complexes tels que l'isomérisation du n-pentane qui fait intervenir $p = 20$ paramètres cinétiques inconnus.

C'est cette limitation qui a motivé notre recherche d'autres solutions pour essayer de diminuer le coût numérique du bootstrap. L'idée principale que nous proposons est issue d'une

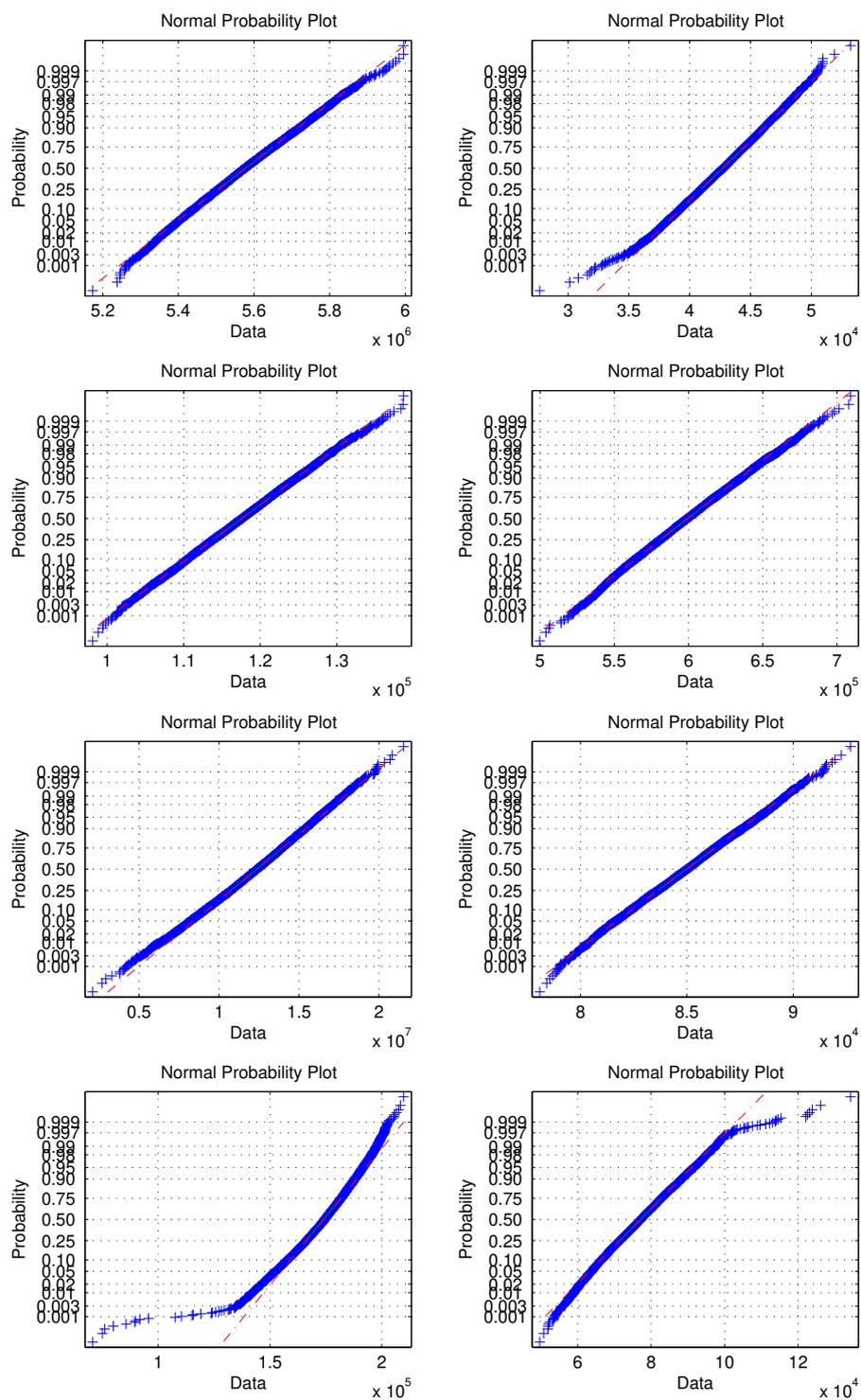


FIG. 3.3 – Droites de Henry des distributions des paramètres P1 à P8 du modèle d'isomérisation du n-butane approchées par bootstrap sur les résidus.

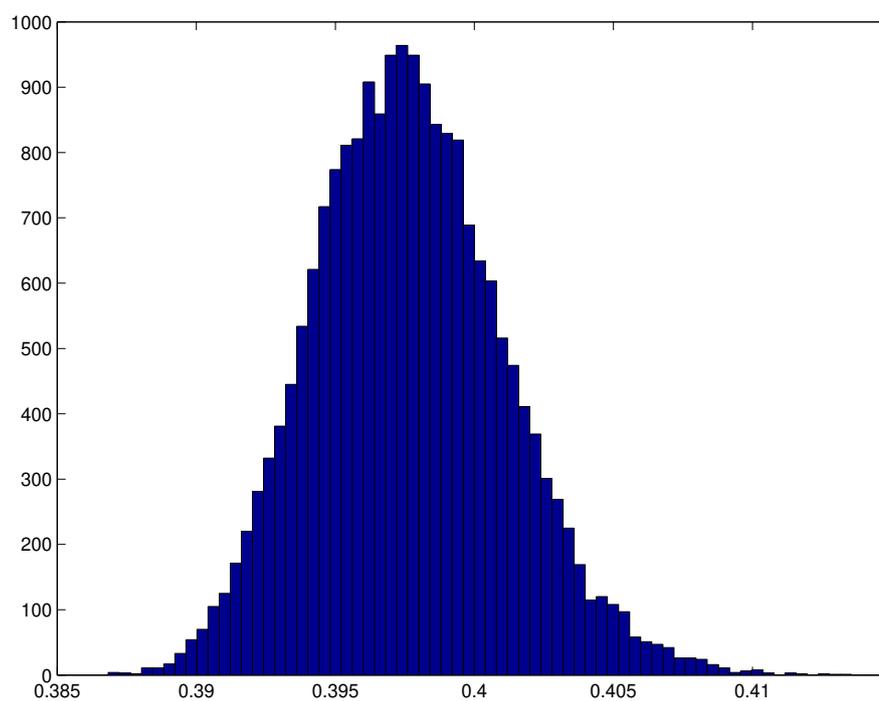


FIG. 3.4 – Incertitudes sur la sortie nC4 du modèle d'isomérisation du n-butane pour une condition opératoire particulière à partir d'un échantillon bootstrap de taille $B = 10000$ de la distribution des estimateurs des paramètres.

remarque naturelle sur la façon d'obtenir une réalisation de l'estimateur bootstrap $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$. En effet la formule (3.2) montre qu'il s'écrit sous la forme

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right).$$

De manière formelle, puisque $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}$ et les \mathbf{c}_i sont fixés, on peut l'écrire sous la forme :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \phi(\boldsymbol{\nu}_1, \dots, \boldsymbol{\nu}_n) \quad (3.3)$$

où pour tout $1 \leq i \leq n$, $\boldsymbol{\nu}_i$ est un vecteur aléatoire de dimension q (nombre de sorties) distribué selon une loi connue, la loi empirique des résidus pour le bootstrap empirique et la loi gaussienne de moyenne et matrice de variance-covariance estimées à partir des résidus pour le bootstrap paramétrique. La fonction ϕ n'est pas connue analytiquement et son évaluation en un point est coûteuse numériquement (comme nous l'avons souligné une évaluation de ϕ correspond à une optimisation dans un espace à p dimensions). Comme dans le cas des approximations par un "métamodèle", la formulation abstraite (3.3) permet d'envisager une approche nouvelle pour le bootstrap : puisqu'évaluer ϕ un grand nombre de fois B n'est pas envisageable, on ne l'évalue qu'en un nombre restreint de points $m \ll B$, ce qui nous fournit des données de la forme $(\boldsymbol{\nu}_1^j, \dots, \boldsymbol{\nu}_n^j, \hat{\boldsymbol{\theta}}_n^{*j})_{j=1, \dots, m}$. A partir de ces m données, on approche la fonction ϕ par une fonction $\hat{\phi}$ dont l'évaluation sera beaucoup plus rapide. Grâce à cette approximation on construit alors un échantillon de taille B grande. En effet, si on génère B nouvelles réalisations des vecteurs $\boldsymbol{\nu}_i$ notées $(\boldsymbol{\nu}_1^b, \dots, \boldsymbol{\nu}_n^b)_{b=1, \dots, B}$ indépendantes de $(\boldsymbol{\nu}_1^j, \dots, \boldsymbol{\nu}_n^j)_{j=1, \dots, m}$, on obtient alors B réalisations

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n^{*b} = \hat{\phi}(\boldsymbol{\nu}_1^b, \dots, \boldsymbol{\nu}_n^b)$$

pour $b = 1, \dots, B$. Si $\hat{\phi}$ est proche de ϕ , la loi de $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est proche de celle de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ et donc de celle de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$.

Il nous reste donc à préciser la méthode à utiliser pour approcher ϕ avec suffisamment de précision. Nous avons étudié deux techniques qui rentrent dans le cadre de la modélisation par surfaces de réponse. La première repose sur le développement de variables aléatoires en polynômes des chaos et est exposée dans la section 3.4. La deuxième utilise les machines à vecteurs de support que nous présentons dans la section 3.5.

3.4 Polynômes de chaos

Dans cette section, nous présentons une approche qui s'est développée au cours de ces dix dernières années en analyse d'incertitudes : les polynômes de chaos. Cette approche est basée sur des résultats théoriques plus anciens, principalement les travaux de Wiener (1938) sur le lien entre processus aléatoires et développements fonctionnels sous forme de polynômes d'Hermite et les travaux de Cameron and Martin (1947) qui construisent une base orthogonale pour des fonctionnelles non linéaires sous forme de fonctionnelles de Fourier-Hermite. En particulier et de manière simplifiée, ces travaux montrent que sous certaines hypothèses toute variable aléatoire de carré intégrable peut s'écrire sous la forme d'un développement en polynômes orthogonaux pour une mesure particulière. En tronquant ce développement à un certain ordre, on obtient alors une approximation de la variable aléatoire considérée.

L'intérêt des polynômes de chaos en analyse d'incertitudes, où rappelons-le on cherche à caractériser la loi d'une variable aléatoire, réside donc clairement dans la possibilité d'avoir accès à ce type d'approximation. Cette technique a été utilisée dans de nombreux domaines suite aux travaux de Ghanem and Spanos (1991) sur les éléments finis stochastiques ; pour plusieurs exemples et références on pourra consulter Debusschere, Najm, Knio, Ghanem and Le Maître (2004). D'autre part, trois thèses (Tatang (1995), Isukapalli (1999) et Boutahar (2004)) ont abordé le problème du traitement des incertitudes dans les systèmes chimiques, et en particulier l'utilisation de polynômes de chaos.

Dans un premier temps nous détaillons donc le principe et les résultats théoriques concernant la représentation des variables aléatoires en polynômes de chaos. La deuxième partie traite d'un des aspects essentiels dans l'écriture d'un tel développement en polynômes, à savoir l'estimation des coefficients du développement. Enfin nous précisons le lien entre une telle approche et notre objectif de détermination de la loi des paramètres d'un modèle cinétique estimés par moindres carrés, lien que nous ferons à travers l'exemple plus général de détermination de la loi d'un estimateur du maximum de vraisemblance dans un cadre non asymptotique.

3.4.1 Chaos homogène et chaos polynomial

Par souci de clarté, nous utiliserons la présentation proposée par Ghanem and Spanos (1991) pour les définitions et les premières propriétés des polynômes de chaos. Nous nous plaçons sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Notons Θ l'espace des fonctions mesurables de Ω dans \mathbb{R} , $\mathbb{L}^2(\Omega) \subset \Theta$ le sous-ensemble des fonctions mesurables de carré intégrable et $\langle \cdot, \cdot \rangle_g$ le produit scalaire par rapport à la mesure gaussienne.

Définition 3.4 (Chaos homogène, Chaos polynomial). *Soit $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, \infty}$ un ensemble de variables aléatoires gaussiennes centrées réduites indépendantes sur l'espace $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Soient \mathcal{S}_p l'espace des polynômes en $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, \infty}$ de degré au plus égal à p , Γ_p l'ensemble des polynômes de \mathcal{S}_p orthogonaux à \mathcal{S}_{p-1} pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_g$ et soit $\mathcal{S}(\Gamma_p)$ l'espace fermé engendré par Γ_p . Le sous-espace $\mathcal{S}(\Gamma_p)$ de $\mathbb{L}^2(\Omega)$ est alors appelé p -ième chaos homogène et Γ_p est appelé chaos polynomial d'ordre p :*

$$\mathbb{L}^2(\Omega) = \bigoplus_{i=0}^{\infty} \mathcal{S}(\Gamma_i).$$

D'après cette définition, le chaos polynomial d'ordre p est constitué simplement de tous les polynômes orthogonaux d'ordre p faisant intervenir n'importe quelle combinaison des variables aléatoires $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,\infty}$.

Toute variable aléatoire de carré intégrable $X \in \mathbb{L}^2(\Omega)$ admet une représentation en polynômes de chaos sous la forme la plus générale

$$X = \sum_{p \geq 0} \sum_{n_1 + \dots + n_r = p} \sum_{\rho_1, \dots, \rho_r} a_{\rho_1 \dots \rho_r}^{n_1 \dots n_r} \Gamma_p^{n_1 \dots n_r}(\xi_{\rho_1}, \dots, \xi_{\rho_r}) \quad (3.4)$$

où $\Gamma_p^{n_1 \dots n_r}(\xi_{\rho_1}, \dots, \xi_{\rho_r}) \in \Gamma_p$ est le polynôme d'ordre p de r variables aléatoires distinctes de l'ensemble $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,\infty}$, où la k -ième variable aléatoire ξ_{ρ_k} a pour multiplicité n_k , et tel que le nombre de variables aléatoires considérées est égal à l'ordre p du polynôme. Pour raisons de symétrie (Ghanem and Spanos 1991) cette expression peut se simplifier :

$$\begin{aligned} X &= a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} a_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1}) \\ &+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} a_{i_1 i_2} \Gamma_2(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}) \\ &+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} a_{i_1 i_2 i_3} \Gamma_3(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \xi_{i_3}) \\ &+ \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} \sum_{i_4=1}^{i_3} a_{i_1 i_2 i_3 i_4} \Gamma_4(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \xi_{i_3}, \xi_{i_4}) + \dots \end{aligned} \quad (3.5)$$

où par abus de notation $\Gamma_p(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_p}) \in \Gamma_p$ est le polynôme d'ordre p de p variables (pas forcément distinctes). En effet une telle représentation est possible car un développement en chaos polynomiaux est convergent au sens de la moyenne quadratique dans $\mathbb{L}^2(\Omega)$:

Théorème 3.5. *Soit $X \in \mathbb{L}^2(\Omega)$ une variable aléatoire réelle de carré intégrable. Soit $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,\infty}$ un ensemble infini de variables aléatoires gaussiennes centrées réduites indépendantes et soit Γ_p le chaos polynomial défini en 3.4. Alors la représentation de X en fonction des chaos polynomiaux est convergente en moyenne quadratique :*

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left(a_0 \Gamma_0 + \dots + \sum_{i_1=1}^{\infty} \dots \sum_{i_p=1}^{i_{p-1}} a_{i_1 \dots i_p} \Gamma_p(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_p}) - X \right)^2 = 0$$

Preuve. Voir Cameron and Martin (1947) □

Remarque 3.6. On pourra trouver parfois une écriture compacte de (3.5) sous la forme

$$X = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \Psi_j(\xi)$$

où l'on construit une correspondance entre les fonctionnelles $\Psi(\cdot)$ et $\Gamma(\cdot)$ et entre les coefficients α_j et $a_{i_1 \dots i_r}$ apparaissant dans l'équation (3.5).

3.4.2 Les chaos polynomiaux en pratique

D'après la définition ci-dessus, chaque chaos polynomial est une fonction de l'ensemble infini $\{\xi_i\}$ et est donc un polynôme de dimension infinie. Or les polynômes de dimension infinie ne sont pas utilisables en pratique, ce qui nous amène à considérer des chaos polynomiaux de dimension finie. Ces derniers sont obtenus de manière simple : le chaos polynomial d'ordre p de dimension N est le sous-espace engendré par les éléments du chaos polynomial d'ordre p qui ne sont fonction que de N variables aléatoires ξ_i . Lorsque N tend vers l'infini on retrouve les chaos polynomiaux initialement définis. Par exemple, si l'on considère seulement deux variables aléatoires ξ_1 et ξ_2 , l'équation (3.5) s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{X} = & a_0 + a_1\Gamma_1(\xi_1) + a_2\Gamma_1(\xi_2) \\ & + a_{11}\Gamma_2(\xi_1, \xi_1) + a_{12}\Gamma_2(\xi_2, \xi_1) + a_{22}\Gamma_2(\xi_2, \xi_2) \\ & + a_{111}\Gamma_3(\xi_1, \xi_1, \xi_1) + a_{211}\Gamma_3(\xi_2, \xi_1, \xi_1) + a_{221}\Gamma_3(\xi_2, \xi_2, \xi_1) \\ & + a_{222}\Gamma_3(\xi_2, \xi_2, \xi_2) + \dots \end{aligned}$$

On tronque également le développement à un ordre p pour ne pas avoir un développement contenant une infinité de termes. Par exemple, le développement en polynômes de chaos ci-dessus tronqué à l'ordre $p = 2$ donne :

$$\begin{aligned} \tilde{X} = & a_0 + a_1\Gamma_1(\xi_1) + a_2\Gamma_1(\xi_2) \\ & + a_{11}\Gamma_2(\xi_1, \xi_1) + a_{12}\Gamma_2(\xi_2, \xi_1) + a_{22}\Gamma_2(\xi_2, \xi_2) \end{aligned}$$

Habituellement le nombre total de termes dans la série après troncature à N dimensions et à l'ordre p est noté $P + 1$ et l'on a

$$P + 1 = \frac{(N + p)!}{N!p!} \quad (3.6)$$

Un développement en polynômes de chaos fait donc appel à une **double approximation** : une approximation de troncature qui ne considère les chaos polynomiaux que jusqu'à un certain ordre, et une approximation de dimension qui réduit le nombre de variables aléatoires orthogonales dont dépend chaque polynôme. Bien entendu, la convergence en moyenne quadratique est toujours valable, à condition de faire tendre à la fois l'ordre de troncature du développement et la dimension N vers l'infini.

Ghanem and Spanos (1991) proposent une méthode pour générer les polynômes orthogonaux dans un développement en polynôme de chaos, et montrent que les polynôme de chaos pour des variables gaussiennes sont les polynômes d'Hermite multidimensionnels :

$$\Gamma_p(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_p}) = (-1)^p e^{\frac{1}{2}\xi^T \xi} \frac{\partial^p}{\partial \xi_{i_1} \dots \partial \xi_{i_p}} e^{-\frac{1}{2}\xi^T \xi}$$

Par exemple, un développement polynomial tronqué à l'ordre $p = 3$ dépendant de $N = 2$ variables s'écrira

$$\begin{aligned}\tilde{X} = & a_0 + a_1\xi_1 + a_2\xi_2 + a_{11}(\xi_1^2 - 1) + a_{21}\xi_1\xi_2 + a_{22}(\xi_2^2 - 1) \\ & + a_{111}(\xi_1^3 - \xi_1) + a_{211}\xi_2(\xi_1^2 - 1) + a_{221}(\xi_2^2 - 1)\xi_1 + a_{222}(\xi_2^3 - \xi_2)\end{aligned}$$

3.4.3 Généralisation des polynômes de chaos : choix de la base optimale

D'un point de vue numérique, l'utilisation d'un développement en polynômes de chaos n'est intéressante que si un développement faisant intervenir peu de variables aléatoires et tronqué à un ordre petit est suffisant pour bien approcher la variable aléatoire X . En effet la formule (3.6) montre clairement que le nombre de termes dans un développement augmente très rapidement avec l'ordre de troncature p et la dimension N .

Si en pratique le nombre de variables aléatoires N est fixé par le nombre des sources d'incertitudes que l'on propage sur X , l'ordre de troncature est quant à lui relié à la densité de la variable aléatoire que l'on cherche à représenter. On peut donc se demander si une représentation avec une autre famille de polynômes (orthogonaux pour des variables $\{\xi_i\}$ non plus gaussiennes mais de loi différente) ne donnerait pas, à un ordre de troncature donné, une erreur plus faible. Si la variable aléatoire X est gaussienne, la représentation par des polynômes d'Hermite de gaussiennes est optimale puisqu'en tronquant à l'ordre $p = 1$ on obtient une représentation exacte. Mais qu'en est-t-il si X a une densité non gaussienne? Une réponse triviale est que si on construit des polynômes orthogonaux pour cette densité, un développement tronqué à l'ordre $p = 1$ donnera aussi une représentation exacte. Mais en pratique on cherche justement à estimer cette densité, et on ne la connaît donc pas *a priori* pour construire la famille de polynômes orthogonaux qui lui est associée.

En revanche la seule connaissance que l'on a *a priori* concerne la distribution des incertitudes que l'on veut propager sur X , à savoir la densité des $\{\xi_i\}$. Il est donc naturel, et c'est la technique utilisée habituellement, de construire la famille de polynômes orthogonaux pour cette densité. On regroupe dans le tableau 3.4 quelques densités et la famille de polynômes orthogonaux associée. Seules les distributions les plus communes sont listées ici, on pourra consulter Schoutens (2000) pour une présentation plus complète et Abramowitz and Stegun (1964) pour un grand nombre de résultats sur les polynômes orthogonaux. Il est cependant important de noter qu'il n'y a aucune raison pour que la famille que l'on a choisie vis à vis des données d'entrée $\{\xi_i\}$ soit la meilleure vis-à-vis de X . C'est un problème encore ouvert, mais nous avons essayé quelques méthodes originales que nous présentons dans la section 3.4.4.

3.4.4 Application à l'estimation de la distribution des sorties d'un modèle

Principe

Considérons un modèle de type (2.1) :

$$Y = \eta(\mathbf{X})$$

	Distribution sur ξ	Polynômes	Support
VA Discrète	Poisson	Charlier	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Binomiale	Krawtchouk	$\{0, 1, 2, \dots, n\}$
	Binomiale négative	Meixner	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Hypergéométrique	Hahn	$\{0, 1, 2, \dots, n\}$
VA continue	Gaussienne	Hermite	$(-\infty, +\infty)$
	Gamma	Laguerre	$[0, +\infty)$
	Beta	Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Legendre	$[a, b]$

TAB. 3.4 – Distributions et famille de polynômes orthogonaux associée.

où les entrées \mathbf{X} sont incertaines. On suppose de plus qu'il est possible de représenter ces entrées en fonction d'un certain nombre de variables aléatoires 'classiques' indépendantes (uniformes, gaussiennes, gamma, beta, etc) sous la forme

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d) = g(\xi_1, \dots, \xi_s)$$

où $g : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^d$ est une fonction connue et $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, s}$ est un ensemble de s variables aléatoires classiques indépendantes. On peut en toute généralité supposer que l'ensemble $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, s}$ est composé uniquement de gaussiennes centrée réduite, car toutes les variables aléatoires classiques que nous avons citées peuvent s'exprimer sous la forme de gaussiennes centrées réduites. Par exemple, si l'on dispose d'un modèle où trois entrées X_1 , X_2 et X_3 sont incertaines, indépendantes et telles que $X_1 \sim \mathcal{N}(10, 4)$, $X_2 \sim \chi_3^2$ et $X_3 \sim \mathcal{U}(2, 5)$ alors g est une fonction de \mathbb{R}^5 dans \mathbb{R}^3 définie par

$$g(x, y, z, t, u) = (10 + 2x, y^2 + z^2 + t^2, 2 + 3\phi(u))$$

où $\Phi(\cdot)$ est la fonction de répartition d'une gaussienne centrée réduite et l'ensemble $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, 5}$ est composé de gaussiennes indépendantes $\xi_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$ pour $i = 1, \dots, 5$ par exemple. Cette transformation n'est pas toujours possible, cependant dans le cas où les entrées \mathbf{X} sont indépendantes et distribuées selon des lois 'classiques', on peut toujours trouver une fonction g permettant cette représentation, les X_i s'expriment alors directement en fonction des ξ_i . Il est aussi possible d'obtenir une approximation des X_i sous forme de séries des ξ_i , on pourra consulter Devroye (1986) pour de telles expressions d'une grande variété de variables aléatoires. Dans le cas où les entrées sont corrélées, il n'existe pas de procédure systématique. Nous citons seulement deux méthodes qu'il est possible d'utiliser : une technique présentée dans Devroye (1986) pour le cas où les entrées ont des distributions similaires, et la méthode ACE (Brieman and Friedman 1985).

Une fois les entrées incertaines exprimées en fonction de l'ensemble $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, s}$ de gaussiennes centrées réduites indépendantes, on peut alors écrire que

$$Y = \eta'(\xi_1, \dots, \xi_s)$$

où $\eta' : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $\eta' = \eta \circ g$. L'idée est alors de développer la fonction η' en polynômes de chaos fonction des $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,s}$ tronqué à l'ordre p :

$$Y \approx a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} a_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1}) + \dots + \sum_{i_1=1}^{\infty} \dots \sum_{i_p=1}^{i_{p-1}} a_{i_1 \dots i_p} \Gamma_p(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_p})$$

où les polynômes Γ_p sont les polynômes d'Hermite multidimensionnels. Pour obtenir une représentation complète de la sortie Y , trois points restent à examiner :

- Le choix de l'ordre de troncature p ;
- L'estimation des coefficients $a_{i_1 \dots i_p}$ du développement ;
- En lien direct avec le premier point, le choix de la base la plus adaptée au problème.

Ces questions sont abordées dans les paragraphes qui suivent.

Choix de l'ordre de troncature

Il n'existe pas de résultats théoriques utilisables en pratique concernant l'erreur de troncature pour un développement en polynômes de chaos car elle dépend de la vraie loi de la sortie Y que l'on cherche à représenter, et est donc inconnue.

En pratique, une solution est d'augmenter au fur et à mesure l'ordre de troncature et d'étudier l'évolution de la qualité de la représentation à mesure que l'ordre augmente, par exemple avec un critère de type BIC (Schwarz 1978). Cette méthode est coûteuse car elle nécessite d'estimer beaucoup de coefficients, surtout lorsque le nombre s de variables dans les polynômes est grand. Cependant, dans la littérature un constat est régulièrement fait : un ordre de troncature $p = 2$ ou $p = 3$ est en général suffisant pour représenter correctement une variable aléatoire (Isukapalli (1999) et Boutahar (2004) par exemple). Comme on l'a fait remarquer précédemment, cette représentation sera d'autant meilleure que la base est adaptée (le plus possible) au problème.

Dans tous les exemples qui suivent, on se limitera donc à un développement tronqué à l'ordre 2 ou à l'ordre 3.

Estimation des coefficients du développement

Le développement en polynômes de chaos ayant été défini, un point important en pratique est de pouvoir calculer les coefficients a_{i_1, \dots, i_p} . Plusieurs méthodes existent : intrusives et non-intrusives, méthodes de projection, collocation, régression, etc.

Nous nous intéresserons ici uniquement aux méthodes de **régression**. En effet elles ont l'avantage de pouvoir être utilisées sur des modèles où la fonction η est de type 'boîte noire' (contrairement aux méthodes intrusives). Elles sont basées sur une procédure d'échantillonnage :

1. Générer un échantillon $(\xi_{i,j})_{i=1,\dots,s; j=1,\dots,N}$ des variables $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,s}$ de taille N ;

2. Calculer pour chaque réalisation $(\xi_{1,j}, \dots, \xi_{s,j})$ de l'échantillon les valeurs des entrées $(X_{1,j}, \dots, X_{d,j})$ correspondantes ;
3. Evaluer la sortie du modèle $Y_j = \eta(X_{1,j}, \dots, X_{d,j})$ pour chaque réalisation $(X_{1,j}, \dots, X_{d,j})$;
4. Résoudre le problème de régression

$$Y_j = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^p a_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1,j}) + \dots + \sum_{i_1=1}^p \dots \sum_{i_p=1}^{i_p-1} a_{i_1 \dots i_p} \Gamma_p(\xi_{i_1,j}, \dots, \xi_{i_p,j})$$

pour $j = 1, \dots, N$, que l'on peut réécrire sous la forme simplifiée

$$\mathbf{Y} = \Xi \mathbf{A}$$

où $Y = (Y_1, \dots, Y_N)^T$, \mathbf{A} est le vecteur des coefficients a_{i_1, \dots, i_p} à estimer et Ξ est la matrice des régresseurs contenant les N réalisations des polynômes $\Gamma_k(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_k})$ $k = 0, \dots, p$.

Comme dans tout problème régression classique, il est nécessaire d'avoir plus d'observations que de régresseurs, c'est-à-dire $N \geq P + 1$ où $P + 1$ est le nombre de termes dans la décomposition. C'est là que repose le principal défaut des méthodes de régression, car elles nécessitent d'évaluer N fois la fonction η pour obtenir des observations de la sortie Y : cette technique est très coûteuse en temps de calcul si η est une fonction complexe ou/et si le nombre de régresseurs $P + 1$ est important, c'est-à-dire si le nombre s de variables aléatoires ξ_i est grand (puisque l'on a précisé que l'on travaillait à ordre de troncature $p = 2$ ou $p = 3$ fixé).

On peut enfin noter que deux approches différentes sont possibles pour générer l'échantillon initial des $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, s}$:

- L'approche déterministe, c'est-à-dire qu'on choisit à l'avance les points où l'on va évaluer le modèle (ECM : Efficient Collocation Method, voir par exemple Isukapalli (1999)) ;
- L'approche aléatoire, où l'on génère les points suivant la loi des $\{\xi_i\}_{i=1, \dots, s}$.

Dans l'approche déterministe les points où l'on va évaluer le modèle sont les racines du polynôme d'Hermite d'ordre $p + 1$ (voir Isukapalli (1999) ou Boutahar (2004)). Cependant cette approche fournit un nombre de points très supérieur au nombre de coefficients à estimer, il est donc nécessaire d'en choisir un certain nombre parmi eux. Dans ces deux thèses les auteurs les choisissent au hasard sans justification théorique. C'est la raison pour laquelle nous préférons en pratique utiliser l'approche aléatoire. Plus précisément, nous utiliserons une procédure de type hypercube latin.

Choix d'une base dans le cas d'une régression

Nous avons vu dans la section 3.4.3 qu'il est pertinent de rechercher la meilleure base de variables aléatoires possible pour développer la sortie Y . Pour l'instant, nous avons précisé

qu'en toute généralité nous considérons les $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,s}$ gaussiennes centrées réduites (après transformation). Cependant, si l'on est capable d'avoir une idée, même approximative, de la forme de la distribution de Y , il convient d'utiliser une base adaptée. Par exemple, si l'on sait que Y va plutôt être de type Gamma, on opérera des transformations pour avoir une base $\{\xi_i\}_{i=1,\dots,s}$ de lois Gamma.

Malheureusement la loi de Y est inconnue puisque l'on cherche justement à l'estimer. Nous proposons néanmoins une approche originale pour essayer de résoudre ce problème dans le cas où l'on dispose d'un échantillon aléatoire de la sortie Y , ce qui est le cas lorsque l'on estime les coefficients du développement par régression. Cette méthode est décrite seulement à titre indicatif car elle nous paraît prometteuse. Un travail supplémentaire serait nécessaire pour l'améliorer et la valider. On présentera donc ici seulement les idées générales, et leur application dans la section 3.4.6 sur le modèle simplifié d'HDS.

La méthode que nous avons étudiée est une méthode naïve mais qui a donné de bons résultats sur le modèle simplifié d'HDS. Elle est basée sur l'idée qu'à partir de l'échantillon $(Y_j)_{j=1,\dots,n}$ de la sortie, on peut essayer de trouver la distribution qui se rapproche le plus de la distribution empirique de Y , et d'utiliser cette distribution comme base du développement en polynômes de chaos. Imaginons par exemple que l'on considère un ensemble de q distributions classiques notées $F_{\psi_k}^k$ pour $k = 1, \dots, q$ où ψ_k représente le vecteur des paramètres nécessaires à caractériser la k -ième distribution de l'ensemble. On peut par exemple imaginer avoir un ensemble de distributions tel que présenté dans le tableau 3.5.

$F_{\theta_k}^k$	Distribution associée	Paramètres ψ
$F_{\psi_1}^1$	Uniforme sur $[a, b]$	$\psi_1 = (a, b)$
$F_{\psi_2}^2$	Gaussienne $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	$\psi_2 = (\mu, \sigma^2)$
$F_{\psi_3}^3$	Gamma $\Gamma(a, b)$	$\psi_3 = (a, b)$
\vdots	\vdots	\vdots
$F_{\psi_q}^q$	Beta $B(a, b)$	$\psi_q = (a, b)$

TAB. 3.5 – Exemples de distributions et de leurs paramètres associés pour la comparaison avec la fonction de répartition empirique de la sortie d'un modèle.

On va donc chercher la distribution F^* qui se rapproche le plus de la fonction de répartition empirique \hat{F}_N de la sortie Y parmi les distributions $\{F_{\hat{\psi}_k}^k\}$ pour $k = 1, \dots, q$ où $\hat{\psi}_k$ est l'estimateur du maximum de vraisemblance des paramètres de la k -ième distribution estimé à l'aide des observations $(Y_j)_{j=1,\dots,N}$. Nous n'avons pour l'instant utilisé que deux

critères différents de comparaison entre deux distributions, à savoir :

1. Le critère de Kolmogorov

$$F^* = \arg \min_{F \in \{F_{\hat{\psi}_1}^1, \dots, F_{\hat{\psi}_q}^q\}} \sup_{x \in \mathbb{R}} |\hat{F}_N(x) - F(x)|;$$

2. Un critère d'erreur moyenne

$$F^* = \arg \min_{F \in \{F_{\hat{\psi}_1}^1, \dots, F_{\hat{\psi}_q}^q\}} \int_{\mathbb{R}} |\hat{F}_N(x) - F(x)|^2 dx.$$

Une fois la distribution F^* identifiée, on développe la sortie Y en polynômes de chaos sur une base de variables aléatoires de loi F^* pour assurer une erreur de représentation minimale.

Cette technique a été utilisée sur le modèle simplifié d'HDS et semble fonctionner (voir section 3.4.6). D'autres tests supplémentaires pourraient faire l'objet d'un travail ultérieur pour valider notre approche.

3.4.5 Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance

Dans cette partie nous montrons comment les polynômes de chaos peuvent aider à approcher la loi d'un estimateur bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ du maximum de vraisemblance. Plaçons-nous dans le cadre de la section 3.3.3 où l'on considère le modèle

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta_0) + \epsilon_i$$

et où on estime θ_0 par l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\theta}_n = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta)) \Sigma^{-1t} (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta)).$$

L'estimateur bootstrap $\hat{\theta}_n^*$ est alors

$$\hat{\theta}_n^* = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\theta}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta) \right) \Sigma^{-1t} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\theta}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta) \right)$$

où pour tout $1 \leq i \leq n$, $\boldsymbol{\nu}_i$ est un vecteur aléatoire de dimension q distribué selon une loi connue. Ici nous supposons que l'on a utilisé le bootstrap paramétrique, c'est-à-dire que $\boldsymbol{\nu}_i$ suit une gaussienne de moyenne μ et de matrice de variance-covariance Γ diagonale estimées à partir des résidus du modèle. On a vu que la formule (3.2) permet d'exprimer $\hat{\theta}_n^*$ comme une fonction des $\boldsymbol{\nu}_i$:

$$\hat{\theta}_n^* = \phi(\boldsymbol{\nu}_1, \dots, \boldsymbol{\nu}_n)$$

où

$$\phi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\theta}_{\text{obs}}) + \mathbf{u}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta) \right) \Sigma^{-1t} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\theta}_{\text{obs}}) + \mathbf{u}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \theta) \right).$$

Sous cette forme, le vecteur aléatoire $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est une fonction de n vecteurs aléatoires $\boldsymbol{\nu}_i$. En notant $\widehat{\theta}_n^*(j)$ la j -ième composante du vecteur $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ pour $j = 1, \dots, p$ et $\nu_i(k)$ la k -ième composante du vecteur $\boldsymbol{\nu}_i$ pour $k = 1, \dots, q$ on peut écrire que

$$\widehat{\theta}_n^*(j) = \phi_j(\boldsymbol{\nu}_1(1), \dots, \boldsymbol{\nu}_1(q), \dots, \boldsymbol{\nu}_n(1), \dots, \boldsymbol{\nu}_n(q)),$$

c'est-à-dire que chaque composante $\widehat{\theta}_n^*(j)$ de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est une variable aléatoire fonction de nq variables aléatoire $\nu_i(k)$ pour $i = 1, \dots, n$ et $k = 1, \dots, q$. En mettant bout à bout les $\nu_i(k)$ et en les standardisant on forme un vecteur ξ de taille $r = nq$ tel que

$$\widehat{\theta}_n^*(j) = \phi_j(\xi^1, \dots, \xi^r)$$

où les ξ^i sont des gaussiennes indépendantes et centrées réduites pour $i = 1, \dots, r$. Chaque composante $\widehat{\theta}_n^*(j)$ peut alors être approchée par une variable $\tilde{\theta}_n^*(j)$ s'exprimant sous la forme d'un polynôme de chaos tronqué à l'ordre p_j des variables ξ^i :

$$\tilde{\theta}_n^*(j) = a_0^{(j)} \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^r a_{i_1}^{(j)} \Gamma_1(\xi^{i_1}) + \dots + \sum_{i_1=1}^r \dots \sum_{i_{p_j}=1}^{i_{p_j}-1} a_{i_1 \dots i_{p_j}}^{(j)} \Gamma_{p_j}(\xi^{i_1}, \dots, \xi^{i_{p_j}})$$

où les polynômes Γ_p sont les polynômes d'Hermite multidimensionnels. Les coefficients $a_i^{(j)}$ sont ensuite estimés par régression à partir des données $(\boldsymbol{\nu}_1^l, \dots, \boldsymbol{\nu}_n^l, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^{*l})_{l=1, \dots, m}$ que l'on possède (où m est petit).

3.4.6 Application au modèle HDS

Rappelons que les paramètres du modèle simplifié d'HDS dans le cas de pondérations unitaires sont estimés via la relation

$$(\hat{k}, \hat{\alpha}) = \arg \min_{k, \alpha} \sum_{i=1}^{10} (S_i - S_{k, \alpha}(t_i))^2.$$

En notant $\hat{k}_{\text{obs}} = 1.87$ et $\hat{\alpha}_{\text{obs}} = 1.25$ les paramètres optimaux solutions de la minimisation ci-dessus en utilisant les données présentées dans le tableau 1.1, on peut calculer les résidus observés ν_i :

$$\nu_i = S_i - S_{\hat{k}_{\text{obs}}, \hat{\alpha}_{\text{obs}}}(t_i)$$

pour $i = 1, \dots, 10$. On fait l'hypothèse que les erreurs ν_i sont indépendantes et de même loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ où $\mu = -18.3$ et $\sigma = 125.9$ sont estimés à partir des ν_i . On écrit alors

$$(\hat{k}, \hat{\alpha}) = \phi(\xi^1, \dots, \xi^{10})$$

où $\xi^i = (\nu_i - \mu)/\sigma$ pour $i = 1, \dots, 10$. On développe alors chaque composante de la fonction ϕ en polynômes de chaos à l'ordre 2 en fonction des ξ^i . Ce développement fait intervenir $P+1 = \frac{(10+2)!}{10!2!} = 66$ coefficients qui sont estimés par régression. Pour les estimer, on génère

un échantillon $(\xi_j^i)_{i=1,\dots,10; j=1,\dots,N}$ qui contient deux fois plus de points que de coefficients, soit $N = 132$ réalisations des variables $(\xi^i)_{i=1,\dots,10}$ et on calcule les réalisations des sorties

$$(\hat{k}_j, \hat{\alpha}_j) = \arg \min_{k, \alpha} \sum_{i=1}^{10} (S_j^i - S_{k, \alpha}(t_i))^2$$

où $S_j^i = S_{\hat{k}_{\text{obs}}, \hat{\alpha}_{\text{obs}}}(t_i) + \mu + \sigma \xi_j^i$ pour $i = 1, \dots, 10$ et $j = 1, \dots, N$.

Les coefficients estimés sont stockés, et pour visualiser la distribution de la représentation en polynômes de chaos nous générons un nouvel échantillon des $(\xi^i)_{i=1,\dots,10}$ de grande taille (par exemple 10000) et calculons la valeur correspondante du développement. On peut ainsi représenter la distribution approchée de \hat{k} et $\hat{\alpha}$ comme sur la figure 3.5.

On peut de plus représenter une approximation de la région de confiance des paramètres, voir le haut de la figure 3.6.

Si les lois marginales suivies par les paramètres semblent correctes, en revanche la région de confiance n'est pas exactement la même que celle obtenue par calcul théorique, même si elle est similaire. On peut donc supposer que la corrélation entre les paramètres n'a pas été bien approchée par la représentation en polynômes de chaos tronquée à l'ordre 2. Il faudrait donc rajouter un ordre supplémentaire, et par conséquent augmenter la taille des échantillons servant à estimer les coefficients du développement.

Nous avons aussi essayé d'utiliser les techniques de choix de base que nous avons présentées dans la section 3.4.4 pour, en restant à l'ordre $p = 2$, obtenir une représentation plus précise. Par exemple, le paramètre \hat{k} semble suivre une loi log-normale, et le paramètre $\hat{\alpha}$ une loi normale. Nous avons, à partir de l'échantillon $(\hat{k}_j, \hat{\alpha}_j)_{j=1,\dots,N}$, essayé d'identifier par la deuxième méthode de la section 3.4.4 la distribution la plus proche de celle de \hat{k} et $\hat{\alpha}$. Le critère de Kolmogorov a conclu qu'il faut choisir une base log-normale pour \hat{k} et une base normale pour α . De manière équivalente, on va donc choisir une base normale pour $\log(\hat{k})$ et pour $\hat{\alpha}$. Les distributions approchées sont marginalement identiques à celles obtenues précédemment, en revanche la région de confiance est maintenant bien approchée comme le montre la figure 3.6.

3.4.7 Utilisation des dérivées en polynômes de chaos et applications

Dans la section précédente nous avons vu que l'approche par polynômes de chaos permet de bien estimer la loi de l'estimateur bootstrap en utilisant peu d'optimisations bootstrap (dans le modèle HDS par exemple on a seulement besoin de 66 points). Il est cependant possible d'améliorer encore l'approximation si l'on dispose des dérivées secondes du modèle par rapport aux paramètres. En effet rappelons que l'estimateur bootstrap peut s'écrire sous la forme

$$\hat{\theta}_n^* = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r).$$

On supposera ici sans perte de généralité que $\hat{\theta}_n^*$ est de dimension 1. On pourra étendre les résultats facilement à une dimension quelconque puisque dans le cas général chaque composante de $\hat{\theta}_n^*$ est approchée individuellement. Si l'on utilise les polynômes de chaos on approche ϕ par un polynôme des variables ξ^1, \dots, ξ^r que l'on cale sur des données par régression. La précision de cette approximation dépend évidemment du nombre de données

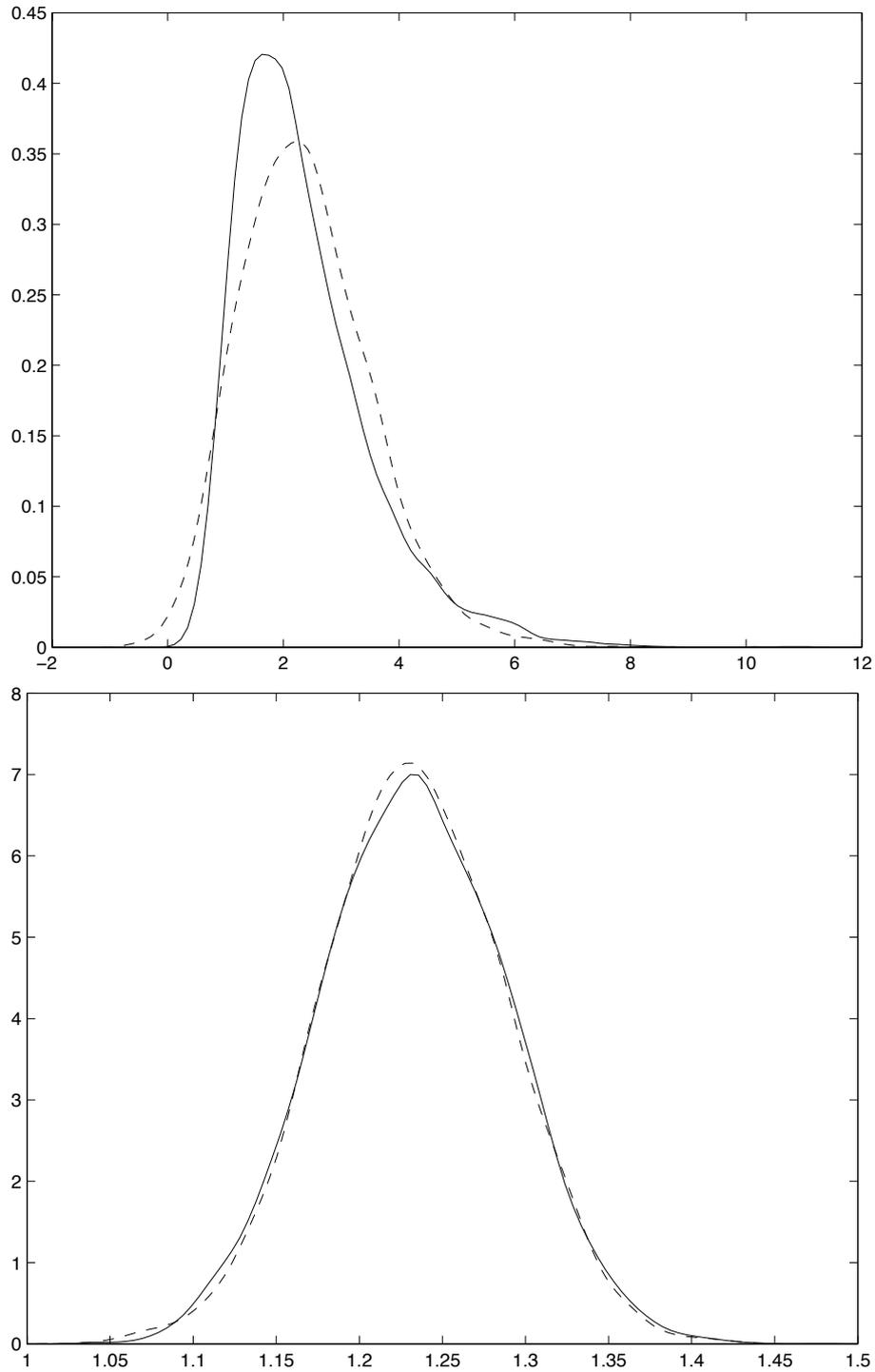


FIG. 3.5 – Distribution approchée de l'estimateur \hat{k} (haut) et de l'estimateur $\hat{\alpha}$ (bas) par un polynôme d'ordre 2. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

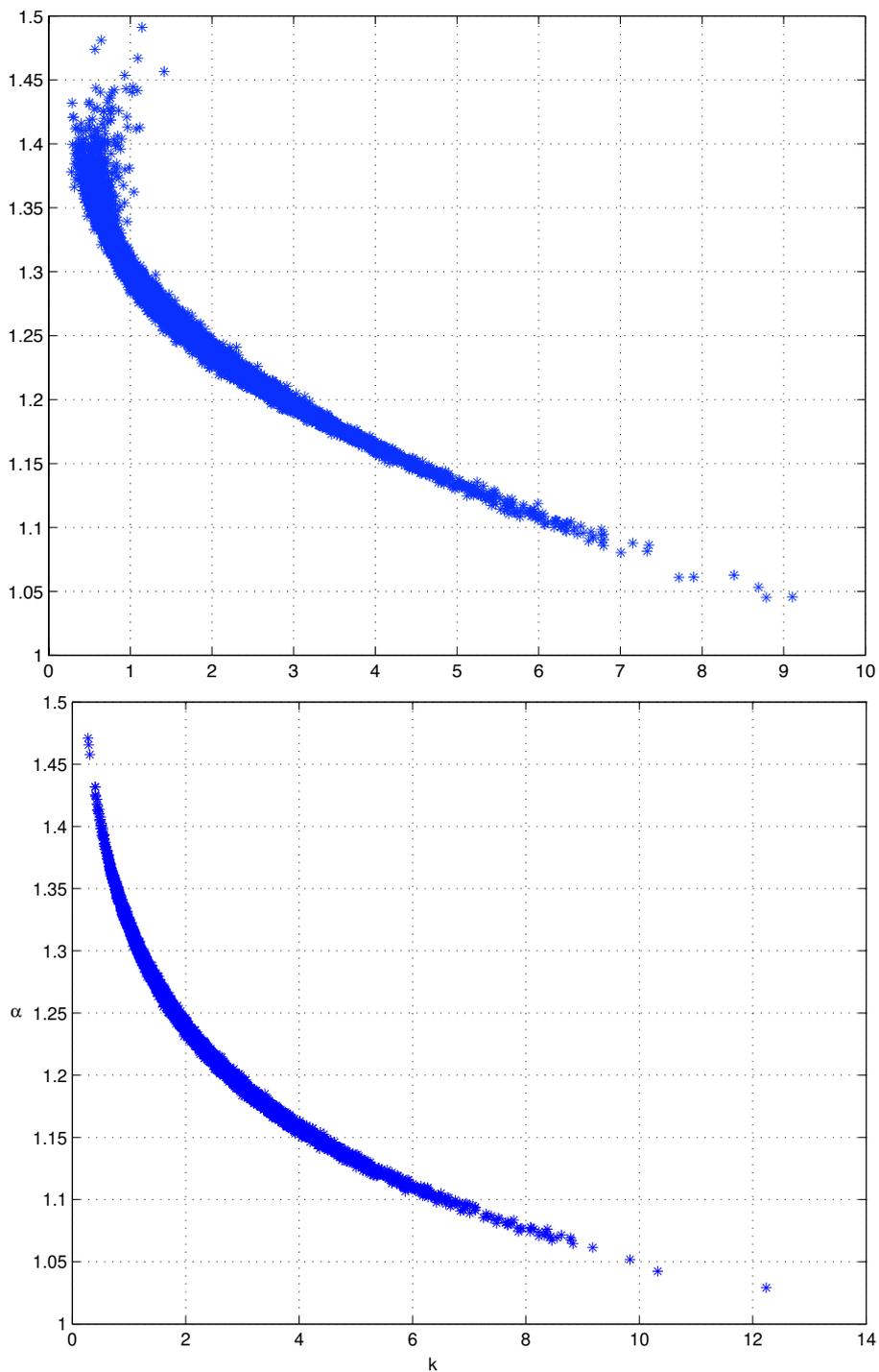


FIG. 3.6 – Région de confiance approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ sur une base de gaussiennes (haut) et sur une base de log-normales et de gaussiennes (bas), développement tronqué à l'ordre 2. Les valeurs de \hat{k} sont en abscisse et celles de $\hat{\alpha}$ en ordonnée.

que l'on utilise dans la régression. Or, si l'on disposait des dérivées exactes de la fonction ϕ par rapport aux variables ξ^1, \dots, ξ^r , on pourrait améliorer cette approximation à nombre de données fixé. En effet soit N le nombre de données disponibles pour caler le polynôme. Si l'on connaît les r dérivées partielles $\partial\phi/\partial\xi_i$, on dispose de leur valeur en ces N données. On possède donc dans ce cas une quantité d'informations pour faire la régression équivalente à celle que l'on aurait avec $(1+r)N$ données (pour un point on connaît la valeur de ϕ en ce point (1) et la valeur des dérivées partielles de ϕ en ce point (r)). Connaître les dérivées de ϕ permet donc de réduire grandement le nombre de données nécessaires pour la régression. Ici l'expression de ϕ est complexe car donnée sous forme d'une minimisation. Cependant le théorème des fonctions implicites permet d'exprimer les dérivées de ϕ en fonction de celle de la fonction \mathbf{f} du modèle. On a

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \\ &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} G(\boldsymbol{\theta}, \xi^1, \dots, \xi^r).\end{aligned}$$

On peut alors écrire que

$$\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\theta}}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*, \xi^1, \dots, \xi^r) = 0.$$

Le théorème des fonctions implicites implique que $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r)$, ce que nous avons déjà remarqué, et d'autre part en dérivant il vient

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\xi}} + \frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}} = 0,$$

soit finalement

$$\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\xi}} = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \right)^{-1} \frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}}.$$

Or G s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{\theta}, \xi^1, \dots, \xi^r) &= \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \frac{1}{\sigma_j^2} \left(f^j(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \nu_{i(j)} - f^j(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \frac{1}{\sigma_j^2} \left(f^j(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \xi_l - f^j(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right)^2\end{aligned}$$

où $l = i, j$, f^j est la j -ième composante de \mathbf{f} et $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_q^2)$. Cette expression de G permet donc d'exprimer directement les matrices $\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2}$ et $\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}}$ en fonction des dérivées premières et secondes de \mathbf{f} par rapport aux paramètres $\boldsymbol{\theta}$. Par conséquent si les dérivées premières et secondes de la fonction \mathbf{f} du modèle par rapport aux paramètres sont connues, les dérivées partielles de la fonction ϕ le sont elles aussi.

La méthode que nous venons d'exposer est générale, il nous reste à détailler son application aux polynômes de chaos. Initialement on approche la fonction ϕ par :

$$\hat{\phi}(\xi^1, \dots, \xi^r) = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^r a_{i_1} \Gamma_1(\xi^{i_1}) + \dots + \sum_{i_1=1}^r \dots \sum_{i_p=1}^{i_p-1} a_{i_1 \dots i_p} \Gamma_p(\xi^{i_1}, \dots, \xi^{i_p}).$$

et les a_i sont estimés par régression à partir de données $(\boldsymbol{\xi}_l, \hat{\boldsymbol{\theta}}_n^{*l})_{l=1, \dots, m}$. Supposons maintenant que l'on connaisse les dérivées $\partial\phi/\partial\xi_j$ pour $j = 1, \dots, r$. Nous pouvons alors écrire que pour $1 \leq j \leq r$:

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi^j}(\xi^1, \dots, \xi^r) = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^r a_{i_1} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \Gamma_1(\xi^{i_1}) + \dots + \sum_{i_1=1}^r \dots \sum_{i_p=1}^{i_p-1} a_{i_1 \dots i_p} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \Gamma_p(\xi^{i_1}, \dots, \xi^{i_p}).$$

Nous ne développons pas toute l'écriture du polynôme jusqu'à l'ordre p par souci de clarté. Les dérivées $\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi^j}$ sont alors calées à l'aide des données $(\boldsymbol{\xi}_l, \frac{\partial \phi}{\partial \xi^j}(\boldsymbol{\xi}_l))_{l=1, \dots, m}$ simultanément avec $\hat{\phi}$.

Donnons enfin les résultats de cette approche sur le modèle HDS puisque dans ce cas, les dérivées du modèle sont connues analytiquement, voir le chapitre 1. Nous choisissons de n'utiliser cette fois que $N = 10$ optimisations bootstrap pour caler le polynôme, contre $N = 132$ précédemment. Comme nous avons $r = 10$ variables ξ_i qui interviennent dans ϕ , un calage avec $N = 10$ points et les $r = 10$ dérivées partielles est équivalent à faire un calage avec $(1+r)N = 110$ points. Nous utilisons comme précédemment un développement à l'ordre 2 pour $\log(\hat{k})$ et $\hat{\alpha}$. Les distributions approchées par cette méthode sont présentées dans la figure 3.7, ainsi que la région de confiance approchée. On remarque que l'approximation est toujours aussi bonne que précédemment, à la différence près que dans ce cas nous n'avons utilisé que $N = 10$ optimisations bootstrap pour caler le polynôme de chaos.

3.4.8 Limitations de l'approche par polynômes de chaos

Nous avons montré dans les paragraphes précédents que l'approche par polynômes de chaos permettait de réduire de manière significative le nombre d'optimisations bootstrap nécessaires pour obtenir un échantillon de la distribution de l'estimateur bootstrap des paramètres d'un modèle cinétique. Cependant, l'approche par polynômes souffre grandement du fléau de la dimension. Dès que le nombre de mesures expérimentales n et le nombre de sorties du modèle q augmentent le nombre de coefficients du polynôme que l'on a à estimer croît d'autant plus, puisque l'on doit caler un polynôme de $r = nq$ variables. C'est la raison pour laquelle nous n'avons présenté les résultats de cette méthode que sur le modèle HDS où l'on a $r = 10$. Dans le cas de l'isomérisation du n-butane, on a $r = 126$ et un polynôme d'ordre 2 contient $\frac{(126+2)!}{126!2!} = 8128$ coefficients à estimer, ce qui est illusoire dans notre cas même en utilisant les dérivées. L'approche par polynômes de chaos est donc à réserver aux seuls modèles qui ont peu de sorties ou pour lesquels on dispose de très peu

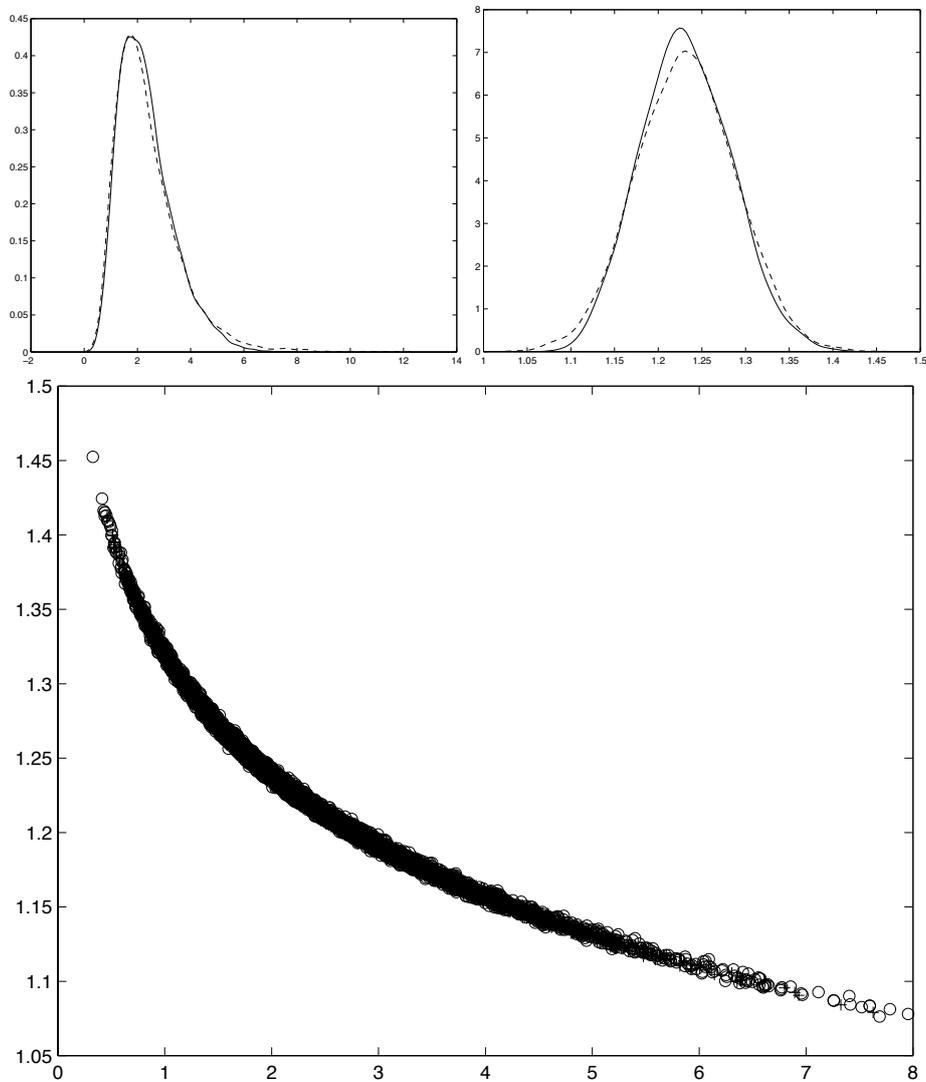


FIG. 3.7 – Distribution approchée des paramètres \hat{k} et \hat{a} par un polynôme d'ordre 2 avec dérivées (haut). En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée. Région de confiance approchée de \hat{k} et \hat{a} sur une base de log-normales et de gaussiennes (bas), développement tronqué à l'ordre 2 avec dérivées. Les croix représentent les réalisations de l'estimateur bootstrap et les ronds celles du développement en polynômes de chaos de l'estimateur bootstrap. Les valeurs de \hat{k} sont en abscisse et celles de \hat{a} en ordonnée.

de mesures expérimentales. Pour les modèles ne rentrant pas dans ce cadre, nous proposons une approche différente basée sur la régression par machines à vecteurs de support que nous présentons dans la section suivante. Notons que cette approche est non-linéaire contrairement aux polynômes de chaos qui constituent une méthode linéaire.

3.5 Support Vector Regression

Les machines à vecteurs de support (*Support Vector Machines* en anglais, ou SVM) reposent sur la théorie de l'apprentissage statistique développée ces trente dernières années (Vapnik 1995). Les trois grandes classes de problèmes posés en apprentissage sont les suivantes : la classification, la régression et l'estimation de densité (Vapnik 1998). Nous nous intéresserons ici uniquement au problème de la régression, dite *Support Vector Regression* et notée SVR dans toute la suite du manuscrit, introduite par Vapnik, Golowich and Smola (1997) et Smola (1998). Dans ce problème, nous sommes dans le cadre de l'apprentissage supervisé, c'est-à-dire que l'on suppose que l'on dispose de données d'apprentissage $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)$ générées indépendamment et selon la même loi inconnue $P(\mathbf{x}, y)$ définie sur $\mathcal{X} \times \mathbb{R}$ où \mathcal{X} est l'espace des entrées, par exemple $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. Nous avons opté ici pour les notations usuelles en apprentissage, c'est-à-dire que l'on notera toutes les variables en minuscules bien qu'elles soient aléatoires.

L'objectif de la régression est classiquement d'estimer la dépendance entre les entrées \mathbf{x} et la sortie y à partir des données $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$ pour pouvoir prédire la sortie y en des valeurs des entrées \mathbf{x} qui n'ont pas encore été observées. Le terme d'*apprentissage* vient du fait que les méthodes proposées vont *apprendre* la structure sous-jacente contenue dans $P(\mathbf{x}, y)$ en s'aidant seulement des données d'apprentissage $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$. Dans un souci de pédagogie nous présentons tout d'abord l'idée originelle de Vapnik de manière simple. Dans un deuxième temps nous soulignerons le lien entre cette approche et les méthodes classiques de régularisation dans les espaces de Hilbert à noyau auto-reproduisant. Quelques méthodes seront ensuite exposées pour aider au choix crucial des paramètres en SVR. Cela nous permettra d'appliquer ces méthodes aux modèles de cinétique chimique. Enfin, nous aborderons le problème posé par la dimension des modèles de cinétique chimique et proposerons une solution basée sur l'utilisation des dérivées en SVR.

3.5.1 Introduction à la Support Vector Regression

Pour présenter le principe de la SVR, nous nous inspirons ici de l'excellent tutorial de Smola and Schölkopf (2004).

Supposons donc que l'on dispose de données d'apprentissage $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$. Dans le cadre de la ϵ -SVR (Vapnik 1995), l'objectif est de trouver une fonction régulière $f(\mathbf{x})$ qui approche les sorties observées y_i avec un écart absolu plus petit que ϵ pour toutes les données d'apprentissage.

Cas linéaire

Commençons tout d'abord par étudier le cas où f est linéaire, c'est-à-dire de la forme

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + b \quad (3.7)$$

où $\mathbf{w} \in \mathcal{X}$, $b \in \mathbb{R}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire sur l'espace euclidien \mathcal{X} . Nous recherchons une fonction régulière, c'est-à-dire telles que ses variations soient contrôlées pour assurer une meilleure qualité de prédiction sur des points non-observés. Une mesure de la régularité (dans un espace de Sobolev par exemple) est donnée par la dérivée de la fonction f , ce qui dans le cas (3.7) revient à contrôler la norme de \mathbf{w} . Rappelons aussi que l'on veut que la fonction fasse au plus une erreur de ϵ sur les données d'apprentissage. On est donc ramené au problème d'optimisation convexe

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{w}, b}{\text{minimiser}} && \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \\ \text{s.c.} &&& \begin{cases} y_i - \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - b \leq \epsilon \\ \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + b - y_i \leq \epsilon \end{cases} \end{aligned}$$

Ce problème d'optimisation peut ne pas avoir de solution, c'est-à-dire qu'il n'existe pas de fonction f linéaire qui puisse approcher toutes les sorties y_i avec un écart maximum de ϵ . Une technique d'optimisation classique pour résoudre ce problème est de relaxer les contraintes en introduisant des variables ressort (ou *slack variables* en anglais) ξ_i et ξ_i^* :

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{w}, b, \xi_i, \xi_i^*}{\text{minimiser}} && \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \\ \text{s.c.} &&& \begin{cases} y_i - \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - b \leq \epsilon + \xi_i \\ \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + b - y_i \leq \epsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.8)$$

La constante C permet d'attribuer plus ou moins d'importance aux déviations supérieures à ϵ vis-à-vis de la régularité de f . Pour résoudre ce problème d'optimisation, il est fréquent d'écrire son problème dual. En introduisant les multiplicateurs de Lagrange α_i , α_i^* , η_i et η_i^* correspondant aux différentes contraintes (variables duales), le lagrangien s'écrit

$$\begin{aligned} L(\mathbf{w}, b, \xi_i, \xi_i^*, \alpha_i, \alpha_i^*, \eta_i, \eta_i^*) &= \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \\ &\quad - \sum_{i=1}^n \alpha_i (\epsilon + \xi_i - y_i + \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle + b) \\ &\quad - \sum_{i=1}^n \alpha_i^* (\epsilon + \xi_i^* + y_i - \langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle - b) \\ &\quad - \sum_{i=1}^n (\eta_i \xi_i + \eta_i^* \xi_i^*) \end{aligned} \quad (3.9)$$

où $\forall i = 1, \dots, n, \alpha_i, \alpha_i^*, \eta_i, \eta_i^* \geq 0$. Les dérivées partielles de L par rapport aux variables primales \mathbf{w}, b, ξ_i et ξ_i^* s'annulent à l'optimum :

$$\partial_b L = \sum_{i=1}^n (\alpha_i^* - \alpha_i) = 0 \quad (3.10)$$

$$\partial_{\mathbf{w}} L = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{x}_i = 0 \quad (3.11)$$

$$\partial_{\xi_i} L = C - \alpha_i - \eta_i = 0 \quad (3.12)$$

$$\partial_{\xi_i^*} L = C - \alpha_i^* - \eta_i^* = 0 \quad (3.13)$$

Les équations (3.12) et (3.13) permettent d'éliminer les variables duales η_i et η_i^* du problème dual. En substituant ensuite (3.10) et (3.11) dans (3.9), le problème d'optimisation sur les seules variables duales α_i et α_i^* s'écrit

$$\begin{aligned} \text{maximiser}_{\alpha_i, \alpha_i^*} \quad & -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle - \epsilon \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i=1}^n y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \\ \text{s.c.} \quad & \begin{cases} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ 0 \leq \alpha_i, \alpha_i^* \leq C \end{cases} \end{aligned}$$

Notons $\hat{\alpha}_i$ et $\hat{\alpha}_i^*$ les solutions de ce problème dual. D'après l'équation (3.11), on a alors

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^n (\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_i^*) \mathbf{x}_i$$

soit

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n (\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_i^*) \langle \mathbf{x}, \mathbf{x}_i \rangle + \hat{b}$$

où \hat{b} est l'optimum en b que l'on peut calculer à l'aide des conditions de Karush-Kuhn-Tucker, voir ci-dessous. Cette formulation de la solution \hat{f} possède plusieurs particularités importantes et qui justifient l'attrait pour la SVR vis-à-vis d'autres méthodes de régression. Tout d'abord, $\hat{\mathbf{w}}$ peut être entièrement décrit par une combinaison *linéaire* des entrées \mathbf{x}_i . Ensuite, le calcul de la solution \hat{f} ne fait pas intervenir le calcul explicite de $\hat{\mathbf{w}}$, ce qui s'avérera particulièrement intéressant pour l'extension au cas non-linéaire que nous présenterons dans le paragraphe suivant. Enfin, un phénomène bien particulier apparaît dans ce problème lorsque l'on écrit les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), voir Karush (1939) et Kuhn and Tucker (1951). En effet celles-ci indiquent que pour la solution optimale, le produit entre les variables duales et les contraintes s'annulent, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_i \left(\epsilon + \hat{\xi}_i - y_i + \langle \hat{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_i \rangle + \hat{b} \right) &= 0 \\ \hat{\alpha}_i^* \left(\epsilon + \hat{\xi}_i^* + y_i - \langle \hat{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_i \rangle - \hat{b} \right) &= 0 \\ (C - \hat{\alpha}_i) \hat{\xi}_i &= 0 \\ (C - \hat{\alpha}_i^*) \hat{\xi}_i^* &= 0 \end{aligned}$$

Les données pour lesquelles $|y_i - \hat{f}(\mathbf{x}_i)| > \epsilon$ sont telles que ξ_i et ξ_i^* sont différents de 0 (une variable ressort est non nulle seulement si la contrainte associée n'est pas respectée). Donc les données à l'intérieur du tube de largeur ϵ autour de \hat{f} vérifient $\hat{\alpha}_i = \hat{\alpha}_i^* = 0$ d'après les deux premières conditions KKT. Ceci implique que l'optimum \hat{f} a une représentation creuse en fonction des données, autrement dit tous les \mathbf{x}_i ne sont pas nécessaires pour décrire \hat{f} . Les données pour lesquelles $(\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_i^*)$ diffère de zéro sont appelées les *vecteurs de support*. Ainsi, la complexité de la représentation d'une fonction par SVR est indépendante de la dimension de l'espace des entrées \mathcal{X} , et dépend seulement du nombre de vecteurs de support.

Extension au cas non-linéaire

Il nous reste maintenant à prolonger la SVR pour prendre en compte une relation non-linéaire entre les entrées et les sorties. L'idée principale proposée initialement en classification (Aizerman, Braverman and Rozonoër (1964) ou Nilsson (1965)) reste la même pour la régression : il s'agit tout simplement d'envoyer les entrées \mathbf{x}_i dans un espace éventuellement de grande dimension \mathcal{F} appelé espace des caractéristiques (*feature space*) muni d'un produit scalaire par l'intermédiaire d'une application $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ appelée *feature map*. Les 'nouvelles' données d'apprentissage sont donc les $(\Phi(\mathbf{x}_i), y_i)$ pour $i = 1, \dots, n$ et c'est sur celles-ci que nous effectuons une SVR. On espère en effet que la relation entre entrées et sorties sera plus proche de la linéarité dans l'espace \mathcal{F} que dans \mathcal{X} .

L'application Φ est inconnue *a priori*, et le fait de travailler en très grande dimension (\mathcal{F} peut être de dimension infinie) peut sembler très ardu au premier abord. Cependant, comme nous l'avons fait remarquer précédemment, la solution SVR ne dépend que du produit scalaire entre les entrées. Ainsi, il nous suffit simplement de connaître le produit scalaire sur \mathcal{F} , $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) := \langle \Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2) \rangle_{\mathcal{F}}$ plutôt que Φ . Dans ce cas, le problème d'optimisation s'écrit

$$\begin{aligned} & \underset{\alpha_i, \alpha_i^*}{\text{maximiser}} && -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \epsilon \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i=1}^n y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \\ & \text{s.c.} && \begin{cases} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ 0 \leq \alpha_i, \alpha_i^* \leq C \end{cases} \end{aligned}$$

et la solution \hat{f} est donnée par

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n (\hat{\alpha}_i - \hat{\alpha}_i^*) k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + \hat{b}.$$

Le produit scalaire $k(\cdot, \cdot)$ est appelé *noyau*, et le phénomène remarquable consistant à obtenir une solution ne faisant intervenir qu'un noyau $k(\cdot, \cdot)$ au lieu d'une fonction Φ à expliciter lorsque l'on veut rendre non-linéaire un algorithme est connu sous le nom d'*astuce du noyau* (*kernel trick*). **Ici il n'est donc pas nécessaire d'explicitement la fonction Φ , mais seulement le produit scalaire $k(\cdot, \cdot)$ sur \mathcal{F} .** D'autres méthodes ont utilisé l'astuce du noyau, on pourra citer par exemple la *Kernel Principal Component Analysis*, ou KPCA

(Zwald 2005) qui permet de rendre l'analyse en composantes principales non-linéaire. Nous ferons dans la section 3.5.2 le lien entre cette astuce et la régularisation dans les espaces de Hilbert à noyau auto-reproduisant. Nous aborderons aussi la question de savoir quelles fonctions $k(\cdot, \cdot)$ correspondent à un produit scalaire dans un espace des caractéristiques \mathcal{F} . Nous nous intéressons maintenant aux algorithmes numériques permettant de résoudre le problème dual ci-dessus.

Algorithmes d'optimisation

Rappelons que l'on veut résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{aligned} & \underset{\alpha_i, \alpha_i^*}{\text{maximiser}} && -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \epsilon \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i=1}^n y_i (\alpha_i - \alpha_i^*) \\ & \text{s.c.} && \begin{cases} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ 0 \leq \alpha_i, \alpha_i^* \leq C \end{cases} \end{aligned}$$

que l'on peut réécrire sous la forme

$$\begin{aligned} & \underset{\boldsymbol{\alpha}}{\text{minimiser}} && \frac{1}{2} {}^t \boldsymbol{\alpha} \mathbf{H} \boldsymbol{\alpha} + {}^t \mathbf{u} \boldsymbol{\alpha} \\ & \text{s.c.} && \begin{cases} {}^t \mathbf{v} \boldsymbol{\alpha} = 0 \\ \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\alpha} \leq \mathbf{C} \end{cases} \end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\alpha} = {}^t(\alpha_1, \dots, \alpha_n, \alpha_1^*, \dots, \alpha_n^*)$, $\mathbf{u} = {}^t(\epsilon - y_1, \dots, \epsilon - y_n, \epsilon + y_1, \dots, \epsilon + y_n)$, $\mathbf{0}$ est le vecteur colonne de taille $n \times 1$ contenant des 0, \mathbf{C} est le vecteur colonne de taille $n \times 1$ contenant des C, $\mathbf{v} = {}^t(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ et

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & -\mathbf{K} \\ -\mathbf{K} & \mathbf{K} \end{bmatrix}$$

avec

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix}.$$

Sous cette forme le problème d'optimisation SVR apparaît clairement comme un problème quadratique (*Quadratic Programming problem*, ou problème QP). Si des algorithmes ont été développés spécifiquement pour la SVR pour utiliser sa structure particulière, nous tenons à souligner le fait que de nombreux algorithmes stables et fiables dédiés aux problèmes QP sont disponibles. Pour plus de détails sur ces algorithmes, on pourra consulter Smola and Schölkopf (2004) et toutes les références qui s'y trouvent.

3.5.2 Risque empirique et régularisation

Dans cette section nous rappelons tout d'abord le concept d'espace de Hilbert à noyau auto-reproduisant ainsi que quelques définitions et propriétés de ce type d'espaces. Nous expliquons ensuite brièvement leur utilisation dans le cadre de la régression régularisée. Enfin, nous exhibons les liens entre la SVR et la régression régularisée dans de tels espaces.

Espaces de Hilbert à noyau auto-reproduisant

Commençons en premier lieu par la définition centrale pour cette section.

Définition 3.7. *Un espace de Hilbert à noyau auto-reproduisant \mathcal{F} (Reproducing Kernel Hilbert Space, ou RKHS) est un espace de Hilbert de fonctions définies sur un ensemble \mathcal{X} à valeurs dans \mathbb{R} ($\mathcal{F} \subset \mathbb{R}^{\mathcal{X}}$) pour lequel il existe une fonction $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ appelée noyau auto-reproduisant telle que*

- \mathcal{F} contient toutes les fonctions $k(\mathbf{x}, \cdot)$ pour $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$,
- toute fonction f de \mathcal{F} vérifie la propriété de reproduction

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \langle f, k(\mathbf{x}, \cdot) \rangle_{\mathcal{F}} = f(\mathbf{x}) \quad (3.14)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F}}$ est le produit scalaire sur \mathcal{F} .

Cette définition est celle que l'on rencontre le plus fréquemment du fait de sa simplicité : en effet, on se donne ici un espace de Hilbert \mathcal{F} et on suppose qu'il existe un noyau auto-reproduisant associé à \mathcal{F} , ce qui en fait directement un RKHS.

Cependant, une autre définition est possible, dans le sens où l'on peut définir un RKHS avec la seule donnée d'un espace de Hilbert \mathcal{F} de fonctions telles que la fonctionnelle $f \rightarrow f(\mathbf{x})$ soit continue pour tout $f \in \mathcal{F}$ et $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Cette hypothèse de continuité suffit alors à construire un noyau auto-reproduisant associé à \mathcal{F} , voir Aronszajn (1950).

Rappelons qu'un noyau défini positif est une fonction $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ symétrique (i.e. $\forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{X}, k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$) telle que

$$\forall N \geq 1, \forall (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \in \mathcal{X}^N, \forall (a_1, \dots, a_N) \in \mathbb{R}^N, \sum_{i,j=1}^N a_i a_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \geq 0.$$

Un noyau auto-reproduisant possède les propriétés suivantes :

Proposition 3.8 (Propriétés d'un noyau auto-reproduisant). *Si k est un noyau auto-reproduisant d'un RKHS \mathcal{F} , alors*

1. $k(\cdot, \cdot)$ est unique,
2. k est un noyau défini positif,
3. $\langle k(\mathbf{x}_1, \cdot), k(\mathbf{x}_2, \cdot) \rangle_{\mathcal{F}} = k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$.

Démonstration. La propriété 1 découle de la nullité de la norme dans \mathcal{F} de la différence $k(\mathbf{x}, \cdot) - k'(\mathbf{x}, \cdot)$ où k et k' sont deux noyaux auto-reproduisants. La propriété 2 se démontre en vérifiant la symétrie, obtenue en prenant $f = k(\mathbf{x}_2, \cdot)$ dans (3.14), et la positivité, garantie en prenant $f = \sum_{i=1}^N a_i k(\mathbf{x}_i, \cdot)$ et en calculant $\|f\|_{\mathcal{F}}^2$. Enfin, la propriété 3 résulte directement de (3.14). \square

Donnons maintenant le théorème permettant de faire le lien entre RKHS et SVR :

Théorème 3.9. *Soit $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ un noyau défini positif. Alors il existe un espace de Hilbert \mathcal{F} de fonctions sur \mathcal{X} admettant k comme noyau auto-reproduisant.*

Démonstration. On pourra consulter Vasquez (2005) pour une preuve par construction explicite de \mathcal{F} . Aronszajn (1950) propose quant à lui de considérer la classe de fonction engendrée par les fonctions de la forme $\sum \alpha_i k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ dont la norme est définie par la forme quadratique $\sum \sum \alpha_i \alpha_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$. Cet espace de fonctions muni de cette norme n'est pas un espace de Hilbert complet, mais il peut être complété par l'ajout des fonctions qui sont limites de suite de Cauchy des fonctions qui le composent. \square

On peut remarquer que ce théorème ne suppose aucune condition sur l'espace \mathcal{X} . A partir de la donnée d'un espace \mathcal{X} quelconque et d'un noyau défini positif $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, on peut ainsi construire un RKHS \mathcal{F} admettant $k(\cdot, \cdot)$ comme noyau auto-reproduisant. Rappelons qu'en SVR nous envoyons les entrées \mathbf{x} dans un espace des caractéristiques \mathcal{F} par l'intermédiaire d'une fonction $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ qui n'intervient dans le problème de la SVR qu'à travers le produit scalaire $\langle \Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2) \rangle_{\mathcal{F}}$. Par conséquent, si on se donne un noyau défini positif $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ et que l'on pose $\Phi(\mathbf{x}) = k(\mathbf{x}, \cdot)$, alors l'espace des caractéristiques \mathcal{F} ainsi construit est un RKHS. Son noyau auto-reproduisant k est $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2) \rangle_{\mathcal{F}}$. Ce résultat illustre clairement le fait que l'astuce du noyau utilisée pour rendre non-linéaire l'algorithme de la SVR peut s'interpréter comme l'envoi des données dans un RKHS à condition d'utiliser un noyau défini positif. Notons qu'une telle vision de la SVR permet aussi de bénéficier de tous les résultats connus sur les RKHS qui sont des outils classiques en analyse fonctionnelle (Aronszajn 1950).

Présentons maintenant quelques éléments sur les représentations possibles d'un noyau auto-reproduisant pour donner une idée intuitive d'un RKHS.

La représentation la plus souvent mentionnée dans la littérature et la plus connue fait appel au théorème de Mercer. L'hypothèse principale et la plus restrictive de ce théorème est que l'espace \mathcal{X} est compact. Soit donc un ensemble \mathcal{X} compact, μ une mesure sur \mathcal{X} finie et $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ un noyau défini positif continu. Sous ces hypothèses, l'opérateur linéaire intégral $T_k f : \mathbb{L}^2(\mu) \rightarrow \mathbb{L}^2(\mu)$ défini par

$$T_k f(\cdot) = \int_{\mathcal{X}} k(\mathbf{x}, \cdot) f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x})$$

est un opérateur linéaire auto-adjoint compact, voir par exemple Hirsch and Lacombe (1999) ou Aubin (2000). Il est donc diagonalisable dans une base orthonormée $(\phi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ dénombrable et les valeurs propres associées sont notées $(\lambda_i)_{i \in \mathbb{N}}$. Le théorème de Mercer est le suivant :

Théorème 3.10 (Mercer). *Avec les notations et les hypothèses précédentes, on a*

$$\iint |k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 d\mu(\mathbf{x}_1)d\mu(\mathbf{x}_2) = \sum_{i \geq 1} \lambda_i^2$$

et

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i \geq 1} \lambda_i \phi_i(\mathbf{x}_1) \overline{\phi_i(\mathbf{x}_2)},$$

où les séries convergent absolument et uniformément pour presque tout $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \in \mathcal{X}^2$.

Démonstration. Voir Aubin (2000). □

On peut montrer de plus que le RKHS associé au noyau k est

$$\mathcal{F} = \left\{ f \in \mathbb{L}^2(\mu), f = \sum_{i \geq 1} \langle f, \phi_i \rangle \phi_i, \|f\|_{\mathcal{F}}^2 = \sum_{i \geq 0} \frac{\langle f, \phi_i \rangle^2}{\lambda_i} < +\infty \right\},$$

soulignant ici le fait que \mathcal{F} est un sous-espace de $\mathbb{L}^2(\mu)$ constitué des fonctions dont les coefficients dans la base $(\phi_i)_{i \geq 1}$ décroissent suffisamment rapidement par rapport aux valeurs propres.

La représentation que nous venons de détailler n'est valable que pour des espaces \mathcal{X} compacts, alors qu'en pratique il est fréquent de travailler sur $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ par exemple. Il est possible cependant d'obtenir une représentation d'un noyau défini positif $k : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ dans le cas où celui-ci est invariant par translation par l'intermédiaire du théorème de Bochner (Bochner 1959). En effet, si k est invariant par translation *i.e.* $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = k(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ et si $k(\mathbf{t}) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d)$, on peut montrer que

$$k(\mathbf{t}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle \mathbf{v}, \mathbf{t} \rangle} \tilde{k}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

où $\tilde{k}(\cdot)$ est la transformée de Fourier de $k(\cdot)$, avec $\tilde{k}(\mathbf{v}) \in \mathbb{R}$ et $\tilde{k}(\mathbf{v}) > 0$ pour tout $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^d$. Le RKHS \mathcal{F} engendré par k s'identifie alors à

$$\mathcal{F} = \left\{ f \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d), \|f\|_{\mathcal{F}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{|\tilde{f}(\mathbf{v})|^2}{\tilde{k}(\mathbf{v})} d\mathbf{v} < +\infty \right\}$$

où $\tilde{f}(\cdot)$ est la transformée de Fourier de $f(\cdot)$. On trouvera une démonstration de ce résultat dans Vasquez (2005) par exemple. Un cas particulier de cette représentation est obtenu lorsque l'on considère le noyau gaussien :

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2}{2\sigma^2}\right),$$

qui est bien défini positif continu et invariant par translation. Il admet pour transformée de Fourier

$$\tilde{k}(\mathbf{v}) = \exp\left(-\frac{\sigma^2 \|\mathbf{v}\|^2}{2}\right)$$

et dans ce cas le RKHS associé est

$$\mathcal{F} = \left\{ f \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d), \|f\|_{\mathcal{F}} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} |\tilde{f}(\mathbf{v})|^2 \exp\left(\frac{\sigma^2 \|\mathbf{v}\|^2}{2}\right) d\mathbf{v} < +\infty \right\}.$$

Cette écriture du RKHS permet de mettre en avant le rôle de régularisation joué par σ , en effet il apparaît clairement de cette représentation que si $\sigma_1 < \sigma_2$, alors $\mathcal{F}_{\sigma_2} \subset \mathcal{F}_{\sigma_1}$. En d'autres termes, plus σ est grand, plus les transformées de Fourier des fonctions du RKHS décroissent rapidement à l'infini, c'est-à-dire plus les fonctions du RKHS sont dérivables. Les deux représentations précédentes illustrent un principe fondamental des RKHS : la norme d'une fonction d'un RKHS peut être vue comme une mesure de sa régularité, et permet d'envisager la régression régularisée dans les RKHS que nous présenterons dans la suite.

Pour terminer cette partie sur les noyaux auto-reproduisants, nous donnons les expressions de quelques noyaux utilisés classiquement. On peut d'abord citer les noyaux polynomiaux de type

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle + c)^p$$

où $c \geq 0$ et $p \in \mathbb{N}$. Citons aussi le noyau tangente hyperbolique, encore appelé *réseau de neurone* :

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \tanh(a \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle - b).$$

Enfin rappelons le noyau gaussien, ou *Radial Basis Function* (RBF) :

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2}{2\sigma^2}\right).$$

Terminons par quelques propriétés permettant de construire des noyaux qui vérifient le théorème de Mercer à partir de noyaux existants qui le vérifient déjà (dits *admissibles*). Comme le soulignent Smola and Schölkopf (2004), ce théorème signifie de manière moins formelle que si

$$\forall f \in \mathbb{L}^2(\mu), \iint k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2) d\mu(\mathbf{x}_1) d\mu(\mathbf{x}_2) \geq 0$$

alors $k(\cdot, \cdot)$ peut être écrit comme un produit scalaire dans un RKHS. On en déduit alors les propriétés suivantes :

Proposition 3.11. *Soient $k(\cdot, \cdot)$ et $k'(\cdot, \cdot)$ deux noyaux admissibles. Alors*

1. $\alpha k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + \beta k'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ est un noyau admissible si $\alpha, \beta \geq 0$,
2. $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) k'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ est un noyau admissible,
3. Toute fonction polynomiale positive de $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ est admissible.

Démonstration. On pourra consulter Smola and Schölkopf (2004) pour les propriétés 1 et 2. La propriété 3 est une conséquence immédiate de ces deux propriétés. \square

Régularisation dans les RKHS

Nous présentons ici la procédure de régularisation de type Tikhonov (Tikhonov and Arsenin 1977). Supposons donc que l'on dispose de données d'apprentissage $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$ générées indépendamment selon la même loi inconnue $P(\mathbf{x}, y)$ définie sur $\mathcal{X} \times \mathbb{R}$. L'objectif est de trouver une fonction $\hat{f}(\mathbf{x})$ dans un ensemble de fonctions \mathcal{F} qui minimise un critère d'attache aux données. La qualité d'approximation d'une telle fonction $f \in \mathcal{F}$ est mesurée par l'espérance d'une fonction de coût (*loss function*) par rapport à la loi $P(\mathbf{x}, y)$, cette espérance est appelé le *risque* associé à f et est défini par

$$R(f) = \int l(f(\mathbf{x}), y) dP(\mathbf{x}, y)$$

où $l(f(\mathbf{x}), y)$ est la fonction de coût. Les fonctions de coût classiques sont par exemple :

- En classification : $l(f(\mathbf{x}), y) = \mathbf{1}_{f(\mathbf{x}) \neq y}$,
- En régression : $l(f(\mathbf{x}), y) = (f(\mathbf{x}) - y)^2$ appelée fonction de coût quadratique ou L^2 , et $l(f(\mathbf{x}), y) = |f(\mathbf{x}) - y|$ appelée fonction de coût L^1 .

Notre problème est donc de minimiser le risque $R(f)$ pour $f \in \mathcal{F}$. Cependant, ce risque ne peut pas être calculé car la loi $P(\mathbf{x}, y)$ est inconnue. On possède en revanche un échantillon $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$ de $P(\mathbf{x}, y)$, ce qui nous permet de minimiser le *risque empirique*

$$R_{\text{emp}}(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i), y_i)$$

au lieu de $R(f)$. Ceci se justifie par la loi des grands nombres, en effet

$$\forall f, R_{\text{emp}}(f) \rightarrow R(f)$$

quand $n \rightarrow \infty$. Cette convergence est à l'origine de la théorie de la minimisation du risque empirique (*Empirical Risk Minimization* ou ERM) : on s'attend à ce que la fonction qui minimise le risque empirique possède aussi un risque faible (Vapnik 1982). Néanmoins cette approche possède un défaut classique en régression. En effet la solution \hat{f} de ce problème de minimisation peut beaucoup varier selon l'espace de fonctions \mathcal{F} que l'on se donne. Si \mathcal{F} est très riche, d'un part il peut y avoir plusieurs solutions optimales (la minimisation est donc un problème mal posé) et d'autre part on peut trouver une solution possédant un pouvoir de prédiction restreint. C'est la raison pour laquelle l'ensemble \mathcal{F} doit être contraint, par exemple en imposant des conditions de régularité sur les fonctions $f \in \mathcal{F}$: c'est le principe de la régression régularisée. Nous avons vu précédemment que la norme d'un RKHS \mathcal{F} pouvait être vue comme un terme de régularisation. On est donc ramené au problème de minimisation suivant :

$$\hat{f} = \arg \min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i), y_i) + \lambda \|f\|_{\mathcal{F}}^2$$

où $\lambda > 0$ est la constante de régularisation. Une particularité fondamentale de ce problème de minimisation est que l'on peut établir la forme de ces solutions grâce au théorème du

représentant originellement établi par Kimeldorf and Wahba (1971) et étendu par Shölkopf, Herbrich and Smola (2001) :

Théorème 3.12 (Théorème du représentant). *Soit \mathcal{F} un RKHS de noyau k . On cherche à résoudre le problème de minimisation*

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i), y_i) + \lambda \|f\|_{\mathcal{F}}^2$$

où $\lambda > 0$. Alors, si la fonction de coût $l(u, v)$ est convexe en u , la solution de ce problème est unique et peut s'écrire sous la forme

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n a_i k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i).$$

Démonstration. On pourra se référer à Kimeldorf and Wahba (1971). □

Un des exemples classiques de régularisation dans un RKHS est donné par les splines, voir Wahba (1990). Dans ce cas, le problème de minimisation que l'on cherche à résoudre est

$$\min \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int_0^1 (f^{(m)}(x))^2 dx$$

sur toutes les fonctions $m - 1$ fois continuellement dérivables sur $[0, 1]$ et de dérivée m -ième de carré intégrable (espace de Sobolev). On peut montrer que ce problème entre dans le cadre d'une régression régularisée sur un RKHS.

L'autre exemple qui nous intéresse particulièrement ici est le lien entre SVR et régression régularisée dans un RKHS. On a déjà vu que l'astuce du noyau utilisée en SVR pouvait être vu comme l'envoi des données dans un RKHS de noyau k . Mais on peut aussi montrer facilement que le problème de minimisation (3.8) apparaissant en SVR peut s'écrire sous la forme

$$\min_{f \in \mathcal{F}, b \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i) + b, y_i) + \lambda \|f\|_{\mathcal{F}}^2$$

où \mathcal{F} est le RKHS associé au noyau k , $l(u, v) = |u - v|_{\epsilon} = \max(0, |u - v| - \epsilon)$ et en prenant $\lambda = \frac{1}{2C}$. Le théorème du représentant nous garantit donc que la solution \hat{f} est alors de la forme

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n a_i k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$$

comme nous l'avons déjà montré dans l'introduction. Si la fonction de coût $l(u, v) = |u - v|_{\epsilon}$ dite ϵ -insensible a été celle initialement choisie en SVR pour sa robustesse et la simplicité de l'algorithme qui en découle, on peut tout aussi bien choisir d'autres fonctions de coût, par exemple $l(u, v) = (u - v)^2$. Dans ce cas, la SVR se ramène à la régression à noyau L^2 régularisée (*Kernel Ridge Regression*) et la minimisation n'est plus un problème QP mais un problème de résolution de système linéaire, en effet le vecteur $\mathbf{a} = {}^t(a_1, \dots, a_n)$ est alors solution de

$$(\lambda \mathbf{I}_n + {}^t \mathbf{K} \mathbf{K}) \mathbf{a} = \mathbf{y}$$

où \mathbf{I}_n est la matrice identité $n \times n$, $\mathbf{y} = {}^t(y_1, \dots, y_n)$ et \mathbf{K} est la matrice $n \times n$ d'éléments $\mathbf{K}_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ définie précédemment.

Liens avec d'autres approches

Nous terminons cette section en rappelant que la SVR n'est pas la seule approche liée à la régression régularisée dans un RKHS. En effet, comme nous l'avons déjà noté, la méthode des splines rentre aussi dans ce cadre (Wahba 1990). Notons aussi que la modélisation par processus gaussiens que nous avons déjà mentionnée dans le chapitre 2 est fortement liée aux RKHS. Dans ce cadre, le noyau auto-reproduisant k est vu comme la fonction de covariance d'un processus stationnaire modélisant les données. Cette technique a pour avantage de fournir par exemple un cadre interprétable plus large pour le choix du noyau. On pourra consulter la thèse de Vasquez (2005) pour un exposé vaste des RKHS et des liens entre processus gaussiens et régularisation. Une autre étude peut aussi être consultée dans Seeger (2004).

3.5.3 Choix des paramètres en SVR

Nous venons de détailler la régression par vecteurs de support d'un point de vue théorique. On remarquera que les valeurs de tous les hyper-paramètres intervenant dans la SVR n'ont pas été précisées, citons par exemple la constante ϵ si l'on utilise la fonction de coût ϵ -insensible, la constante de régularisation C (ou de manière symétrique la constante λ), la variance σ^2 si l'on utilise un noyau gaussien, etc. En pratique il est cependant primordial de donner une valeur à ces hyper-paramètres, et si possible des valeurs qui fournissent la meilleure approximation de la relation entre les entrées et les sorties. C'est cette procédure de sélection des valeurs des hyper-paramètres que nous appelons 'choix des paramètres en SVR'. Divers techniques basées sur des points de vue variés existent pour guider ces choix. Nous n'en présenterons ici que quelques-unes, principalement celles qui sont les plus utilisées en pratique.

Validation croisée

Une technique très répandue en régression régularisée dans les RKHS est la validation croisée. On pourra en trouver une application aux splines dans Wahba (1990). Le principe est le suivant : supposons que l'on dispose de données d'apprentissage $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$ i.i.d. selon $P(\mathbf{x}, y)$ à partir desquelles on a construit un estimateur \hat{f}_ψ en fixant les hyper-paramètres que l'on regroupe dans un vecteur ψ . Idéalement on voudrait choisir les hyper-paramètres ψ de manière à minimiser l'erreur de prédiction

$$\mathbb{E}_P \left[(y - \hat{f}_\psi(\mathbf{x}))^2 \right].$$

Comme la loi $P(\mathbf{x}, y)$ est inconnue, le premier réflexe serait d'estimer l'erreur de prédiction par

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{f}_\psi(\mathbf{x}_i))^2,$$

cependant cette quantité n'est pas un bon estimateur de l'erreur de prédiction car elle ne mesure que la qualité de l'adéquation sur les données observées. L'idée de la validation croisée est de remédier à ce problème en considérant plutôt les fonctions $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}^{[m]}$ obtenues de la même manière que $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}$ mais en enlevant la m -ième observation (\mathbf{x}_m, y_m) des données $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}$. On approche alors l'erreur de prédiction par

$$V(\boldsymbol{\psi}) = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n (y_m - \hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}^{[m]}(\mathbf{x}_m))^2$$

ce qui permet de garantir l'indépendance de $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}^{[m]}$ et de l'observation où on fait la prédiction. Le vecteur $\boldsymbol{\psi}_0$ qui minimise $V(\boldsymbol{\psi})$ est l'estimateur de la *validation croisée ordinaire* ou *leave-one-out*. Si le nombre de données n est grand, il est classique d'utiliser la validation croisée sur des sous-ensembles plus grands de l'ensemble des données, on parle alors de validation croisée stratifiée (*K-fold cross validation*). Le principe est simple : on partitionne l'ensemble des données en K sous-ensembles et on approche l'erreur de prédiction sur un des sous-ensembles en utilisant les données des autres sous-ensembles pour calculer la fonction $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}$. Notons que l'on peut écrire $V(\boldsymbol{\psi})$ sous une forme ne faisant pas intervenir les fonctions $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}^{[m]}$ mais seulement $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}$ à l'aide du lemme de validation croisée (*leave-one-out lemma*, Wahba (1990)). Cette écriture évite de résoudre n problèmes de régression régularisée, un pour chaque fonction $\hat{f}_{\boldsymbol{\psi}}^{[m]}$. Dans le cas particulier de la SVR avec fonction de coût L^2 (*Kernel Ridge Regression*) on a

$$V(\boldsymbol{\psi}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - {}^t k_i ({}^t \mathbf{K} \mathbf{K} + \lambda \mathbf{I}_n)^{-1} {}^t \mathbf{K} \mathbf{y}}{1 - {}^t k_i ({}^t \mathbf{K} \mathbf{K} + \lambda \mathbf{I}_n)^{-1} k_i} \right)^2$$

où $k_i = {}^t(k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i), \dots, k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i))$ ce qui permet d'éviter n minimisations. De plus, selon la forme du noyau k choisi, cette formulation permet aussi dans certains cas de calculer les dérivées de $V(\boldsymbol{\psi})$ par rapport aux hyper-paramètres contenus dans $\boldsymbol{\psi}$ et par conséquent de mettre en oeuvre une procédure de minimisation rapide de $V(\boldsymbol{\psi})$ à l'aide de ses dérivées, voir par exemple Chapelle (2004). Citons aussi la *validation croisée généralisée* ou GCV proposée par Wahba (1998) qui permet d'apporter certaines propriétés d'invariance que n'a pas la validation croisée ordinaire.

Approche bayésienne

Nous avons souligné précédemment les liens entre processus gaussiens et régression régularisée dans un RKHS, ce qui lie ainsi processus gaussiens et SVR. Or la modélisation par processus gaussiens bénéficie d'autres techniques permettant de choisir les paramètres du noyau, par exemple l'adéquation à un variogramme (Vasquez 2005). Un autre outil intéressant consiste à exploiter la vraisemblance des données en fonction des paramètres du noyau (Vasquez 2005) et d'y incorporer de la connaissance à travers le formalisme bayésien (Santner et al. 2003). Les deux méthodes bayésiennes appliquées en SVR que nous présentons ici s'inspirent de ces idées.

La première approche introduite par Gao, Gunn, Harris and Brown (2002) propose d'écrire le problème de minimisation

$$\min_{f \in \mathcal{F}} C \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i), y_i) + \frac{1}{2} \|f\|_{\mathcal{F}}^2$$

comme la maximisation d'une distribution *a posteriori*. En notant $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}\}$ l'ensemble d'apprentissage et $\mathbf{f}(X) = {}^t[f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)]$, on peut écrire la règle de Bayes

$$P(\mathbf{f}(X)|\mathcal{D}) = \frac{P(\mathcal{D}|\mathbf{f}(X))P(\mathbf{f}(X))}{P(\mathcal{D})}$$

où $P(\mathbf{f}(X)|\mathcal{D})$ est la distribution *a posteriori*, $P(\mathcal{D}|\mathbf{f}(X))$ et $P(\mathbf{f}(X))$ sont des distributions *a priori* (connues) et $P(\mathcal{D})$ est l'*a priori*. La première hypothèse faite par Gao et al. (2002) est que les données \mathcal{D} ont été générées i.i.d. selon

$$P(\mathbf{x}, y) = P(y|\mathbf{x})P(\mathbf{x}) = P(y - f(\mathbf{x}))P(\mathbf{x})$$

avec

$$P(y - f(\mathbf{x})) \propto \exp(-Cl(y - f(\mathbf{x}))).$$

Sous cette hypothèse, on a alors

$$P(\mathcal{D}|\mathbf{f}(X)) = G(C) \exp\left(-C \sum_{i=1}^n l(y_i - f(\mathbf{x}_i))\right)$$

où $G(C)$ est une constante de normalisation qui ne dépend que de C . Dans un second temps, on s'inspire de la modélisation par processus gaussiens où le noyau auto-reproduisant k est vu comme une fonction de covariance, ce qui nous amène à considérer la distribution *a priori* sur $\mathbf{f}(X)$ égale à

$$P(\mathbf{f}(X)) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \mathbf{K}}} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t \mathbf{f}(X) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}(X)\right)$$

où \mathbf{K} est la matrice $n \times n$ composé des éléments $\mathbf{K}_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ définie précédemment. La règle de Bayes donne alors

$$P(\mathbf{f}(X)|\mathcal{D}) = \frac{G(C)}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \mathbf{K}} P(\mathcal{D})} \exp\left(-C \sum_{i=1}^n l(y_i - f(\mathbf{x}_i)) - \frac{1}{2} {}^t \mathbf{f}(X) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}(X)\right).$$

Un estimateur de $\mathbf{f}(X)$ est le maximum a posteriori (MAP) qui maximise la distribution *a posteriori* $P(\mathbf{f}(X)|\mathcal{D})$, ou plus simplement dans notre cas la fonction dans l'exponentielle. Ainsi l'estimateur MAP de $\mathbf{f}(X)$ est le minimum de

$$C \sum_{i=1}^n l(y_i - f(\mathbf{x}_i)) + \frac{1}{2} {}^t \mathbf{f}(X) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}(X).$$

Si l'on note \hat{f} la solution SVR, on a $\hat{\mathbf{f}}(X) = \mathbf{K}\mathbf{a}$. De plus, le théorème du représentant et la propriété de reproduction impliquent directement que $\|\hat{f}\|_{\mathcal{F}} = {}^t\mathbf{a}\mathbf{K}\mathbf{a}$, d'où

$$\begin{aligned}\|\hat{f}\|_{\mathcal{F}} &= {}^t\mathbf{a}\mathbf{K}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{a} \\ &= {}^t\hat{\mathbf{f}}(X)\mathbf{K}^{-1}\hat{\mathbf{f}}(X)\end{aligned}$$

ce qui montre que le point de vue MAP est équivalent à la SVR. Dans ce cadre, Gao et al. (2002) se limite à la fonction de coût ϵ -insensible et propose d'estimer la constante C par la méthode d'approximation de *l'a priori*. Rappelons que *l'a priori* est $P(\mathcal{D})$ et n'est pas calculable analytiquement. Les auteurs proposent un développement de Taylor au second ordre qui leur permet d'en déduire une procédure itérative pour trouver la constante C qui maximise *l'a priori*. Remarquons toutefois que les auteurs ne donnent pas d'indication pour choisir les autres hyper-paramètres, notamment ceux du noyau. Pour ce faire, on peut encore s'inspirer de la modélisation par processus gaussiens, voir Vasquez (2005).

La seconde méthode que nous détaillons est due à Van Gestel, Espinoza, Baesens, Suykens, Brasseur and De Moor (2006) et se base aussi sur un modèle hiérarchique. Elle est cependant plus complexe que la méthode précédente car elle prend en compte tous les hyper-paramètres d'une SVR et nécessite par conséquent plus d'étages. En reprenant les notations de l'introduction, les auteurs se placent dans le cadre de la SVR avec fonction de coût quadratique et considèrent donc le problème de minimisation

$$\min_{\mathbf{w}, b} C \sum_{i=1}^n (y_i - \langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle - b)^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2.$$

En notant $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1, \dots, n}\}$ comme précédemment et \mathcal{H} le vecteur constitué de tous les hyper-paramètres, le modèle hiérarchique est construit sur trois niveaux :

1. Au premier niveau on suppose C et \mathcal{H} connus. La formule de Bayes donne alors

$$P(\mathbf{w}, b | \mathcal{D}, \log C, \mathcal{H}) = \frac{P(\mathcal{D} | \mathbf{w}, b, \log C, \mathcal{H}) P(\mathbf{w}, b | \log C, \mathcal{H})}{P(\mathcal{D} | \log C, \mathcal{H})}.$$

Le dénominateur n'est qu'une constante de normalisation. Le premier facteur au dénominateur reflète comme dans la méthode précédente l'erreur que l'on suppose sur les données, ici des erreurs i.i.d. gaussiennes. Le second facteur se traite en posant un *a priori* gaussien pour \mathbf{w} (équivalent à la modélisation par processus gaussiens mentionnée précédemment) et un *a priori* non-informatif sur b , les deux étant indépendants.

2. La constante C est traitée au deuxième niveau :

$$P(\log C | \mathcal{D}, \mathcal{H}) = \frac{P(\mathcal{D} | \log C, \mathcal{H}) P(\log C | \mathcal{H})}{P(\mathcal{D} | \mathcal{H})}.$$

Les distributions *a priori* utilisées mènent à

$$P(\log C | \mathcal{D}, \mathcal{H}) \propto P(\mathcal{D} | \log C, \mathcal{H})$$

qui est calculé facilement à partir du résultat du niveau 1.

3. La distribution *a posteriori* de \mathcal{H} est obtenue au niveau 3 avec

$$P(\mathcal{H}|\mathcal{D}) \propto P(\mathcal{D}|\mathcal{H}) P(\mathcal{H}).$$

Pour plus de détails on pourra consulter Van Gestel et al. (2006). L'inconvénient manifeste de cette technique est son coût calculatoire, en effet chaque niveau implique une maximisation à effectuer numériquement.

Approche par hyper-noyaux

L'approche par hyper-noyaux (*hyperkernels* en anglais) proposée par Ong, Smola and Williamson (2005) a pour but de développer un cadre théorique pour le choix du meilleur noyau possible pour une SVR, et permettre un choix automatique de ce noyau. Cette méthode est basée sur la définition d'un RKHS sur l'ensemble des noyaux lui-même. Cette procédure permet alors d'écrire un problème d'estimation similaire à une minimisation du risque empirique régularisé que nous avons évoquée précédemment. Plus précisément, les auteurs définissent tout d'abord le concept de *qualité empirique* (d'un noyau) : pour un noyau k et un ensemble de données X, Y , une fonction de qualité empirique $Q_{\text{emp}}(k, X, Y)$ est une fonction qui ne dépend de k qu'à travers $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ où $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in X$ pour $1 \leq i, j \leq n$. En d'autres termes, Q_{emp} est une fonction qui indique à quel point un noyau k est adapté à des données X, Y : elle peut donc être utilisée pour trouver un k qui donne une valeur de Q_{emp} optimale. Cependant ce noyau k sera optimal pour un ensemble de données X, Y fixé, mais pas obligatoirement pour d'autres jeux de données. On est donc confronté au même problème de généralisation qu'en régression. Pour faire face à ce phénomène, nous avons vu qu'en régression il est possible de contraindre la régression pour aboutir à un problème de régression régularisée en considérant un RKHS contenant les fonctions sur lesquelles on fait la minimisation et en régularisant à l'aide de la norme sur ce RKHS. Les auteurs proposent de suivre exactement la même démarche pour la qualité empirique en construisant un RKHS contenant les noyaux sur lesquels on fait la minimisation et en régularisant à l'aide de la norme sur cet espace. Un tel espace est appelé Hyper-RKHS. En notant $\underline{\mathcal{X}} := \mathcal{X} \times \mathcal{X}$ et en remarquant qu'un noyau est une fonction $k : \underline{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ la définition d'un Hyper-RKHS est la suivante :

Définition 3.13 (Hyper Reproducing Kernel Hilbert Space). *Soit \mathcal{X} un ensemble non vide et $\underline{\mathcal{X}} := \mathcal{X} \times \mathcal{X}$. L'espace de Hilbert \mathcal{F} de fonctions $k : \underline{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F}}$ est appelé Hyper-espace de Hilbert à noyau reproduisant s'il existe un hyper-noyau $\underline{k} : \underline{\mathcal{X}} \times \underline{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ possédant les propriétés suivantes :*

1. \underline{k} possède la propriété de reproduction :

$$\forall k \in \mathcal{F}, \langle k, \underline{k}(\underline{\mathbf{x}}, \cdot) \rangle = k(\underline{\mathbf{x}})$$

et en particulier $\langle \underline{k}(\underline{\mathbf{x}}_1, \cdot), \underline{k}(\underline{\mathbf{x}}_2, \cdot) \rangle = \underline{k}(\underline{\mathbf{x}}_1, \underline{\mathbf{x}}_2)$.

2. L 'espace engendré par $\underline{k}(\underline{\mathbf{x}}, \cdot)$ lorsque $\underline{\mathbf{x}}$ parcourt $\underline{\mathcal{X}}$ est dense dans $\underline{\mathcal{F}}$.

3. $\underline{k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}) = \underline{k}(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{s}, \mathbf{t})$ pour tous $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t} \in \mathcal{X}$.

Remarquons qu'il n'est pas nécessaire d'inclure la propriété 2 dans la définition, voir Vasquez (2005). Cette définition est donc identique à celle d'un RKHS avec la propriété de symétrie pour les deux premiers arguments imposée par la propriété 3 (et par conséquent pour les deux derniers arguments aussi).

Il est alors possible de minimiser une qualité empirique régularisée. Les auteurs se limitent à la recherche d'un minimum parmi les noyaux définis positifs sur le jeu de données considéré (*i.e.* la matrice \mathbf{K} associé à k est définie positive). Le problème est donc le suivant :

$$\min_{k \in \underline{\mathcal{F}}} Q_{\text{emp}}(k, X, Y) + \frac{\lambda_Q}{2} \|k\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2$$

pour k produisant une matrice définie positive sur X , où $\lambda_Q > 0$ est une constante de régularisation et $\|k\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2$ est la norme sur le Hyper-RKHS $\underline{\mathcal{F}}$. L'intérêt d'avoir construit un Hyper-RKHS pour les noyaux est que cette minimisation bénéficie du théorème du représentant :

Théorème 3.14 (Théorème du représentant pour les Hyper-RKHS). *Soit \mathcal{X} un ensemble quelconque non vide, Q_{emp} une fonction de qualité empirique quelconque et X, Y un jeu de données. On cherche à résoudre le problème de minimisation*

$$\min_{k \in \underline{\mathcal{F}}} Q_{\text{emp}}(k, X, Y) + \frac{\lambda_Q}{2} \|k\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2$$

où $\lambda_Q > 0$. Alors toute solution $\hat{k} \in \underline{\mathcal{F}}$ de ce problème admet une représentation de la forme

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathcal{X}, \hat{k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{i,j=1}^n \beta_{ij} \underline{k}((\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), (\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$$

où $\beta_{ij} \in \mathbb{R}$ pour tout $1 \leq i, j \leq n$.

Démonstration. C'est une application directe du théorème du représentant 3.12, voir Ong et al. (2005). \square

Ce théorème implique donc que le minimum du problème régularisé est une combinaison linéaire d'hyper-noyaux. Remarquons cependant qu'il n'est pas garanti que ce minimum soit défini positif ce qui exclut dans un second temps de construire un RKHS avec ce noyau : il faut donc ajouter des contraintes à la minimisation. S'il est possible de contraindre le problème directement sur le noyau \hat{k} , les auteurs choisissent de contraindre plutôt les coefficients β_{ij} en imposant leur positivité et en imposant que toutes les fonctions soient des noyaux définis positifs. Cette méthode peut bien entendu ne pas donner un minimum, mais elle conduit à un problème d'optimisation plus facile à traiter en pratique.

Finalement, en prenant par exemple $Q_{\text{emp}}(f, X, Y) = R_{\text{emp}}(f, X, Y) + \frac{\lambda}{2} \|f\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2$ et une fonction de coût l le problème s'écrit

$$\min_{k \in \underline{\mathcal{F}}} \min_{f \in \mathcal{F}_k} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(f(\mathbf{x}_i), y_i) + \frac{\lambda}{2} \|f\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2 + \frac{\lambda_Q}{2} \|k\|_{\underline{\mathcal{F}}}^2.$$

Le minimum peut alors s'écrire comme solution d'un problème de *programmation semi-définie* (*semidefinite programming*, ou SDP). Les auteurs fournissent un certain nombre d'exemples d'une telle optimisation. Enfin, remarquons que les auteurs exhibent une analogie entre leur approche et un modèle hiérarchique bayésien constitué d'*hyper-a priori* (Bishop (1995), Chapitre 10).

3.5.4 Application aux estimateurs du maximum de vraisemblance

Dans cette partie nous expliquons comment la SVR permet d'approcher la loi d'un estimateur bootstrap $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ du maximum de vraisemblance. Nous reprenons le début de l'explication de la section 3.4.5 pour les polynômes de chaos.

Plaçons-nous dans le cadre de la section 3.3.3 où l'on considère le modèle

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

et où on estime $\boldsymbol{\theta}$ par l'estimateur du maximum de vraisemblance

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})) \boldsymbol{\Sigma}^{-1t} (\mathbf{Y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta})).$$

L'estimateur bootstrap $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est alors

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1t} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right)$$

où pour tout $1 \leq i \leq n$, $\boldsymbol{\nu}_i$ est un vecteur aléatoire de dimension q distribué selon une loi connue. Ici nous supposons que l'on a utilisé le bootstrap paramétrique, c'est-à-dire que $\boldsymbol{\nu}_i$ suit une gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\mu}$ et de matrice de variance-covariance $\boldsymbol{\Gamma}$ diagonale estimées à partir des résidus du modèle. On a vu que la formule (3.2) permet d'exprimer $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ comme une fonction des $\boldsymbol{\nu}_i$:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \phi(\boldsymbol{\nu}_1, \dots, \boldsymbol{\nu}_n)$$

où

$$\phi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) = \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \mathbf{u}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1t} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \mathbf{u}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right).$$

Sous cette forme, le vecteur aléatoire $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est une fonction de n vecteurs aléatoires $\boldsymbol{\nu}_i$. En notant $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j)$ la j -ième composante du vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ pour $j = 1, \dots, p$ et $\boldsymbol{\nu}_i(k)$ la k -ième composante du vecteur $\boldsymbol{\nu}_i$ pour $k = 1, \dots, q$ on peut écrire que

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j) = \phi_j(\boldsymbol{\nu}_1(1), \dots, \boldsymbol{\nu}_1(q), \dots, \boldsymbol{\nu}_n(1), \dots, \boldsymbol{\nu}_n(q)),$$

c'est-à-dire que chaque composante $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j)$ de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est une variable aléatoire fonction de nq variables aléatoire $\boldsymbol{\nu}_i(k)$ pour $i = 1, \dots, n$ et $k = 1, \dots, q$. En mettant bout à bout les $\boldsymbol{\nu}_i(k)$ et en les standardisant on forme un vecteur $\boldsymbol{\xi}$ de taille $r = nq$ tel que

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j) = \phi_j(\boldsymbol{\xi}) = \phi_j(\xi^1, \dots, \xi^r)$$

où les ξ^i pour $i = 1, \dots, r$ sont des gaussiennes indépendantes standard. On peut donc voir ce problème comme un problème de SVR où les données d'apprentissage sont les m observations $(\boldsymbol{\xi}_l, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_l^*(j))_{l=1, \dots, m}$ (pour simplifier les notations nous enlevons la dépendance en n de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j)$). A partir de ces observations et en se donnant un noyau $k^{(j)}$ on va construire une fonction $\hat{\phi}_j$ solution d'une régression régularisée qui a la forme classique

$$\hat{\phi}_j(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{l=1}^m a_l^{(j)} k^{(j)}(\boldsymbol{\xi}_l, \boldsymbol{\xi}) + \hat{b}^{(j)}.$$

3.5.5 Application aux modèles de cinétique chimique

Dans cette partie nous appliquons la méthodologie SVR pour les estimateurs du maximum de vraisemblance aux différents modèles de cinétiques chimiques du chapitre 1 pour illustrer la précision de notre approche.

Application au modèle HDS

Nous reprenons ici les détails déjà fournis dans la section 3.4.6.

Les paramètres du modèle simplifié d'HDS dans le cas de pondérations unitaires sont estimés via la relation

$$(\hat{k}, \hat{\alpha}) = \arg \min_{k, \alpha} \sum_{i=1}^{10} (S_i - S_{k, \alpha}(t_i))^2.$$

Notons $\hat{k}_{\text{obs}} = 1.87$ et $\hat{\alpha}_{\text{obs}} = 1.25$ les paramètres optimaux solutions de la minimisation précédente en utilisant les données présentées dans le tableau 1.1. On peut calculer les résidus observés ν_i :

$$\nu_i = S_i - S_{\hat{k}_{\text{obs}}, \hat{\alpha}_{\text{obs}}}(t_i)$$

pour $i = 1, \dots, 10$. On fait l'hypothèse que les erreurs ν_i sont indépendantes et de même loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ où $\mu = -18.3$ et $\sigma^2 = 15846$ ont été estimés à partir des ν_i . On écrit alors

$$(\hat{k}, \hat{\alpha}) = \phi(\xi^1, \dots, \xi^{10})$$

où $\xi^i = (\nu_i - \mu)/\sigma$ pour $i = 1, \dots, 10$, soit encore

$$\begin{aligned} \hat{k} &= \phi_1(\xi^1, \dots, \xi^{10}) \\ \hat{\alpha} &= \phi_2(\xi^1, \dots, \xi^{10}). \end{aligned}$$

Générons maintenant des données $(\boldsymbol{\xi}_j)_{j=1, \dots, N}$ avec $N = 50$ par exemple et calculons les réalisations correspondantes $(\hat{k}_j, \hat{\alpha}_j)$. Le jeu de données $(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{k}_j)_{j=1, \dots, N}$ va nous servir à estimer ϕ_1 par $\hat{\phi}_1$ de même que le jeu de données $(\boldsymbol{\xi}_j, \hat{\alpha}_j)_{j=1, \dots, N}$ pour estimer $\hat{\phi}_2$.

Pour $\hat{\phi}_1$ et $\hat{\phi}_2$ on utilise un noyau gaussien et une fonction de coût L^1 . De plus, la constante de régularisation et le paramètre du noyau sont dans les deux cas estimés par validation croisée ordinaire. Une fois obtenues les estimations SVR $\hat{\phi}_1$ et $\hat{\phi}_2$, on génère $B = 10000$

nouvelles données supplémentaires $(\boldsymbol{\xi}_j)_{j=1,\dots,B}$ pour évaluer la capacité de généralisation de nos estimations et on calcule donc

$$\begin{aligned}\tilde{k}_j &= \hat{\phi}_1(\boldsymbol{\xi}_j) \\ \tilde{\alpha}_j &= \hat{\phi}_2(\boldsymbol{\xi}_j)\end{aligned}$$

pour $j = 1, \dots, B$. Parallèlement nous effectuons la procédure bootstrap sur les données supplémentaires $(\boldsymbol{\xi}_j)_{j=1,\dots,B}$, c'est-à-dire que l'on évalue par optimisation

$$\begin{aligned}\hat{k}_j &= \phi_1(\boldsymbol{\xi}_j) \\ \hat{\alpha}_j &= \phi_2(\boldsymbol{\xi}_j)\end{aligned}$$

pour $j = 1, \dots, B$. La distribution empirique des $(\hat{k}_j)_{j=1,\dots,B}$ et $(\hat{\alpha}_j)_{j=1,\dots,B}$ est la distribution bootstrap, alors que la distribution empirique des $(\tilde{k}_j)_{j=1,\dots,B}$ et $(\tilde{\alpha}_j)_{j=1,\dots,B}$ est la distribution approchée du bootstrap avec seulement $N = 50$ optimisations. Ces deux distributions sont comparées dans la figure 3.8. La région de confiance utilisant l'échantillon bootstrap et la région de confiance approchée par SVR sont aussi comparées dans la figure 3.8.

Les résultats montrent une très bonne capacité de généralisation de la SVR. En effet, les deux distributions empiriques sont quasiment indiscernables. La SVR nous permet donc de générer des échantillons de variables aléatoires de loi très proche de la loi de l'estimateur bootstrap, mais en réduisant de manière très significative le nombre d'optimisations et par conséquent le temps CPU nécessaire pour obtenir un échantillon.

Application à l'isomérisation du n-butane

Rappelons que dans la section 3.3.4 nous avons étudié les résidus d'un premier modèle qui ne satisfaisait pas les hypothèses du bootstrap, ce qui nous a conduit à utiliser le modèle logarithmique de la forme

$$\log(\mathbf{Y}_i^{(0)}) = \log(\mathbf{f}^{(0)}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0)) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

que l'on reformule en

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

où $\mathbf{Y}_i = \log(\mathbf{Y}_i^{(0)})$ et $\mathbf{f} = \log(\mathbf{f}^{(0)})$. Rappelons aussi les significations physiques des différentes variables :

- $\mathbf{Y}^{(0)} = (Y^1, Y^2)$, Y^1 fraction molaire de nC4, Y^2 fraction molaire de C3 et C5 (regroupés). \mathbf{Y} est donc un vecteur de dimension 2. La troisième composante de $\mathbf{Y}^{(0)}$ (fraction molaire de iC4) n'est pas incluse ici car les trois sorties sont liées (la somme des fractions molaires vaut 1) ;
- $\mathbf{c} = (T, \text{ppH}, \text{H}_2/\text{HC}, \text{nC4}_0)$ est le vecteur des conditions opératoires ;
- $\boldsymbol{\theta}_0 = (P_1, \dots, P_8)$ est le vecteur des 8 paramètres inconnus.

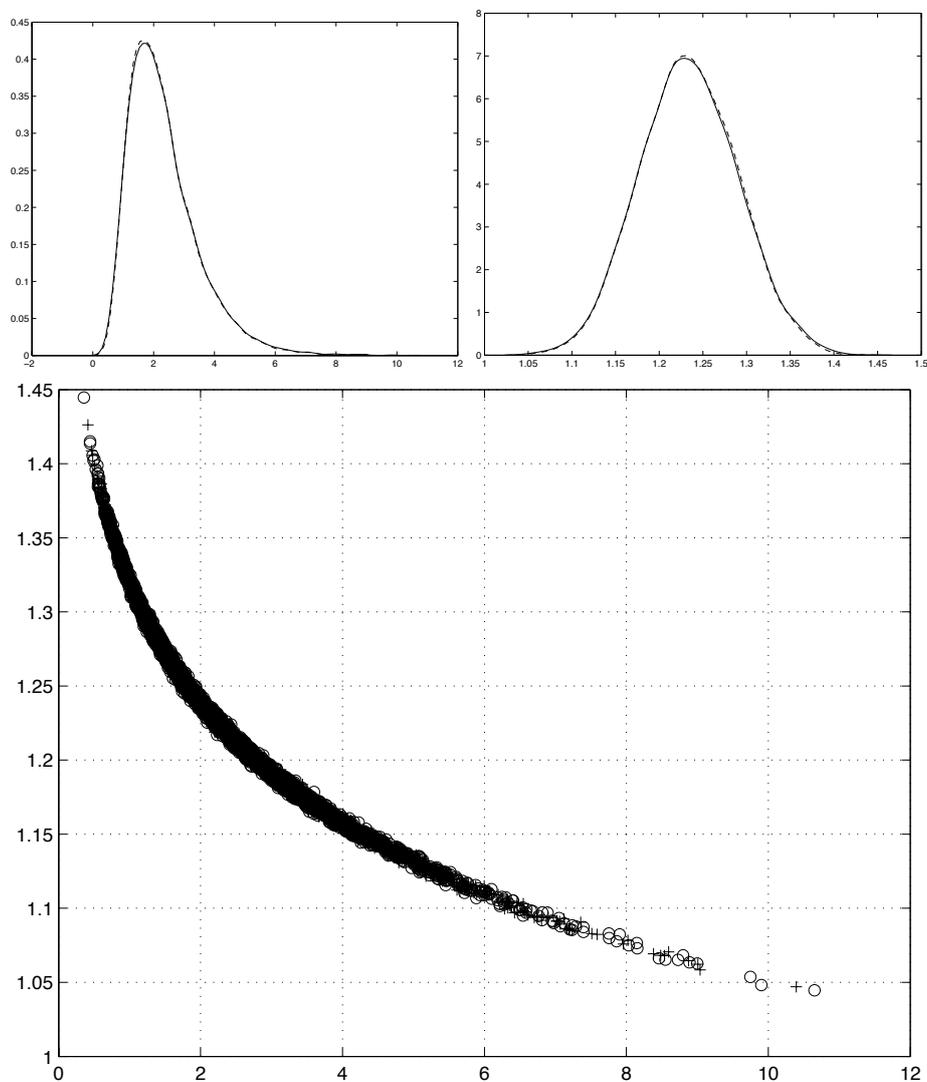


FIG. 3.8 – Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et $\hat{\alpha}$ par SVR (haut). En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée. Région de confiance approchée par SVR (bas). Les croix représentent les réalisations de l'estimateur bootstrap et les ronds celles de l'estimateur SVR du bootstrap. Les réalisations de \hat{k} sont en abscisse et celles de $\hat{\alpha}$ en ordonnée.

On dispose de $n = 63$ mesures expérimentales $(\mathbf{Y}_i^{(0)}, \mathbf{c}_i)_{i=1, \dots, n}$ c'est-à-dire de manière équivalente de données $(\mathbf{Y}_i, \mathbf{c}_i)_{i=1, \dots, n}$. En suivant la procédure décrite dans la section 3.5.4 on est alors ramené à estimer les fonctions ϕ_j telle que

$$\hat{\theta}_n^*(j) = \phi_j(\boldsymbol{\xi}) = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r)$$

où $r = nq = 63 \cdot 2 = 126$ et $1 \leq j \leq 8$ (dimension du vecteur $\boldsymbol{\theta}$). Pour estimer ces 8 fonctions par SVR, nous allons générer des données d'apprentissage $(\boldsymbol{\xi}_l, \hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*)_{l=1, \dots, m}$ pour $m = 200$, c'est-à-dire que l'on génère 200 jeux de résidus bootstrap et que l'on effectue une optimisation sur chacun de ces jeux pour calculer la valeur de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*$ correspondante soit en tout 200 optimisations (temps CPU de l'ordre de la journée en tout). Pour estimer ϕ_j on utilise alors les données $(\boldsymbol{\xi}_l, \hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*(j))_{l=1, \dots, m}$.

Pour chacune des fonctions ϕ_j nous avons utilisé un noyau gaussien de paramètre fixé par validation croisée ordinaire, ainsi qu'une fonction de coût L^1 et une constante de régularisation choisie elle aussi par validation croisée ordinaire. Nous avons ainsi obtenu les fonctions $\hat{\phi}_j$ pour $1 \leq j \leq 8$ qui approchent les fonctions ϕ_j . Pour tester la capacité de généralisation de chacune d'entre elles, on génère des données supplémentaires $(\boldsymbol{\xi}_l)_{l=1, \dots, B}$ avec $B = 1000$, ce qui permet d'obtenir un échantillon

$$\tilde{\theta}_l^*(j) = \hat{\phi}_j(\boldsymbol{\xi}_l)$$

pour $l = 1, \dots, B$ et $1 \leq j \leq 8$ et où l'on a oublié la dépendance en n de $\tilde{\theta}_n^*(j)$ pour simplifier les notations. La distribution empirique de $\tilde{\theta}^*(j)$ obtenue à l'aide de cet échantillon est comparé à un échantillon bootstrap classique de taille $B = 1000$ dans la figure 3.9.

Les résultats obtenus montrent comme pour le modèle HDS que l'approximation par SVR est excellente pour tous les paramètres sauf le septième, avec seulement 200 optimisations. En effet regardons de plus près la prédiction pour le paramètre P7. Les distributions empiriques sont présentées dans la figure 3.10.

Pour ce paramètre, la prédiction ne réussit pas à rendre compte de la queue de la distribution bootstrap. Avec seulement 200 points la fonction ϕ_7 n'est donc pas suffisamment bien approchée. Nous verrons dans la section 3.5.6 comment résoudre ce problème sans avoir à augmenter le nombre de points.

Application à l'isomérisation du n-pentane

Appliquons maintenant la régression SVR à l'approximation de l'estimateur bootstrap du modèle de l'isomérisation du n-pentane. Le modèle est le suivant :

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}_0) + \boldsymbol{\epsilon}_i$$

où les différentes variables sont :

- $\mathbf{Y} = (Y^1, \dots, Y^{15})$, les Y^i étant les fractions molaires des treize sorties du modèle ;
- \mathbf{c} est le vecteur des conditions opératoires et de charge ;

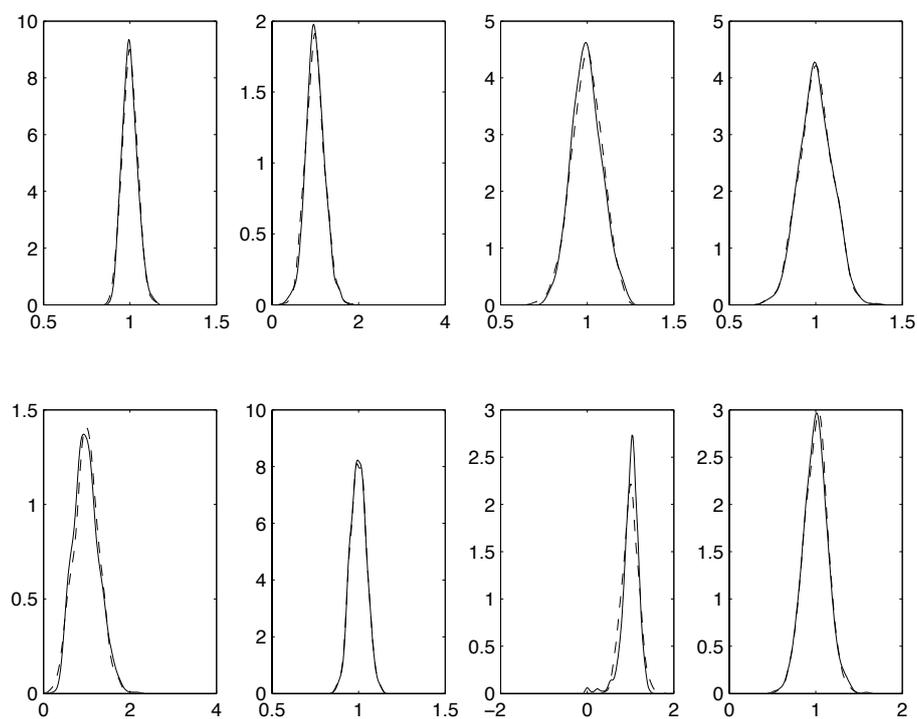


FIG. 3.9 – Distribution approchée des paramètres de l'isomérisation du n-butane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

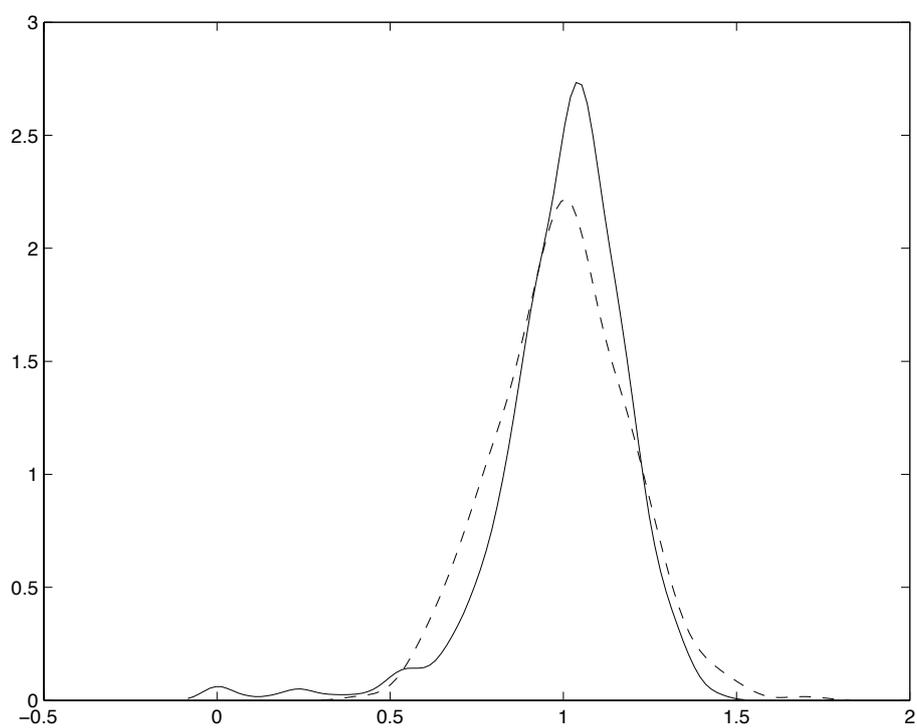


FIG. 3.10 – Distribution approchée du paramètre P7 de l'isomérisation du n-butane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

– $\boldsymbol{\theta}_0 = (P_1, \dots, P_{20})$ est le vecteur des 20 paramètres inconnus.

On dispose de $n = 59$ mesures expérimentales $(\mathbf{Y}_i, \mathbf{c}_i)_{i=1, \dots, n}$. En suivant la procédure décrite dans la section 3.5.4 on est alors ramené à estimer les fonctions ϕ_j telle que

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^*(j) = \phi_j(\boldsymbol{\xi}) = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r)$$

où $r = nq = 59 \times 15 = 885$ et $1 \leq j \leq 20$ (dimension du vecteur $\boldsymbol{\theta}_0$). Pour estimer ces 20 fonctions par SVR, nous allons générer des données d'apprentissage $(\boldsymbol{\xi}_l, \hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*)_{l=1, \dots, m}$ pour $m = 250$, c'est-à-dire que l'on génère 250 jeux de résidus bootstrap et que l'on effectue une optimisation sur chacun de ces jeux pour calculer la valeur de $\hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*$ correspondante soit en tout 250 optimisations (temps CPU de l'ordre de la journée en tout). Pour estimer ϕ_j on utilise alors les données $(\boldsymbol{\xi}_l, \hat{\boldsymbol{\theta}}_l^*(j))_{l=1, \dots, m}$.

Pour chacune des fonctions ϕ_j nous avons utilisé un noyau gaussien de paramètre fixé par validation croisée ordinaire, ainsi qu'une fonction de coût L^1 et une constante de régularisation choisie elle aussi par validation croisée ordinaire. Nous avons ainsi obtenu les fonctions $\hat{\phi}_j$ pour $1 \leq j \leq 20$ qui approchent les fonctions ϕ_j . Pour tester la capacité de généralisation de chacune d'entre elles, on génère des données supplémentaires $(\boldsymbol{\xi}_l)_{l=1, \dots, B}$ avec $B = 1000$, ce qui permet d'obtenir un échantillon

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_l^*(j) = \hat{\phi}_j(\boldsymbol{\xi}_l)$$

pour $l = 1, \dots, B$ et $1 \leq j \leq 20$ et où l'on a oublié la dépendance en n de $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_l^*(j)$ pour simplifier les notations. La distribution empirique de $\tilde{\boldsymbol{\theta}}^*(j)$ obtenue à l'aide de cet échantillon est comparé à un échantillon bootstrap classique de taille $B = 1000$ dans les figures 3.11, 3.12, 3.13, 3.14 et 3.15.

Comme dans le cas de l'isomérisation du n-butane, les approximations SVR avec seulement 250 points (c'est-à-dire 250 optimisations bootstrap) sont excellentes malgré la dimension du problème (SVR dans un espace de dimension $r = 885$ pour les entrées). Les seules approximations qui sont moins bonnes sont celles obtenues pour les paramètres qui présentent une queue de distribution marquée, par exemple les paramètres P15 ou P19. Nous avons déjà remarqué ce phénomène pour l'isomérisation du n-butane, et nous proposons dans la section suivante une méthode permettant d'améliorer cette estimation. Remarquons enfin que le paramètre σ^2 du noyau gaussien choisi par validation croisée ordinaire est élevé, et ce pour chacune des 20 approximations SVR. Autrement dit, nous travaillons en très grande dimension ($r = 885$) mais l'on impose aux approximations d'être extrêmement régulières (voir la remarque sur le lien entre σ^2 et la régularité dans la section 3.5.2 sur les RKHS).

3.5.6 Utilisation des dérivées en SVR et applications

Dans cette partie nous nous intéressons maintenant à l'introduction d'information sur les dérivées du modèle pour améliorer la capacité de prédiction d'une SVR, comme nous l'avons fait pour les polynômes de chaos dans la section 3.4.7. Nous reprenons donc les explications de cette section : rappelons que l'estimateur bootstrap peut s'écrire :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r).$$

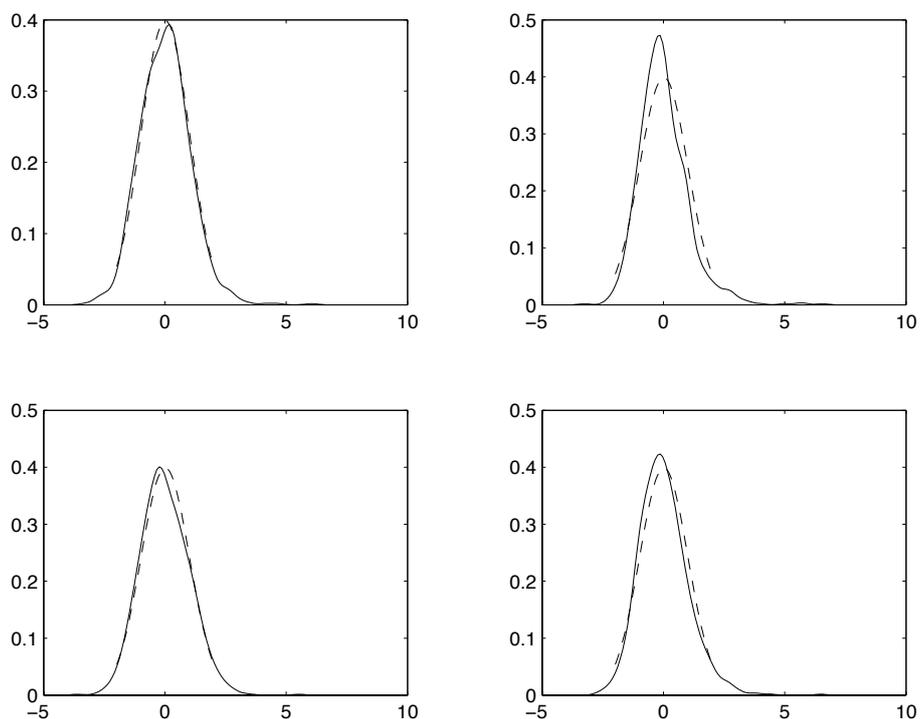


FIG. 3.11 – Distribution approchée des paramètres P1 à P4 de l'isomérisation du n-pentane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

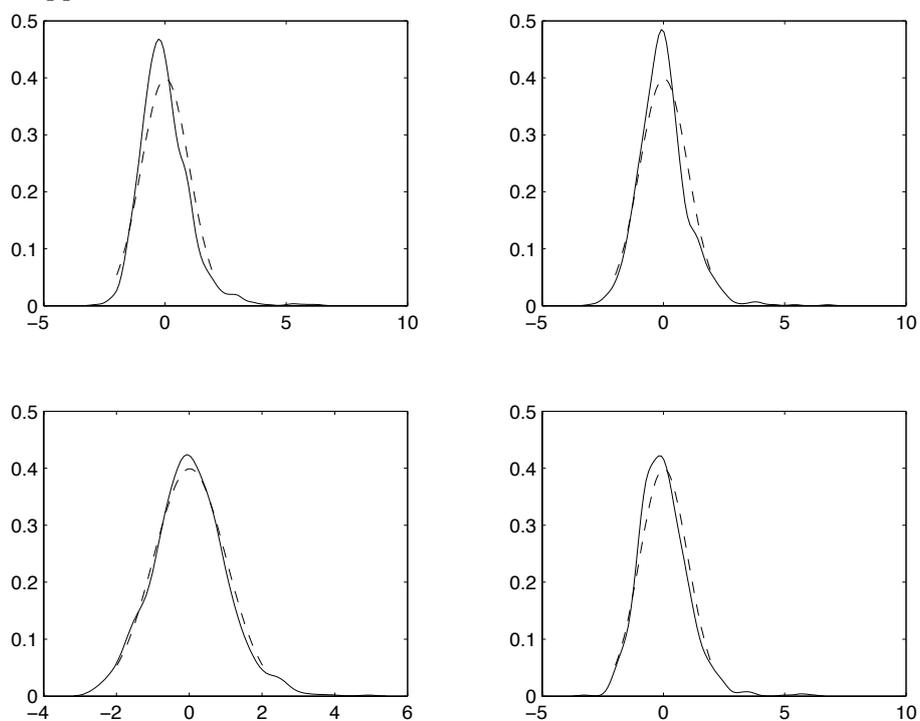


FIG. 3.12 – Distribution approchée des paramètres P5 à P8 de l'isomérisation du n-pentane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

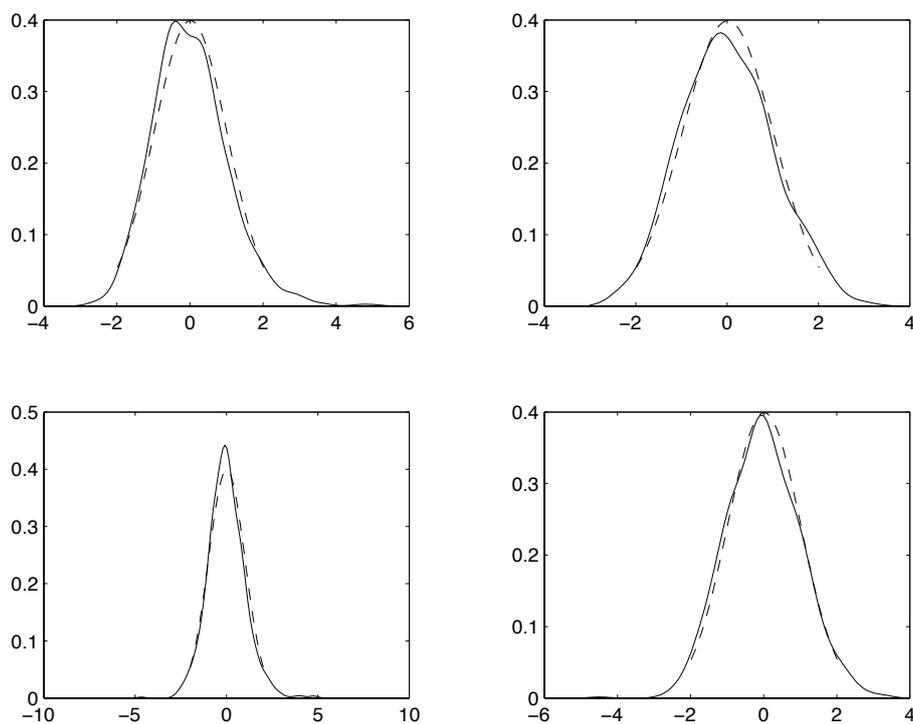


FIG. 3.13 – Distribution approchée des paramètres P9 à P12 de l'isomérisation du n-pentane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

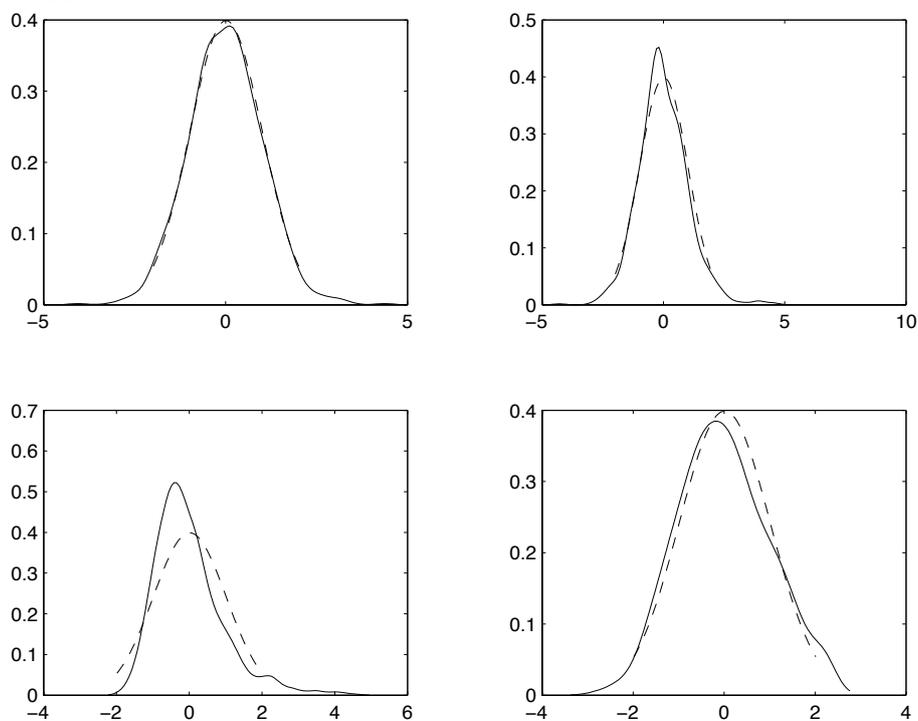


FIG. 3.14 – Distribution approchée des paramètres P13 à P16 de l'isomérisation du n-pentane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

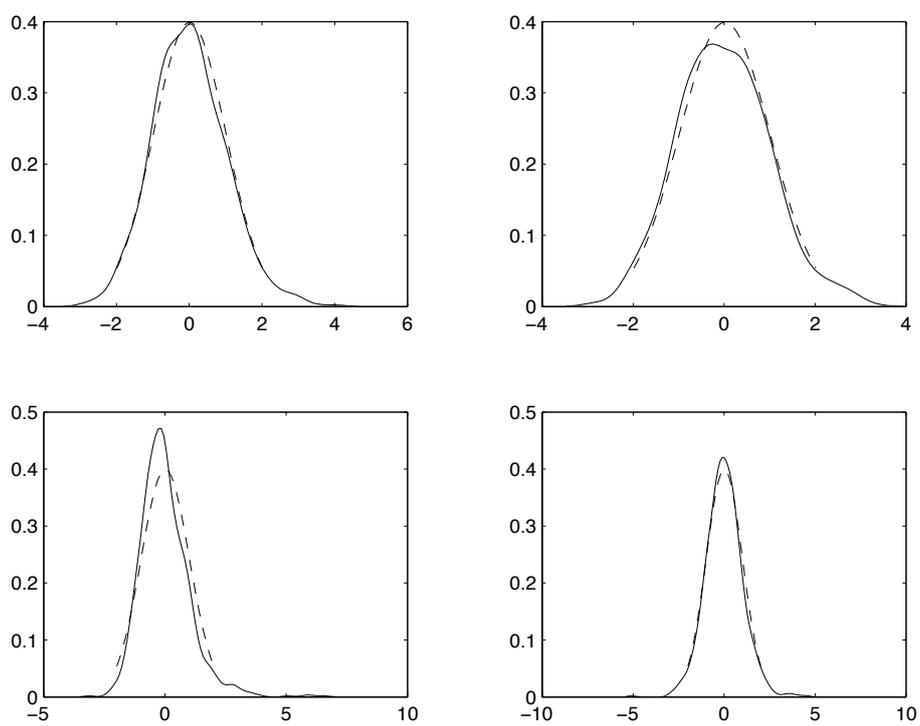


FIG. 3.15 – Distribution approchée des paramètres P17 à P20 de l'isomérisation du n-pentane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

On supposera ici sans perte de généralité que $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est de dimension 1. On pourra étendre les résultats facilement à une dimension quelconque puisque dans le cas général chaque composante de $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*$ est approchée individuellement. On approche ϕ par SVR à l'aide de données d'apprentissage. On a vu précédemment que connaître les dérivées de ϕ permet de réduire grandement le nombre de données nécessaires pour la régression.

Ici l'expression de ϕ est complexe car obtenue à partir d'une minimisation. Cependant le théorème des fonctions implicites permet d'exprimer les dérivées de ϕ en fonction de celle de la fonction \mathbf{f} du modèle. On a

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \\ &= \arg \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta} G(\boldsymbol{\theta}, \xi^1, \dots, \xi^r).\end{aligned}$$

On peut alors écrire que

$$\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{\theta}}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^*, \xi^1, \dots, \xi^r) = 0.$$

Le théorème des fonctions implicites implique que $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^* = \phi(\xi^1, \dots, \xi^r)$ et en dérivant il vient

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\xi}} + \frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}} = 0,$$

soit finalement

$$\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\xi}} = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2} \right)^{-1} \frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}}.$$

Or G s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{\theta}, \xi^1, \dots, \xi^r) &= \sum_{i=1}^n \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i - \mathbf{f}(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \frac{1}{\sigma_j^2} \left(f^j(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \boldsymbol{\nu}_i(j) - f^j(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \frac{1}{\sigma_j^2} \left(f^j(\mathbf{c}_i, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{obs}}) + \xi_l - f^j(\mathbf{c}_i, \boldsymbol{\theta}) \right)^2\end{aligned}$$

où $l = i, j$, f^j est la j -ième composante de \mathbf{f} et $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_q^2)$. Cette dernière expression de G permet donc d'exprimer directement les matrices $\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta}^2}$ et $\frac{\partial^2 G}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\xi}}$ en fonction des dérivées premières et secondes de \mathbf{f} par rapport aux paramètres $\boldsymbol{\theta}$. Par conséquent si les dérivées premières et secondes de la fonction \mathbf{f} du modèle par rapport aux paramètres sont connues, les dérivées partielles de la fonction ϕ le sont elles aussi.

Le principal point qu'il nous reste à examiner concerne la façon de tenir compte des valeurs des dérivées de ϕ pour calculer $\hat{\phi}$. Si cette question était facile à traiter pour les polynômes de chaos, ce n'est plus le cas en SVR. En effet elle rentre dans le cadre du problème de

l'estimation simultanée d'une fonction et de ses dérivées. Deux méthodes ont été proposées dans la littérature.

La première est basée sur des résultats concernant les processus gaussiens qui, replacé dans le cadre de la régression régularisée dans un RKHS, peuvent être appliqués en SVR. Elle repose sur l'estimation de plusieurs sorties simultanément (Vasquez and Walter 2003) qui a par la suite été étendue à l'estimation d'une sortie et de ses dérivées (Vasquez and Walter 2005). Cette méthode requiert peu de changements dans la procédure de recherche de la solution SVR, en effet elle rajoute tout simplement une coordonnée au vecteur des entrées \mathbf{x} noté β , qui peut prendre des valeurs comprises entre 1 et p où p est la taille du vecteur des sorties. Les auteurs définissent alors un noyau de la forme $k([\mathbf{x} \ \beta], [\mathbf{x}' \ \beta'])$ et son RKHS associé. La procédure reste donc inchangée puisque l'on travaille toujours sur le même type de fonctionnelle (risque empirique et terme de régularisation) à minimiser, la seule différence étant un noyau défini sur un ensemble de dimension plus grande.

La seconde méthode a été proposée par Lázaro, Santamaría, Pérez-Cruz and Artés-Rodríguez (2003) pour une seule sortie et une dérivée pour une fonction de coût ϵ -insensible. Elle est basée sur l'idée de rajouter des contraintes supplémentaires dans la minimisation de la norme de l'hyperplan \mathbf{w} , ou de manière équivalente un terme de pénalité supplémentaire dans la minimisation. Ce terme est une contrainte sur les valeurs de la dérivées, dont l'erreur doit être comprise dans un tube de largeur ϵ' . L'inconvénient de cette méthode est que la solution n'est plus obtenue par résolution d'un problème QP et nécessite d'avoir recours à un algorithme itératif appelé IRWLS (*Iterative Weighted Least Squares*), voir Pérez-Cruz, Alarcón-Diana and Artés-Rodríguez (2000). Cette idée a par la suite été étendue à un nombre de sorties et de dérivées quelconques pour une fonction de coût L^2 , voir Pérez-Cruz, Alarcón-Diana and Artés-Rodríguez (2004) ou Lázaro, Santamaría, Pérez-Cruz and Artés-Rodríguez (2005) pour deux approches différentes, la première utilisant des résolutions itératives de systèmes linéaires et la seconde l'algorithme IRWLS.

Ici nous ne donnons pas de détails sur ces différentes méthodes. Présentons tout d'abord le résultat obtenu avec la méthode de Lázaro et al. (2005) sur le modèle HDS avec $N = 10$ données d'apprentissage et les $r = 10$ dérivées partielles. Les distributions approchées des paramètres sont représentées dans la figure 3.16, ainsi que la région de confiance approchée. On peut remarquer que l'on obtient la même qualité d'approximation que précédemment avec cette fois seulement $N = 50$ points.

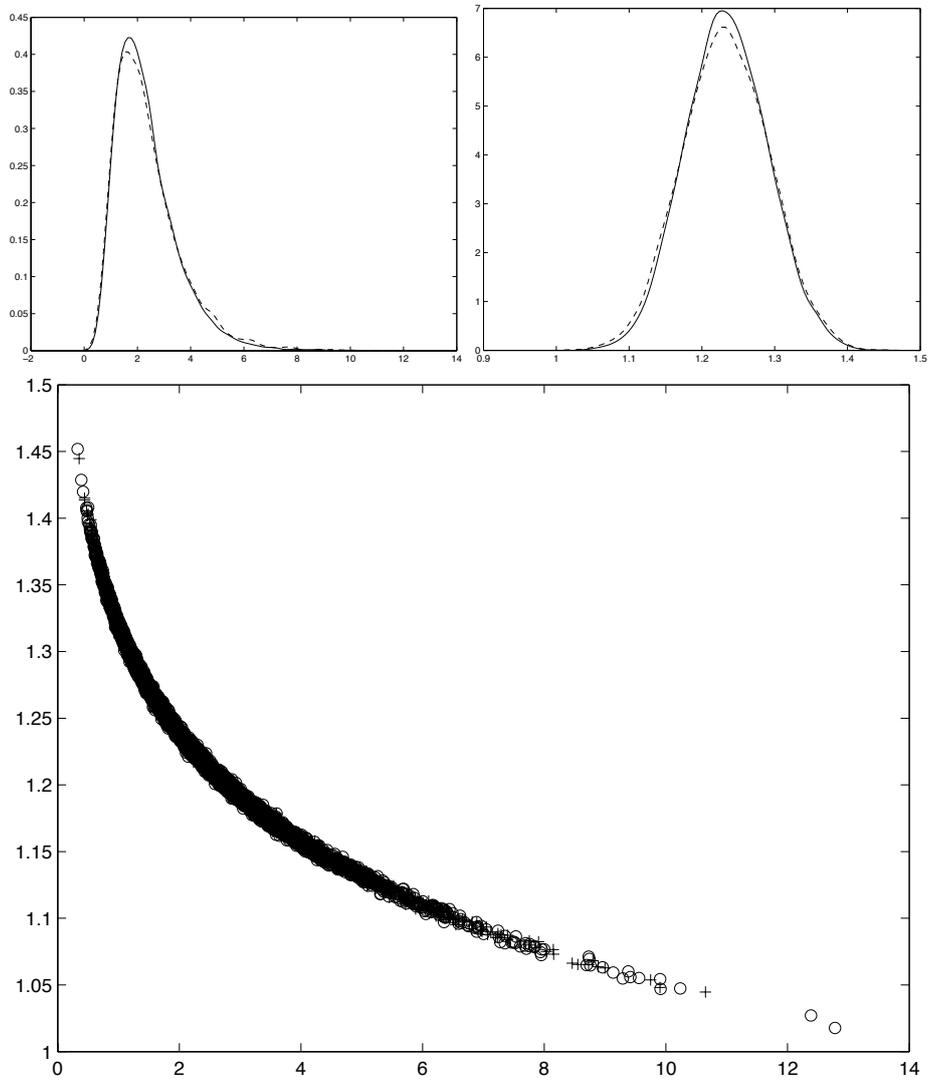


FIG. 3.16 – Distribution approchée des estimateurs \hat{k} et \hat{a} par SVR et dérivées (haut). En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée. Région de confiance approchée par SVR et dérivées (bas). Les croix représentent les réalisations de l'estimateur bootstrap et les ronds celles de l'estimateur SVR du bootstrap. Les réalisations de \hat{k} sont en abscisse et celles de \hat{a} en ordonnée.

Nous nous intéressons ensuite à l'utilisation de la méthode de Lázaro et al. (2005) sur l'isomérisation du n-butane avec 50 données d'apprentissage et les valeurs des $r = 126$ dérivées partielles. Nous utilisons 50 optimisations bootstrap, contre 250 précédemment. Les distributions approchées des 8 paramètres sont représentées dans la figure 3.17, et nous insistons plus particulièrement sur le paramètre P7 dans la figure 3.18.

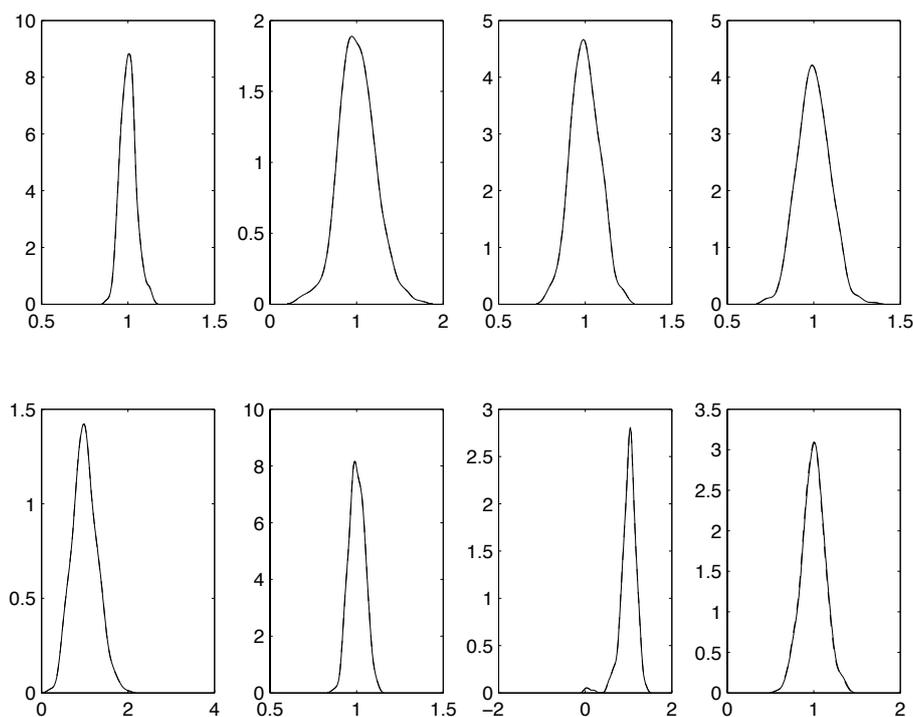


FIG. 3.17 – Distribution approchée des paramètres de l'isomérisation du n-butane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée.

Contrairement à ce qu'il se passait précédemment pour P7 avec 250 optimisations, ici nous arrivons à rendre compte parfaitement de la queue de distribution de P7. Nous disposons avec les dérivées de l'équivalent de $127 \times 50 = 6350$ données d'apprentissage, ce qui nous permet d'approcher beaucoup plus précisément la fonction ϕ_7 .

3.5.7 Limitations de l'approche par SVR

La méthode SVR pour approcher la loi de l'estimateur bootstrap des paramètres d'un modèle de régression donne des résultats tout à fait satisfaisants comme nous l'avons souligné dans les sections précédentes. Cependant, cette approche ne rend pas toujours compte d'éventuelles queues de distribution plus importantes que celle d'une gaussienne par exemple.

L'ajout d'information pour les dérivées permet de régler ce problème mais souffre de deux défauts importants. D'une part, il faut pouvoir avoir accès aux dérivées secondes du modèle

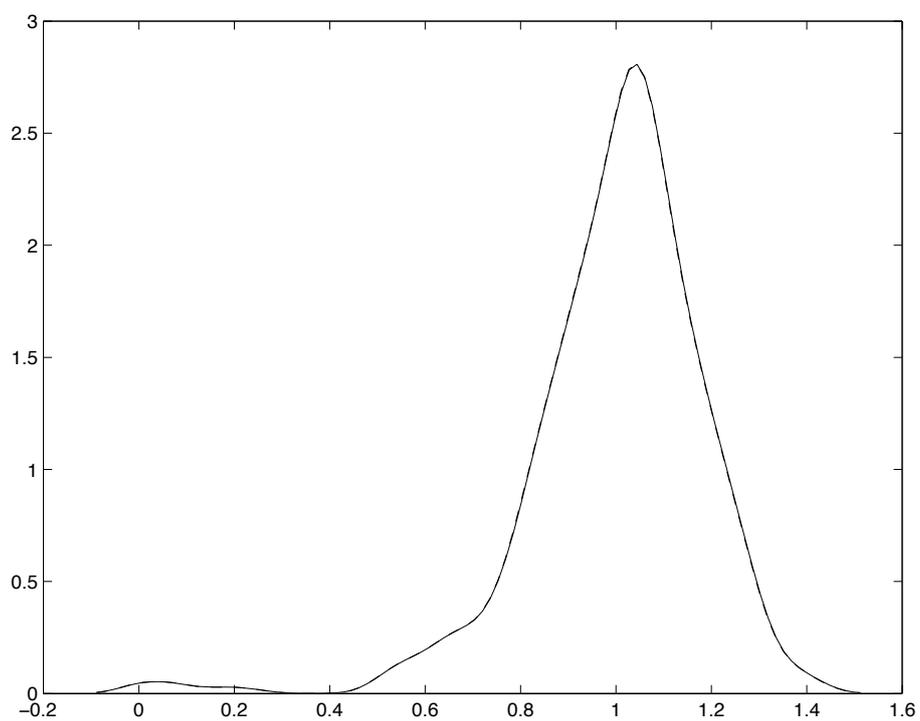


FIG. 3.18 – Distribution approchée du paramètre P7 de l'isomérisation du n-butane par SVR. En trait plein la distribution empirique bootstrap et en pointillé la distribution empirique approchée. On remarquera ici qu'elles sont indiscernables.

de régression. Dans le modèle HDS elles s'obtiennent analytiquement. Dans le cas général en revanche, il faut envisager des outils adaptés. La différentiation automatique de code est une des solutions (Corliss, Faure, Griewank, Hascoet and Naumann 2000), tout comme les méthodes adjointes. On peut aussi dans un premier temps approcher les dérivées par différence finie. Mais à l'exception de cette dernière idée, les méthodes de différentiation automatique et les méthodes adjointes peuvent être difficiles à mettre en place. La solution que nous avons adopté pour l'isomérisation du n-butane repose sur les méthodes adjointes. Par ailleurs, la méthode de Lázaro et al. (2005) pour prendre en compte les dérivées impose de travailler sur des matrices de dimension $(1 + r)N \times (1 + r)N$. Nous avons pu faire ces calculs pour l'isomérisation du n-butane, dont nous avons présenté les résultats dans la section précédente. Le cas de l'isomérisation du n-pentane ne peut être traité avec cette méthode avec un temps de calcul raisonnable. Il implique, en effet, de manipuler par exemple des matrices de dimension 8000×8000 si l'on choisit $N = 20$ seulement.

Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité est l'étude qui suit une analyse d'incertitudes pour laquelle nous avons introduit diverses méthodes au chapitre précédent.

Nous nous placerons dans ce chapitre dans le cadre d'un modèle général de la forme

$$Y = \eta(\mathbf{X}) \tag{4.1}$$

où $\eta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $Y \in \mathbb{R}$, $X = (X_1, \dots, X_d)$. Nous proposons dans un premier temps de discuter du problème des facteurs corrélés en analyse de sensibilité, et montrons que les méthodes existantes ne sont pas entièrement satisfaisantes pour estimer les indices de sensibilité. Nous présentons ensuite deux approches originales pour les estimer dans le cas de facteurs corrélés. La première approche repose sur l'utilisation d'outils non-paramétriques, en passant par l'estimation de moments conditionnels par polynômes locaux. Nous exhibons quelques-unes de ses propriétés de convergence et nous la testons à la fois sur des modèles analytiques et sur l'isomérisation du n-butane. La seconde approche repose quant à elle sur des techniques semi-paramétriques sur l'estimation d'intégrales de fonctionnelles de densité. Nous lui consacrons la troisième partie de ce chapitre où nous montrons que cet estimateur atteint bien asymptotiquement la vitesse de convergence optimale. Nous l'étudions également sur des modèles analytiques.

4.1 Le problème des facteurs corrélés

Nous commençons tout d'abord par commenter quelques difficultés dues à des facteurs qui ne sont pas indépendants, et notamment la difficulté d'interprétation des indices de sensibilité dans ce cas.

Quand les facteurs sont indépendants, nous avons vu précédemment que la somme des indices de sensibilité est égale à 1. Cette propriété découle d'une décomposition orthogonale de la fonction η , voir la section 2.2.3 par exemple. Les indices de sensibilité sont donc

des quantités naturelles issues de cette décomposition ANOVA fonctionnelle. Cependant, quand les facteurs sont corrélés, cette propriété n'est plus vérifiée car une telle décomposition ne peut pas être effectuée sans prendre en compte la loi jointe des facteurs. Si les facteurs sont corrélés mais que l'on décide d'estimer malgré tout les indices de sensibilité avec des méthodes qui les supposent indépendants, les résultats obtenus et leur interprétation peuvent être erronés. Cela revient ici à négliger des corrélations alors qu'elles sont bien présentes. Regardons par exemple le modèle analytique suivant :

$$Y = X_1 + X_2 + X_3$$

où $(X_1, X_2; X_3)$ est un vecteur gaussien de moyenne nulle et de matrice de variance-covariance

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho\sigma \\ 0 & \rho\sigma & \sigma^2 \end{bmatrix}.$$

Ici ρ est la corrélation entre X_2 et X_3 et σ est l'écart-type de X_3 . Les indices de sensibilité de premier ordre peuvent être calculés analytiquement :

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2 + \sigma^2 + 2\rho\sigma} \\ S_2 &= \frac{(1 + \rho\sigma)^2}{2 + \sigma^2 + 2\rho\sigma} \\ S_3 &= \frac{(\sigma + \rho)^2}{2 + \sigma^2 + 2\rho\sigma} \end{aligned}$$

Par exemple dans le cas où $\sigma = 1.2$ et $\rho = -0.8$, on a

$$S_1 = 0.6579, \quad S_2 = 0.0011, \quad S_3 = 0.1053.$$

Ces valeurs indiquent que X_1 devrait être la variable à fixer pour réduire le plus la variance de Y . Imaginons que l'on néglige maintenant la corrélation, en estimant par exemple les indices de sensibilité avec la méthode FAST (voir chapitre 2). Ne pas tenir compte ici de la corrélation revient à travailler sur le modèle ci-dessus avec la matrice de variance-covariance D au lieu de Γ , avec

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 \end{bmatrix}.$$

Dans ce cas, la méthode FAST va estimer les indices de sensibilité suivants :

$$S_1^0 = 0.2907, \quad S_2^0 = 0.2907, \quad S_3^0 = 0.4186$$

où S^0 représente les indices de sensibilité calculés avec $\rho = 0$. Ces résultats indiquent que X_3 devrait être fixé pour atteindre la plus grande réduction de variance, ce qui est incorrect compte tenu des résultats obtenus précédemment. Cet exemple simple illustre le danger de négliger les corrélations et l'importance de les prendre en compte dans le calcul des indices de sensibilité.

Notons qu'il est malgré tout possible de travailler avec la décomposition ANOVA et les

indices de sensibilité sans ignorer les corrélations. Si l'on adopte cette approche, le calcul de l'indice de sensibilité de premier ordre par rapport à un facteur donné intègre en plus la sensibilité de tous les autres facteurs corrélés avec lui. La même information est alors prise en compte plusieurs fois. L'interprétation des indices de sensibilité devient alors problématique. Cependant si l'interprétation des indices de sensibilité n'est plus aussi directe que dans le cas de facteurs indépendants, les indices de sensibilité identifient le facteur qui, fixé, réduira le plus la variance de la sortie (que les facteurs soient indépendants ou non). Ainsi, si l'objectif est de mener une hiérarchisation des facteurs ("Factors Prioritisation", c'est-à-dire identifier le facteur à fixer pour atteindre la plus grande réduction de la variance de la sortie), il est important de souligner que **les indices de sensibilité de premier ordre classiques sont la mesure d'importance à étudier**, voir Saltelli et al. (2004). Le développement de méthodes pour estimer les indices de sensibilité du premier ordre dans le cadre général a donc un intérêt évident. Trois méthodes intéressantes ont été proposées dans la littérature concernant ce problème.

La première d'entre elles a été introduite par Jacques, Lavergne and Devictor (2004) et propose d'étendre la définition des indices de sensibilité pour construire des indices de sensibilité multidimensionnels. Jacques et al. (2004) suggèrent de séparer \mathbf{X} en p vecteurs \mathbf{U}_j , $j = 1, \dots, p$, chacun de taille k_j tels que \mathbf{U}_j soit indépendant de \mathbf{U}_l pour $1 \leq j, l \leq p$, $j \neq l$:

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d) = \underbrace{(X_1, \dots, X_{k_1})}_{\mathbf{U}_1}, \underbrace{(X_{k_1+1}, \dots, X_{k_1+k_2})}_{\mathbf{U}_2}, \dots, \underbrace{\dots, X_{k_1+k_2+\dots+k_{p-1}+1}, \dots, X_{k_1+k_2+\dots+k_p}}_{\mathbf{U}_p}$$

où $k_1 + k_2 + \dots + k_p = d$. Par exemple, si $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ où X_1 est indépendant de X_2 et X_3 mais où X_2 et X_3 sont corrélés, on pose $\mathbf{U}_1 = X_1$ et $\mathbf{U}_2 = (X_2, X_3)$.

Ils construisent alors des *indices de sensibilité multidimensionnels du premier ordre* en utilisant les vecteurs \mathbf{U}_j :

$$\begin{aligned} S_j &= \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|\mathbf{U}_j))}{\text{Var}(Y)} \\ &= \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_{k_1+k_2+\dots+k_{j-1}+1}, \dots, X_{k_1+k_2+\dots+k_j}))}{\text{Var}(Y)} \end{aligned}$$

pour $j = 1, \dots, p$. On peut remarquer que dans le cas où les facteurs sont indépendants, ces indices de sensibilité ont la même expression qu'en analyse de sensibilité classique. Finalement, il est possible de les calculer par une méthode de Monte-Carlo comme dans le cas de la méthode de Sobol si la dimension de \mathbf{X} n'est pas trop élevée, voir chapitre 2.

Cependant, cette approche possède un inconvénient majeur. Si tous les facteurs sont corrélés entre eux, les vecteurs \mathbf{U}_j ne peuvent pas être définis (à l'exception du cas trivial $\mathbf{U}_1 = \mathbf{X}$) et l'interprétation n'est pas possible. Le problème demeure si beaucoup de facteurs sont corrélés car cette situation conduit à considérer peu d'indices multidimensionnels.

En outre, identifier un ensemble de variables corrélées \mathbf{U}_j ayant un indice de sensibilité important ne permet pas d'expliquer si ceci est dû à un facteur en particulier puisque l'on ne peut pas différencier les facteurs à l'intérieur d'un ensemble.

La seconde technique développée a été introduite par Ratto et al. (2001). Elle étend la méthode de McKay (1996) que nous avons rappelée dans la section 2.2.3 au cas de facteurs corrélés. La procédure reste identique, à la seule différence que l'échantillonnage par hypercube latin répliqué doit se faire selon la loi jointe des facteurs. Cet échantillonnage est basé sur les travaux de McKay, Beckman and Conover (1979), cependant nous ne détaillerons pas cette approche plus précisément.

Nous tenons principalement à insister sur le fait que cette méthode nécessite un nombre très élevé d'évaluations de la fonction $\eta(\cdot)$ pour espérer atteindre une précision raisonnable, comme nous l'avons déjà souligné dans la section 2.2.3. Elle ne peut donc être utilisée que dans le cas où une évaluation de la fonction est très peu coûteuse.

La troisième technique découle directement de la méthode de Oakley and O'Hagan (2004) présentée dans le chapitre 2. Si dans leur article Oakley et O'Hagan présentent des résultats dans un cadre général (*i.e.* sans aucune hypothèse sur les paramètres), ils ne l'appliquent que dans un cas indépendant. Or c'est un cas simple dans la mesure où les intégrales multidimensionnelles intervenant dans leurs calculs sont séparables en intégrales unidimensionnelles faciles à estimer. Quand les facteurs sont corrélés cette simplification n'est pas possible et les intégrales multidimensionnelles sont à estimer (sauf dans le cas trivial où la loi jointe des paramètres est intégrable analytiquement). Etudions par exemple l'un des estimateurs intervenant dans le calcul des indices de sensibilité de premier ordre. En reprenant la notation des auteurs et en notant \mathbb{E}^* les espérances par rapport à la distribution *a posteriori* de $\eta(\cdot)$, le numérateur de l'indice de sensibilité de premier ordre de Y par rapport à X_1 est estimé par

$$\mathbb{E}^*(\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_1))) = \mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X_1)^2)) - \mathbb{E}^*(\mathbb{E}(Y)^2)$$

et l'une des quantités intervenant dans le calcul de $\mathbb{E}^*(\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X_1)^2))$ est par exemple

$$U_1 = \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \int_{\mathbb{R}} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) dF_{-1|1}(\mathbf{x}_{-1}|x_1) dF_{-1|1}(\mathbf{x}'_{-1}|x_1) dF_1(x_1)$$

où R est la fonction de corrélation du processus, $F_{-1|1}$ est la distribution conditionnelle de \mathbf{X}_{-1} (sous-vecteur de \mathbf{X} contenant tous les éléments sauf X_1) sachant X_1 , F_1 est la distribution marginale de X_1 et $\mathbf{x}^* = [x_1 \ \mathbf{x}'_{-1}]$. Si la distribution conditionnelle $F_{-1|1}$ n'est pas connue analytiquement, nous devons tout d'abord l'estimer à partir d'un échantillon de la distribution jointe F . Une manière classique de le faire est d'utiliser des techniques non-paramétriques basées sur des noyaux, plus précisément $dF_{-1|1}(\mathbf{x}_{-1}|x_1)$ peut par exemple être estimé par

$$\frac{1}{n} \frac{\sum_{i=1}^n \mathbf{K}_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)}{\sum_{i=1}^n K_{h_1}(x_1 - X_i^1)} d\mathbf{x}_{-1}$$

où X_i est le i -ème élément de l'échantillon de taille n du vecteur aléatoire $\mathbf{X} = (X^j)_{j=1,\dots,d}$, \mathbf{K}_h est un noyau multidimensionnel de vecteur de paramètres d'échelle \mathbf{h} et K_{h_1} un noyau de paramètre d'échelle h_1 . En général, en grande dimension les données sont distribuées de manière très diffuse et il est difficile d'obtenir une approximation précise de distributions conditionnelles (*fléau de la dimension*). Pour y remédier, on considère généralement des

noyaux produits $\mathbf{K}_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) = \prod_{j=1}^d K_{h_j}(x_j - X_i^j)$. Mais cette astuce ne résout pas entière-

ment le problème car il est connu que la meilleure vitesse de convergence est de l'ordre de $n^{-4/(4+d)}$ (Scott 1992). Ce taux diminue sévèrement quand d augmente.

Par ailleurs, même si l'on était capable d'obtenir une bonne approximation de $F_{-1|1}$, il reste toujours le problème d'évaluation numérique des intégrales multiples. En effet, la dimension de ces intégrales peut atteindre $2d - 1$ comme dans l'exemple de U_1 ci-dessus. Ces intégrales ne peuvent pas en général être séparées en intégrales simples. Pour les approcher de manière suffisamment précise, un échantillonnage Monte-Carlo ne peut être raisonnablement être envisagé. Il faut alors se tourner vers des méthodes plus sophistiquées telles que les approches par quasi Monte-Carlo (Owen 2005) sous des conditions appropriées sur F .

Pour les modèles de cinétique chimique, tous les estimateurs des paramètres sont corrélés et l'évaluation de la fonction de régression est en général coûteuse (rappelons qu'ici le vecteur des facteurs est composé des estimateurs des paramètres cinétiques, voir l'introduction du chapitre 2). Nous ne pouvons donc pas utiliser une des deux premières méthodes. Par ailleurs, la dimension du vecteur des facteurs est de l'ordre de la dizaine, ce qui interdit l'utilisation de la méthode de Oakley and O'Hagan (2004) (d'autant plus que la loi jointe des facteurs est inconnue).

Nous proposons dans la suite du chapitre deux autres techniques qui permettent de contourner le problème en travaillant directement sur les distributions marginales.

4.2 Polynômes locaux

De manière simplifiée, notre approche consiste à estimer les moments conditionnels $\mathbb{E}(Y|X_i = X_i^j)$ et $\text{Var}(Y|X_i = X_i^j)$ en utilisant une méthode intermédiaire entre celle de Ratto et al. (2001) et celle de Oakley and O'Hagan (2004). Nous utilisons d'abord un échantillon de (X_i, Y) pour estimer les moments conditionnels avec des outils non-paramétriques (sous l'hypothèse que ce sont des fonctions régulières de X_i). Nous calculons ensuite les estimateurs des indices de sensibilité grâce à un autre échantillon des facteurs (et ainsi aucune évaluation supplémentaire de la fonction n'est requise puisque l'on se sert des approximations que l'on vient de construire, nous reviendrons sur ce point crucial dans la section 4.2.2). Oakley and O'Hagan (2004) approchent la fonction $\eta(\mathbf{X})$ dans \mathbb{R}^d . Nous l'approchons marginalement, *i.e.* nous approchons les espérances conditionnelles $\mathbb{E}(\eta(\mathbf{X})|X_i)$ dans \mathbb{R} . Cette démarche permet d'éviter l'évaluation numérique d'intégrales multiples.

Pour simplifier les notations, jusqu'au paragraphe "procédure pratique" de la section 4.2.2, (X, Y) sera un vecteur aléatoire bidimensionnel (*i.e.* X est unidimensionnel). La variance

de Y peut être décomposée comme $\text{Var}(Y) = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) + \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$. Les indices de sensibilité que l'on cherche à estimer sont donc de la forme

$$S = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))}{\text{Var}(Y)} \text{ ou } S = 1 - \frac{\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))}{\text{Var}(Y)}.$$

Ces deux expressions permettent d'estimer S de deux façons : prédire d'abord l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(Y|X)$ puis estimer $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$, ou prédire d'abord la variance conditionnelle $\text{Var}(Y|X)$ pour estimer ensuite $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))$. Dans les deux cas le dénominateur peut être estimé de manière standard. Pour estimer les moments conditionnels, nous proposons d'utiliser la régression par polynômes locaux, outil statistique efficace mais surtout facile à appréhender car proche des moindres carrés pondérés utilisés en régression classique. Nous rappelons dans la première partie des généralités sur les techniques par polynômes locaux. Pour plus de détails, on pourra se référer à Fan and Gijbels (1996) ou Wand and Jones (1994). Dans un second temps nous présentons deux estimateurs des indices de sensibilité basés sur les polynômes locaux. Nous étudions ensuite quelques-unes de leurs propriétés théoriques. Nous donnons enfin des exemples de modèles analytiques et cinétiques.

4.2.1 Définition et propriétés théoriques

Définitions

Soit $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ un échantillon i.i.d de taille n d'un vecteur aléatoire (X, Y) . En supposant que X et Y sont de carré intégrable, on peut écrire un modèle de régression hétéroscédastique faisant apparaître l'espérance et la variance conditionnelles :

$$Y_i = m(X_i) + \sigma(X_i)\epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

où $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$ sont les moments conditionnels et les erreurs $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$ sont des variables aléatoires indépendantes telles que $\mathbb{E}(\epsilon_i|X_i) = 0$ et $\text{Var}(\epsilon_i|X_i) = 1$ pour tout $i = 1, \dots, n$. Classiquement ϵ_i et X_i sont supposées indépendantes et les hypothèses précédentes sont directement vérifiées avec des erreurs centrées réduites. Cependant cette hypothèse n'est pas nécessaire pour obtenir de bonnes propriétés théoriques pour les estimateurs que nous proposons. On peut aussi noter que l'hypothèse d'indépendance des erreurs peut être relaxée. Par exemple le cas autorégressif est étudié dans Vilar-Fernández and Francisco-Fernández (2002).

Une approche naturelle pour estimer la fonction $m(\cdot)$ est la *régression paramétrique*, c'est-à-dire que l'on suppose que la fonction $m(\cdot)$ est connue à un nombre (fini) de paramètres près et que l'on a à estimer seulement ces paramètres inconnus à l'aide des données $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$. Par exemple $m(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$, $m(x) = \alpha_0 x / (\alpha_1 \exp(x) + \alpha_2)$ ou encore $m(x) = \alpha_0 \ln(\alpha_1 + \cos(\alpha_2 x))$ sont des modèles paramétriques dans le sens où $m(\cdot)$ est supposée appartenir à une famille de fonctions pouvant être spécifiée à partir d'un nombre fini de paramètres (ici α_0 , α_1 et α_2). Le choix de la famille paramétrique dépend fortement des situations, et constitue l'inconvénient majeur de cette approche. En effet, si l'on choisit une famille dont les membres sont éloignés de la vraie forme de $m(\cdot)$, l'estimation peut se révéler très mauvaise. Si l'on ne restreint plus $m(\cdot)$ à appartenir à une famille paramétrique,

le problème devient alors un problème de *régression non-paramétrique*. Plusieurs méthodes existent pour estimer $m(\cdot)$ dans un cadre non-paramétrique (on pourra consulter Ruppert, Wand and Carroll (2003) pour l'utilisation de splines par exemple). Nous nous limitons ici à l'utilisation des polynômes locaux car ce sont des estimateurs intuitifs dont les propriétés théoriques sont relativement faciles à montrer.

L'idée principale de la régression par polynômes locaux est d'approcher la fonction $m(\cdot)$ par un polynôme d'ordre p *localement* autour de chaque point x , à savoir

$$m(z) \approx \sum_{j=0}^p \beta_j (z - x)^j$$

pour z dans un voisinage de x . Les coefficients de ce polynôme sont alors estimés à partir des observations $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ en résolvant le problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^p \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K_1 \left(\frac{X_i - x}{h_1} \right) \quad (4.2)$$

où $K_1(\cdot)$ est une fonction appelée *noyau* et h_1 un paramètre d'échelle. On peut remarquer la différence avec la régression polynomiale classique due au rajout du terme $K_1 \left(\frac{X_i - x}{h_1} \right)$, terme correctif qui permet de sélectionner les observations X_i autour de x qui vont intervenir dans le calcul du polynôme (d'où le terme *local*). Dans ce cas, en notant $\hat{\beta}(x) = (\hat{\beta}_0(x), \dots, \hat{\beta}_p(x))^T$ le vecteur qui minimise (4.2) on obtient

$$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x), \quad (4.3)$$

alors que la dérivée ν -ième de $m(\cdot)$ est estimée par la relation

$$\hat{\beta}_\nu(x) = \frac{\hat{m}^{(\nu)}(x)}{\nu!}.$$

Comme nous le précisons plus tard, le paramètre d'échelle h_1 est choisi de telle sorte à satisfaire un compromis entre biais et variance de l'estimateur $\hat{m}(\cdot)$. Le cas particulier $p = 0$ (polynôme constant) coïncide avec l'estimateur classique de *Nadaraya-Watson* $\hat{m}_{NW}(\cdot)$ de l'espérance conditionnelle, donné explicitement par

$$\hat{m}_{NW}(x) = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i K_1 \left(\frac{X_i - x}{h_1} \right)}{\sum_{i=1}^n K_1 \left(\frac{X_i - x}{h_1} \right)},$$

voir Scott (1992) ou Wand and Jones (1994).

L'estimation de la variance conditionnelle est quant à elle moins directe. Plusieurs méthodes ont été proposées (on pourra consulter Fan and Yao (1998) pour un certain nombre

d'exemples). Nous nous intéressons seulement à l'estimateur ayant les meilleures propriétés de biais et variance asymptotiques présenté indépendamment par Fan and Yao (1998) et Ruppert, Wand, Holst and Hössjer (1997). Le principe est le suivant : si la fonction $m(\cdot)$ était connue, en écrivant que $\sigma^2(x) = E((Y - m(X))^2 | X = x)$ on pourrait estimer la fonction $\sigma^2(\cdot)$ de la même manière, en posant une régression par polynôme locaux d'ordre q de $(Y_i - m(X_i))^2$ sur X_i et résoudre le problème de moindres carrés pondérés

$$\min_{\gamma} \sum_{i=1}^n \left((Y_i - m(X_i))^2 - \sum_{j=0}^q \gamma_j (X_i - x)^j \right)^2 K_2 \left(\frac{X_i - x}{h_2} \right)$$

Soit encore

$$\min_{\gamma} \sum_{i=1}^n \left(r_i^2 - \sum_{j=0}^q \gamma_j (X_i - x)^j \right)^2 K_2 \left(\frac{X_i - x}{h_2} \right)$$

en posant $r_i^2 = (Y_i - m(X_i))^2$. Mais ici, la fonction $m(\cdot)$ est inconnue. Une approche naturelle est de remplacer $m(\cdot)$ par son estimée $\hat{m}(\cdot)$ définie en (4.3) et d'obtenir l'estimateur $\hat{\sigma}^2(x)$ de $\sigma^2(x)$ en résolvant le problème de moindres carrés pondérés comme précédemment

$$\min_{\gamma} \sum_{i=1}^n \left(\hat{r}_i^2 - \sum_{j=0}^q \gamma_j (X_i - x)^j \right)^2 K_2 \left(\frac{X_i - x}{h_2} \right) \quad (4.4)$$

où $\hat{r}_i^2 = (Y_i - \hat{m}(X_i))^2$, $K_2(\cdot)$ est un noyau et h_2 un paramètre d'échelle. On peut remarquer que le noyau $K_2(\cdot)$ n'est pas nécessairement égal au noyau $K_1(\cdot)$ et que le polynôme choisi pour la seconde régression n'est pas forcément du même ordre (*i.e.* q) que celui choisi pour la première régression (*i.e.* p). Ainsi,

$$\hat{\sigma}^2(x) = \hat{\gamma}_0(x)$$

où $\hat{\gamma}(x) = (\hat{\gamma}_0(x), \dots, \hat{\gamma}_q(x))$ minimise (4.4). Comme précédemment, le paramètre d'échelle h_2 est choisi de manière à satisfaire un compromis biais-variance (Fan and Yao 1998).

Choix des paramètres d'échelle

De nombreuses méthodes existent pour déterminer le paramètre d'échelle h : estimateurs 'plug-in', validation croisée, validation croisée généralisée, etc. Le lecteur trouvera dans Jones, Marron and Sheather (1996) la description de toutes ces méthodes ainsi qu'une comparaison entre elles. Nous avons choisi d'utiliser la méthode EBBS (Ruppert 1997) car elle n'est pas basée sur des considérations asymptotiques sur le biais et la variance des estimateurs.

Choix de l'ordre des polynômes p et q

En ce qui concerne l'estimation de l'espérance conditionnelle $m(\cdot)$, Fan and Gijbels (1996) recommande d'utiliser un polynôme d'ordre $p = \nu + 1$ ou $p = \nu + 3$ pour estimer la dérivée ν -ième de $m(\cdot)$, en considérant le biais asymptotique de $\hat{m}(\cdot)$ sur les bords. Ce résultat nous conduirait donc à choisir $p = 1$ ou $p = 3$ pour estimer la dérivée d'ordre 0 $m(\cdot)$.

Cependant, Ruppert et al. (2003) font remarquer que cette conclusion basée sur des considérations théoriques devrait être nuancée par des simulations numériques, et montrent que le choix $p = 2$ donne souvent de meilleurs résultats que $p = 1$ ou $p = 3$.

D'autre part, le choix des ordres des polynômes n'est pas plus simple lorsque l'on estime la variance conditionnelle $\sigma^2(\cdot)$, car il faut choisir p et q . Comme précédemment, les recommandations ne sont pas unanimes : Fan and Yao (1998) proposent d'utiliser $p = 1, q = 1$ alors que Ruppert et al. (1997) suggèrent de prendre $p = 2, q = 1$ ou $p = 3, q = 1$. Pour le calcul des indices de sensibilité (étudié dans la section 4.2.2), les simulations que nous avons faites avec $p = 1, q = 1$ étaient satisfaisantes d'un point de vue précision, et l'utilisation de polynômes d'ordre supérieur amélioreraient très peu les résultats. Nous nous contenterons donc d'étudier uniquement le cas $p = 1, q = 1$ d'un point de vue théorique.

Propriétés théoriques

Nous donnons ici les expressions du biais et de la variance asymptotique des estimateurs de l'espérance et de la variance conditionnels par polynômes locaux. Ces résultats nous seront utiles plus tard pour exhiber quelques propriétés théoriques des estimateurs des indices de sensibilité. On se place dans le cadre où l'on possède un échantillon i.i.d. $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ d'un vecteur aléatoire (X, Y) de densité $f_{X,Y}(x, y)$. On fixe $x \in \mathbb{R}$ et on cherche à estimer l'espérance conditionnelle $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et la variance conditionnelle $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$. Les hypothèses (A0)-(A4) et (B0)-(B4) assurant les résultats théoriques qui suivent sont les suivantes :

- (A0) Lorsque $n \rightarrow +\infty$, $h_1 \rightarrow +\infty$ et $nh_1 \rightarrow +\infty$;
- (A1) Le noyau K_1 est une fonction de densité symétrique, borné et continue admettant un moment fini d'ordre 7 ;
- (A2) $f_X(x) > 0$ et $\ddot{f}_X(\cdot)$ est bornée dans un voisinage de x où $f_X(x) = \int f_{X,Y}(x, y)dy$ est la densité marginale de X ;
- (A3) $\dddot{m}(\cdot)$ existe et est continue dans un voisinage de x ;
- (A4) $\sigma^2(\cdot)$ admet une dérivée d'ordre 3 bornée dans un voisinage de x et $\ddot{m}(x) \neq 0$.

et

- (B0) Lorsque $n \rightarrow +\infty$, $h_i \rightarrow +\infty$ et $\liminf nh_i^4 > 0$ pour $i = 1, 2$;
- (B1) Les noyau K_i , $i = 1, 2$ sont des fonctions de densité symétriques, à support borné et il existe $c \in \mathbb{R}$ tel que $|K_i(x_1) - K_i(x_2)| \leq c|x_1 - x_2|$ pour $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$;
- (B2) $f_X(x) > 0$ et il existe $d \in \mathbb{R}$ tel que $|f_X(x_1) - f_X(x_2)| \leq d|x_1 - x_2|$ pour $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ où $f_X(x) = \int f_{X,Y}(x, y)dy$ est la densité marginale de X ;
- (B3) $\mathbb{E}(Y^4) < \infty$;
- (B4) $\sigma^2(x) > 0$ et la fonction $\mathbb{E}(Y^k|X = \cdot)$ est continue en x pour $k = 3, 4$. D'autre part, $\ddot{m}(\cdot)$ et $\ddot{\sigma}^2(\cdot)$ sont uniformément continues sur un ouvert contenant x .

Les hypothèses (A0) et (B0) sont classiques dans la théorie des polynômes locaux. Les hypothèses (A1) et (B1) sont d'emblée satisfaites par les noyaux les plus couramment utilisés. On peut remarquer qu'elles imposent un noyau à support borné, mais ce n'est qu'une hypothèse technique permettant de simplifier la démonstration du théorème. Par exemple, le noyau gaussien peut être utilisé.

L'hypothèse $f_X(x) > 0$ dans (A2) et (B2) assure simplement que l'on se place dans le support de la loi de X . Imposer dans (A2) que $\dot{f}_X(\cdot)$ soit bornée dans un voisinage de x est naturel. La condition de Lipschitz sur f dans (B2) est toujours satisfaite si f est régulière à support compact.

Les hypothèses (A3), (A4), (B3) et (B4) sont naturelles et assurent une régularité suffisante aux moments conditionnels.

Le biais et la variance asymptotique de l'estimateur $\hat{m}(\cdot)$ sont donnés par le théorème suivant :

Théorème 4.1 (Fan, Gijbels, Hu and Huang (1996)). *Soit $\hat{\beta}(x) = (\hat{\beta}_0(x), \hat{\beta}_1(x))$ la solution du problème de minimisation*

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=0}^1 \beta_j (X_i - x)^j \right)^2 K_1 \left(\frac{X_i - x}{h_1} \right)$$

et soit l'estimateur $\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0(x)$. Sous les hypothèses (A0), (A1), (A2), (A3) et (A4), le biais et la variance asymptotiques de $\hat{m}(x)$ sont donnés par :

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{m}(x)) = m(x) + \frac{1}{2} \mu_2 \ddot{m}(x) h_1^2 + o_P(h_1^2) \quad (4.5)$$

et

$$\text{Var}_{\mathbb{X}}(\hat{m}(x)) = \frac{\nu_0 \sigma^2(x)}{f_X(x) n h_1} + o_P(h_1^2) \quad (4.6)$$

où $\mathbb{E}_{\mathbb{X}}$ et $\text{Var}_{\mathbb{X}}$ sont l'espérance et la variance conditionnels aux régresseurs $\mathbb{X} = (X_1, \dots, X_n)$, $\mu_k = \int u^k K_1(u) du$ et $\nu_k = \int u^k K_1^2(u) du$.

On peut trouver une expression du biais et de la variance asymptotique de l'estimateur $\hat{\sigma}^2(\cdot)$:

Théorème 4.2 (Fan and Yao (1998)). *Soit $\hat{m}(\cdot)$ l'estimateur défini dans le théorème 4.1 et soit $\hat{\gamma}(x) = (\hat{\gamma}_0(x), \hat{\gamma}_1(x))$ la solution du problème de minimisation*

$$\min_{\gamma} \sum_{i=1}^n \left((Y_i - \hat{m}(X_i))^2 - \sum_{j=0}^1 \gamma_j (X_i - x)^j \right)^2 K_2 \left(\frac{X_i - x}{h_2} \right)$$

On définit l'estimateur $\hat{\sigma}^2(x) = \hat{\gamma}_0(x)$. Sous les hypothèses (B0), (B1), (B2), (B3) et (B4), le biais et la variance asymptotiques de $\hat{\sigma}^2(x)$ sont donnés par :

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{\sigma}^2(x)) = \sigma^2(x) + \frac{1}{2} \mu_2 \ddot{\sigma}^2(x) h_2^2 + o_P(h_1^2 + h_2^2) \quad (4.7)$$

et

$$\text{Var}_{\mathbb{X}}(\hat{\sigma}^2(x)) = \frac{\nu_0 \sigma^4(x) \lambda^2(x)}{f_X(x) n h_2} + o_P\left(\frac{1}{\sqrt{n h_2}}\right) \quad (4.8)$$

où $\mathbb{E}_{\mathbb{X}}$ et $\text{Var}_{\mathbb{X}}$ sont l'espérance et la variance conditionnels aux régresseurs $\mathbb{X} = (X_1, \dots, X_n)$, $\lambda^2(x) = \mathbb{E}((\epsilon^2 - 1)^2 | X = x)$, $\mu_k = \int u^k K_2(u) du$ et $\nu_k = \int u^k K_2^2(u) du$.

4.2.2 Application à l'estimation des indices de sensibilité

Définition des estimateurs

Rappelons que les indices de sensibilité que l'on souhaite estimer sont de la forme

$$S = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))}{\text{Var}(Y)} \quad \text{ou} \quad S = 1 - \frac{\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X))}{\text{Var}(Y)}.$$

On suppose que l'on dispose d'un échantillon i.i.d. $(\tilde{X}_j)_{j=1, \dots, n'}$ de taille n' de la variable aléatoire X . Si les fonctions $m(x) = \mathbb{E}(Y|X = x)$ et $\sigma^2(x) = \text{Var}(Y|X = x)$ étaient connues, il serait facile d'estimer $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) = \text{Var}(m(X))$ et $\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) = \mathbb{E}(\sigma^2(X))$ avec les estimateurs classiques des moments

$$\frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} \left(m(\tilde{X}_j) - \bar{m} \right)^2 \quad \text{et} \quad \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} \sigma^2(\tilde{X}_j)$$

$$\text{où } \bar{m} = \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} m(\tilde{X}_j).$$

Comme $m(\cdot)$ et $\sigma^2(\cdot)$ sont inconnues, l'idée naturelle est de les remplacer par leurs estimateurs par polynômes locaux $\hat{m}(\cdot)$ et $\hat{\sigma}^2(\cdot)$ définis précédemment, ce qui conduit à considérer les deux estimateurs

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} \left(\hat{m}(\tilde{X}_j) - \hat{m} \right)^2 \quad \text{et} \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} \hat{\sigma}^2(\tilde{X}_j) \quad (4.9)$$

$$\text{où } \hat{m} = \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} \hat{m}(\tilde{X}_j), \hat{T}_1 \text{ et } \hat{T}_2 \text{ estimant respectivement } \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) \text{ et } \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)).$$

Il est important de noter qu'il est préférable d'avoir à sa disposition **deux échantillons**, le premier $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ pour calculer les estimateurs $\hat{m}(\cdot)$ et $\hat{\sigma}^2(\cdot)$ et le second $(\tilde{X}_j)_{j=1, \dots, n'}$ pour calculer finalement les estimateurs empiriques \hat{T}_1 et \hat{T}_2 . Nous détaillerons plus précisément la démarche pour obtenir ces deux échantillons dans le paragraphe "procédure pratique" de cette section.

Propriétés théoriques des estimateurs

Maintenant que nous avons défini les estimateurs pour estimer les indices de sensibilité, il importe d'étudier leurs propriétés statistiques. Pour ce faire, nous considérons les hypothèses (A0)-(A4) et (B0)-(B4) et spécifions une hypothèse supplémentaire :

(C0) La densité marginale f_X est à support compact $[a, b]$.

On peut maintenant énoncer les deux théorèmes principaux de cette section :

Théorème 4.3 (Biais asymptotique de \hat{T}_1). *Soit \hat{T}_1 l'estimateur empirique défini par (4.9). Alors sous les hypothèses (A0)-(A4) et (C0), l'estimateur \hat{T}_1 est asymptotiquement sans biais. Plus précisément,*

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_1) = \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) + M_1 h_1^2 + \frac{M_2}{n h_1} + o_p(h_1^2)$$

où M_1 et M_2 sont des constantes.

Preuve. En notant $(Z_j)_{j=1, \dots, n'} := (\hat{m}(\tilde{X}_j))_{j=1, \dots, n'}$ et $\bar{Z} = \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} Z_j$ on peut écrire que

$$\hat{T}_1 = \frac{1}{n' - 1} \sum_{j=1}^{n'} (Z_j - \bar{Z})^2.$$

En conditionnant par rapport aux régresseurs \mathbb{X} , l'échantillon $(Z_j | \mathbb{X})_{j=1, \dots, n'}$ est un échantillon i.i.d. distribué comme $Z_1 | \mathbb{X}$. L'estimateur \hat{T}_1 conditionné par \mathbb{X} est donc l'estimateur non-biaisé classique de la variance et l'on a alors

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_1) = \text{Var}_{\mathbb{X}}(Z_1) = \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1^2) - \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1)^2.$$

Comme \tilde{X} est indépendant de X et Y , on écrit que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1^2) &= \int \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{m}(x)^2) f_{\tilde{X}}(x) dx \\ &= \int (\text{Var}_{\mathbb{X}}(\hat{m}(x)) + \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{m}(x))^2) f_X(x) dx \end{aligned}$$

car X et \tilde{X} ont même distribution. Nous voulons maintenant utiliser les résultats asymptotiques sur $\hat{m}(\cdot)$ du théorème 4.1, qui font intervenir le terme $o_P(h_1)$. L'hypothèse (C0) permet d'utiliser le théorème de convergence dominée pour le terme $o_P(h_1)$ puisque l'on travaille sur un ensemble compact : l'intégrale de $o_P(h_1)$ reste un $o_P(h_1)$. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1^2) &= \int m(x)^2 f_X(x) dx + \frac{\nu_0}{n h_1} \int \sigma^2(x) dx \\ &\quad + \mu_2 h_1^2 \int m(x) \ddot{m}(x) f_X(x) dx + o_P(h_1^2) \end{aligned}$$

et avec les mêmes arguments

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1) = \int m(x) f_X(x) dx + \frac{1}{2} \mu_2 h_1^2 \int \ddot{m}(x) f_X(x) dx + o_P(h_1^2)$$

En remarquant enfin que

$$\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) - \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X))^2 = \int m(x)^2 f_X(x) dx - \left(\int m(x) f_X(x) dx \right)^2$$

on conclut que

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_1) &= \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(Z_1^2) - \mathbb{E}_X(Z_1)^2 \\
&= \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) \\
&\quad + \mu_2 h_1^2 \left[\int m(x) \ddot{m}(x) f_X(x) dx \right. \\
&\quad \left. - \left(\int m(x) f_X(x) dx \right) \left(\int \ddot{m}(x) f_X(x) dx \right) \right] \\
&\quad + \frac{\nu_0}{nh_1} \int \sigma^2(x) dx + o_P(h_1^2) \\
&= \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) + M_1 h_1^2 + \frac{M_2}{nh_1} + o_P(h_1^2)
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
M_1 &= \mu_2 \left[\int m(x) \ddot{m}(x) f_X(x) dx \right. \\
&\quad \left. - \left(\int m(x) f_X(x) dx \right) \left(\int \ddot{m}(x) f_X(x) dx \right) \right]
\end{aligned}$$

et

$$M_2 = \nu_0 \int \sigma^2(x) dx.$$

□

Théorème 4.4 (Biais et variance asymptotiques de \hat{T}_2). *Soit \hat{T}_2 l'estimateur empirique défini par (4.9). Alors sous les hypothèses (B0)-(B4) et (C0), l'estimateur \hat{T}_2 est consistant. Plus précisément,*

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_2) = \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + V_1 h_2^2 + o_p(h_1^2 + h_2^2)$$

et

$$\begin{aligned}
\text{Var}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_2) &= \frac{1}{n'} \left\{ \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)^2) + V_2 h_2^2 + V_3 h_1^2 + \frac{V_4}{nh_2} \right. \\
&\quad \left. + o_p\left(h_1^2 + h_2^2 + \frac{1}{\sqrt{nh_2}}\right) \right\}
\end{aligned}$$

où V_1, V_2, V_3 et V_4 sont des constantes.

Preuve. En notant $(U_j)_{j=1, \dots, n'} := (\hat{\sigma}^2(\tilde{X}_j))_{j=1, \dots, n'}$, on peut écrire

$$\hat{T}_2 = \frac{1}{n'} \sum_{j=1}^{n'} U_j.$$

Conditionnellement aux régresseurs \mathbb{X} les U_j sont i.i.d. distribués comme U_1 et \hat{T}_2 est l'estimateur non-biaisé classique de l'espérance, ce qui donne

$$\mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_2) = \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(U_1)$$

et

$$\text{Var}_X(\hat{T}_2) = \frac{1}{n'} \text{Var}_X(U_1).$$

Comme \tilde{X} est indépendant de X et Y , on a

$$\mathbb{E}_X(U_1) = \int \mathbb{E}_X(\hat{\sigma}^2(x)) f_{\tilde{X}}(x) dx.$$

De la même manière que dans la preuve du théorème 4.3 on obtient en utilisant les expressions du biais et de la variance asymptotique de $\hat{\sigma}^2(\cdot)$ (théorème 4.2) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_2) &= \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + \frac{1}{2} \mu_2 h_2^2 \int \ddot{\sigma}^2(x) f_X(x) dx \\ &\quad + o_P(h_1^2 + h_2^2) \\ &= \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)) + V_1 h_1^2 + o_P(h_1^2 + h_2^2) \end{aligned}$$

avec $V_1 = \frac{1}{2} \mu_2 \int \ddot{\sigma}^2 f_X(x) dx$. Avec le même type d'argument on peut montrer finalement que

$$\begin{aligned} \text{Var}_{\mathbb{X}}(\hat{T}_2) &= \frac{1}{n'} \left\{ \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)^2) \right. \\ &\quad + \mu_2 h_2^2 \int \sigma^2(x) \ddot{\sigma}^2(x) f_X(x) dx \\ &\quad - \mu_2 h_1^2 \left(\int \ddot{\sigma}^2(x) f_X(x) dx \right) \left(\int \sigma^2(x) f_X(x) dx \right) \\ &\quad + \frac{\nu_0}{nh_2} \int \sigma^4(x) \lambda^2(x) dx \\ &\quad \left. + o_P \left(h_1^2 + h_2^2 + \frac{1}{\sqrt{nh_2}} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{n'} \left\{ \mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)^2) + V_2 h_2^2 + V_3 h_1^2 + \frac{V_4}{nh_2} \right. \\ &\quad \left. + o_P \left(h_1^2 + h_2^2 + \frac{1}{\sqrt{nh_2}} \right) \right\} \end{aligned}$$

avec

$$V_2 = \mu_2 \int \sigma^2(x) \ddot{\sigma}^2(x) f_X(x) dx,$$

$$V_3 = -\mu_2 \left(\int \ddot{\sigma}^2(x) f_X(x) dx \right) \left(\int \sigma^2(x) f_X(x) dx \right),$$

$$V_4 = \nu_0 \int \sigma^4(x) \lambda^2(x) dx.$$

□

Procédure pratique

Revenons au modèle (4.1) présenté dans l'introduction de ce chapitre, où \mathbf{X} est multidimensionnel. On cherche à estimer S_i pour $i = 1, \dots, d$ en utilisant un des deux estimateurs \hat{T}_1 et \hat{T}_2 . Il faut disposer de deux échantillons, *i.e.* un échantillon $(\mathbf{X}^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ pour estimer $\hat{m}(\cdot)$ et $\hat{\sigma}^2(\cdot)$ et un échantillon $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$ pour obtenir \hat{T}_1 et \hat{T}_2 , où $(\mathbf{X}^k)_{k=1, \dots, n}$ et $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$ sont des échantillons de la distribution du vecteur d -dimensionnel des paramètres $\mathbf{X} = (X_i)_{i=1, \dots, d}$ et où $(Y^k)_{k=1, \dots, n}$ est un échantillon de la sortie Y . Notons que la fonction $\eta(\cdot)$ n'est évaluée que pour le premier échantillon et non pour le second, puisque le premier échantillon intègre des réalisations de la sortie Y alors que le second ne contient que des réalisations des facteurs \mathbf{X} . Trois situations peuvent se produire :

1. Générer un échantillon de la loi jointe de \mathbf{X} est peu coûteux en temps de calcul, ainsi que l'évaluation de la fonction $\eta(\cdot)$ pour obtenir $(Y^k)_{k=1, \dots, n}$. C'est la situation idéale, en effet dans ce cas $(\mathbf{X}^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ et $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$ peuvent être générés indépendamment et être aussi grands que l'on souhaite ;
2. Générer un échantillon de la loi jointe de \mathbf{X} n'est pas coûteux en temps de calcul mais l'évaluation de la fonction $\eta(\cdot)$ l'est. Dans ce cas (mis en avant dans Oakley and O'Hagan (2004)) un échantillon de taille modérée $(\mathbf{X}^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ est utilisé pour estimer les moments conditionnels. Cependant pour calculer \hat{T}_1 et \hat{T}_2 on peut utiliser un échantillon $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$ de grande taille ;
3. Générer un échantillon de la loi jointe de \mathbf{X} est coûteux en temps de calcul. Cette situation peut se produire lorsque par exemple les paramètres sont obtenus par une procédure basée sur des données expérimentales et des routines d'optimisation. On a donc un échantillon initial $(\mathbf{X}^j)_{j=1, \dots, N}$ de taille N limitée que l'on veut pouvoir utiliser pour les deux étapes de l'estimation. La première idée est de le découper en deux, d'utiliser la première partie pour former $(\mathbf{X}^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ et d'utiliser la seconde pour former $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$. L'avantage de cette méthode est qu'elle fournit deux échantillons indépendants, mais son inconvénient apparaît clairement si N est petit. Une autre façon d'aborder le problème est d'utiliser une procédure de "leave-one-out" qui donne une meilleure approximation que l'idée précédente. Par exemple, on peut estimer $\text{Var}(\hat{m}(X_i))$ par

$$\frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^N \left(\hat{m}_{-j}(X_i^j) - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N \hat{m}_{-j}(X_i^j) \right)^2 .$$

où $\hat{m}_{-j}(X_i^j)$ est la prédiction de l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(Y|X^i)$ au point X_i^j obtenue en utilisant toutes les réalisations de l'échantillon sauf la j -ième.

Une dernière méthode possible est d'utiliser cet échantillon de taille N pour estimer d'une part les moments conditionnels, mais d'autre part aussi pour approcher les densités marginales des paramètres (à l'aide d'un estimateur non-paramétrique par exemple). Dans un second temps on utilise alors ces densités approchées pour générer l'échantillon $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$. L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle peut biaiser fortement les estimateurs. En effet des simulations ont montré qu'elle donnait des estimations moins précises, probablement à cause du large biais produit

par les méthodes non-paramétriques, et notamment si l'échantillon est petit.

La dernière situation conduit bien sûr aux approximations les moins précises des indices de sensibilité du premier ordre. Cependant en général, la littérature sur l'analyse de sensibilité suppose que si la distribution jointe des paramètres n'est pas connue analytiquement, un échantillon de cette distribution peut au moins être obtenu à faible coût en terme de temps de calcul. C'est la raison pour laquelle nous ne décrivons ici que la procédure à suivre pour estimer les indices de sensibilité de premier ordre dans le cas 1 ou 2. Nous supposons donc maintenant que l'on dispose de deux échantillons $(\mathbf{X}^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ et $(\tilde{\mathbf{X}}^l)_{l=1, \dots, n'}$ obtenus par l'une des méthodes décrites précédemment.

La procédure d'estimation de $S_i = \frac{\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X_i))}{\text{Var}(Y)}$ est la suivante :

Etape 1. Générer l'échantillon $(Y^k)_{k=1, \dots, n}$ de la sortie Y en évaluant la fonction $\eta(\cdot)$ aux points $(\mathbf{X}^k)_{k=1, \dots, n}$;

Etape 2. Calculer l'estimateur non-biaisé classique de la variance $V(Y)$

$$\hat{\sigma}_Y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (Y^k - \bar{Y})^2 ;$$

Etape 3. Utiliser l'échantillon $(X_i^k, Y^k)_{k=1, \dots, n}$ pour calculer $\hat{m}(\tilde{X}_i^l)$ pour $l = 1, \dots, n'$ et $\hat{m}(X_i^k)$ pour $k = 1, \dots, n$ en utilisant $p = 1$ et la méthode EBBS (voir le paragraphe "Choix des paramètres d'échelle" de cette même section) pour choisir le paramètre d'échelle h_1 ;

Etape 4. Calculer les résidus $\hat{r}_k^2 = (Y^k - \hat{m}(X_i^k))^2$ pour $k = 1, \dots, n$ et calculer $\hat{\sigma}^2(\tilde{X}_i^l)$ pour $l = 1, \dots, n'$ en utilisant $q = 1$ et la méthode EBBS pour choisir le paramètre d'échelle h_2 ;

Etape 5. Calculer \hat{T}_1 à l'aide de $\hat{m}(\tilde{X}_i^l)$ pour $l = 1, \dots, n'$ obtenu à l'étape 3 et calculer \hat{T}_2 à l'aide de $\hat{\sigma}^2(\tilde{X}_i^l)$ pour $l = 1, \dots, n'$ obtenu à l'étape 4 ;

Etape 6. Les estimateurs de S_i sont alors donnés par

$$\hat{S}_i^{(1)} = \frac{\hat{T}_1}{\hat{\sigma}_Y^2} \text{ et } \hat{S}_i^{(2)} = 1 - \frac{\hat{T}_2}{\hat{\sigma}_Y^2}.$$

Pour obtenir tous les indices de sensibilité d'ordre 1, il faut répéter cette procédure pour $i = 1, \dots, d$.

Remarque 4.5. Les théorèmes 4.3 et 4.4 montrent que les estimateurs \hat{T}_1 et \hat{T}_2 ont une vitesse de convergence non-paramétrique. Etant donnée la construction des estimateurs $\hat{S}^{(1)}$ et $\hat{S}^{(2)}$, on peut s'attendre à ce que ces derniers aient aussi une vitesse de convergence non-paramétrique.

Remarque 4.6. En pratique, dans nos simulations, un choix de n de l'ordre de la centaine et n' aux alentours de 2000 a été suffisant pour une bonne approximation des indices de sensibilité.

4.2.3 Tests sur modèles analytiques

Pour valider numériquement la méthode que nous venons de décrire, il est intéressant d'étudier les résultats qu'elle donne sur quelques modèles "tests". Nous avons décidé de la mettre en oeuvre sur des modèles analytiques simples qui sont présentés dans Saltelli et al. (2000). En effet pour ces modèles le calcul des indices de sensibilité est aisé et fourni dans Saltelli et al. (2000). Il nous est donc possible de comparer ces indices de sensibilité exacts aux estimations fournies par polynômes locaux. Nous ne donnerons que les résultats obtenus avec l'estimateur \hat{T}_1 en choisissant $p = 1$, la méthode EBBS pour le paramètre d'échelle et un échantillon de taille $n = 10000$.

Modèle 1

$$Y = \sum_{j=1}^d X^j,$$

où $d = 3$, les X^j suivent une loi uniforme $\mathcal{U}(\bar{x}_j - \sigma_j, \bar{x}_j + \sigma_j)$ et sont indépendants, $\bar{x}_j = 3^{j-1}$, et $\sigma_j = 0.5\bar{x}_j$. C'est un des modèles linéaires les plus simples, composé de paramètres de variance croissante. Etant donné que le coefficient du développement linéaire est le même pour chaque paramètre, l'étude des sensibilités permet de mettre en valeur uniquement l'influence de leur variation relative sur la variation de la sortie.

Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau 4.1.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{S}^1
X^1	0.01	0.01
X^2	0.1	0.1027
X^3	0.89	0.8873

TAB. 4.1 – Indices de sensibilité pour le modèle 1.

Le calcul des indices de sensibilité montre que le paramètre le plus influent est celui qui a la plus grande variance, c'est le résultat attendu intuitivement. Par ailleurs, on se rend compte que la méthode par polynômes locaux donne des estimations très proches des valeurs théoriques.

Modèle 2

$$Y = X^1 + (X^2)^4,$$

où trois configurations (a), (b) et (c) sont considérées :

(a) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 1)$, $j = 1, 2$;

(b) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 3)$, $j = 1, 2$;

(c) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 5)$, $j = 1, 2$.

Dans toutes les configurations les facteurs sont supposés indépendants. Ce modèle, ainsi que les trois configurations proposées, permet d'étudier l'influence de la différence d'exposant entre les facteurs, d'autant plus significative si leur variance augmente simultanément.

Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau 4.2.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{S}^1
Configuration (a)		
X^1	0.54	0.5398
X^2	0.46	0.4602
Configuration (b)		
X^1	0.0016	0.0028
X^2	0.9984	0.9972
Configuration (c)		
X^1	0.0001	0.0001
X^2	0.9999	0.9999

TAB. 4.2 – Indices de sensibilité pour le modèle 2.

Le calcul des indices de sensibilité montre que le paramètre le plus influent est celui qui a le plus grand exposant d'une manière générale, sauf si les valeurs qu'il prend sont en majorité plus petites que 1. Ce résultat confirme ce que l'on pouvait prévoir. Les estimations fournies par polynômes locaux sont une fois de plus très proches des valeurs théoriques.

Modèle 3

$$Y = \exp\left(\sum_{j=1}^d b_j X^j\right) - I_d,$$

où

$$I_d = \prod_{j=1}^d \frac{e^{b_j} - 1}{b_j},$$

et $X^j \sim \mathcal{U}(0, 1)$. Deux configurations sont considérées :

(a) $d = 6$ et $b_1 = 1.5$, $b_2 = \dots = b_6 = 0.9$;

(b) $d = 20$ et $b_j = 0.6$ pour $1 \leq j \leq 10$, $b_j = 0.4$ pour $11 \leq j \leq 20$.

Ce modèle considère des paramètres de même variance relative, il permet donc d'étudier le seul comportement de la fonction exponentielle (et du coefficient multiplicatif du paramètre dans l'exponentielle).

Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau 4.3.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{S}^1
Configuration (a)		
X^1	0.3519	0.3336
$X^j, j \neq 1$	0.1296	0.1333
Configuration (b)		
$X^j, j \leq 10$	0.0692	0.0684
$X^j, j > 10$	0.0308	0.0316

TAB. 4.3 – Indices de sensibilité pour le modèle 3.

Le calcul des indices de sensibilité montre que les paramètres les plus influents sont ceux qui ont le plus grand coefficient multiplicatif dans l'exponentielle. L'utilisation des polynômes locaux fournit encore une très bonne estimation.

4.2.4 Application à l'isomérisation du n-butane

En utilisant l'échantillon bootstrap obtenu pour les paramètres du modèle d'isomérisation du n-butane, nous pouvons mettre en oeuvre la méthode d'estimation par polynômes locaux pour mener une analyse de sensibilité sur ce modèle.

Les indices de sensibilité de la sortie C3+C5 par rapport à chacun des 8 estimateurs des paramètres ont été calculés pour deux conditions opératoires identiques (pression de 31 bars, température de 154 degrés kelvin, ppH de 4, rapport H2/HC de 1.004) mais avec une charge différente : nC4=1 pour la condition notée c_1 et nC4=0 pour la condition notée c_2 . Les résultats obtenus avec l'estimateur \hat{T}_1 , un polynôme local d'ordre $p = 1$ et un paramètre d'échelle choisi par EBBS sont présentés dans la figure 4.1.

Ces résultats soulignent le comportement de la sortie C3+C5 quand la charge change. En effet, quand on n'introduit que du nC4 (c_1) la production de nC4 dépend principalement de la production de iC4 par la réaction (1). Ceci est confirmé par l'importance des paramètres 1 et 6 qui sont ceux intervenant dans la réaction (1). Quand la charge ne contient que du iC4 (c_2), la réaction (1) n'est plus prépondérante pour la production de C3+C5, désormais principalement reliée à la réaction (3). Les paramètres 2 et 4 qui sont les plus importants dans la figure 4.1 pour la charge c_2 sont des paramètres de la réaction (3). Cette étude nous amène donc à conclure que les résultats obtenus confirment l'intuition sur le comportement de la sortie C3+C5.

Remarque 4.7 (Autres sorties et autres conditions opératoires et de charges). Nous pouvons évidemment étudier les indices de sensibilité pour les autres sorties et pour d'autres conditions opératoires. Nous avons mené une telle étude, cette dernière ayant montré que les paramètres les plus influents dépendent de la condition opératoire et de la charge. Elle a également souligné le fait que chacun des 8 paramètres du modèle a une influence sur

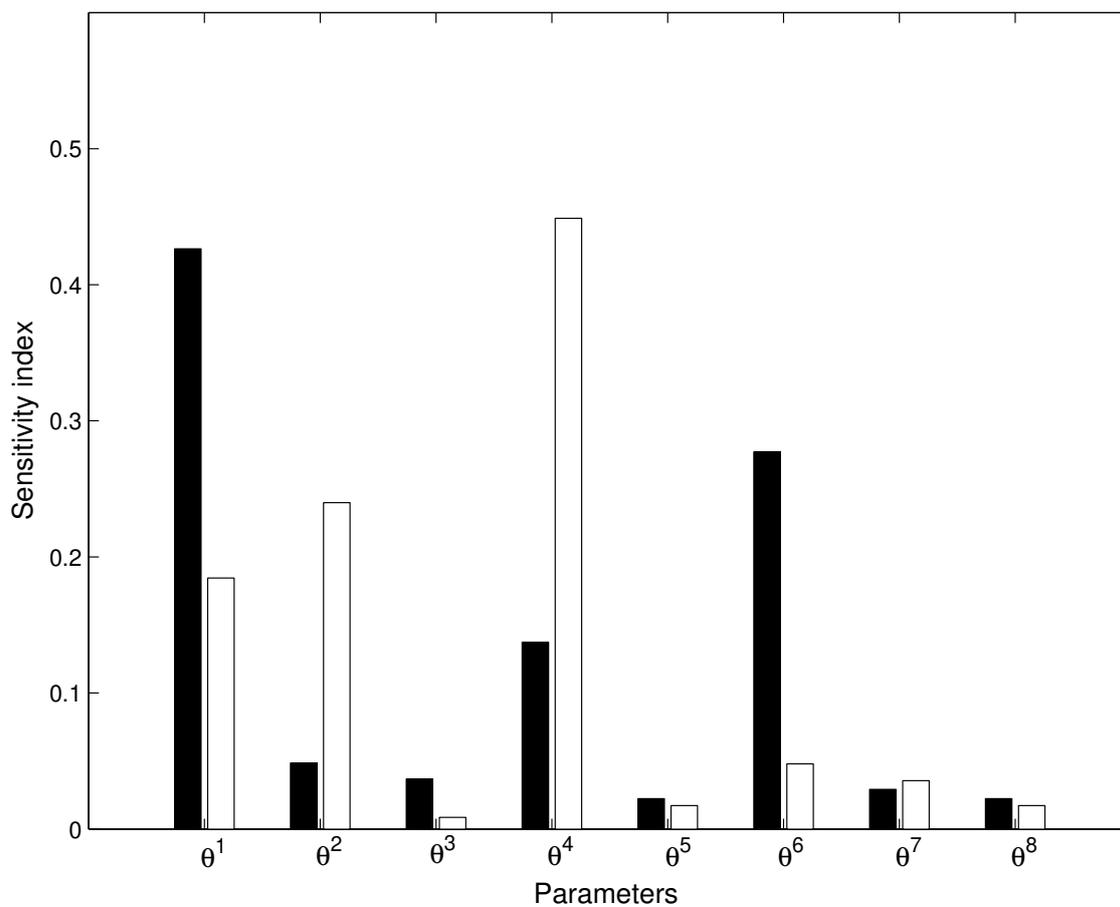


FIG. 4.1 – Indices de sensibilité de la sortie C3+C5 pour les conditions opératoires et de charge c_1 (noir) et c_2 (blanc).

au moins une sortie pour au moins une condition opératoire et de charge. Pour pouvoir tirer des conclusions précises sur les paramètres à fixer, il serait intéressant d'avoir l'avis des ingénieurs en génie des procédés pour savoir si certaines sorties sont plus importantes à étudier et à contrôler, selon l'utilisation qu'ils souhaitent faire du procédé.

4.2.5 Conclusion sur les polynômes locaux

Les résultats précédents, qu'ils soient théoriques ou exhibés sur des modèles analytiques, montrent que la méthode que nous avons proposée pour estimer les indices de sensibilité par polynômes locaux est intéressante et fournit de très bonnes estimations.

Cependant, la vitesse de convergence de ces estimateurs est non-paramétrique et n'est pas optimale, ce qui a motivé le travail que nous détaillons dans la section suivante.

4.3 Estimation d'intégrales de fonctionnelles de densité

Dans la section précédente nous avons proposé un estimateur non-paramétrique des indices de sensibilité de premier ordre. Cet estimateur est convergent et permet de limiter le nombre d'appels à la fonction $\eta(\cdot)$. Néanmoins sa vitesse de convergence est non-paramétrique. Nous proposons ici un estimateur atteignant la vitesse de convergence optimale, c'est-à-dire que sa précision converge à la vitesse \sqrt{n} avec la bonne constante. Ce qui en fait un estimateur efficace et nous permet donc d'exhiber la meilleure méthode possible (du point de vue convergence) pour estimer les indices de sensibilité de premier ordre.

4.3.1 Réécriture du problème

Soit (X, Y) un couple de variables aléatoires réelles continues de densité jointe notée $f(x, y)$, dont on possède un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ de taille n . On cherche à estimer

$$\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)),$$

la variance de l'espérance conditionnelle de Y sachant X . Pour cela, on va utiliser le travail de Laurent (1996) sur l'estimation efficace d'intégrales de fonctionnelles d'une densité. On commence donc par écrire

$$\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) - \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X))^2 = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) - \mathbb{E}(Y)^2.$$

Le deuxième terme est estimé de manière triviale. On va s'intéresser à l'écriture du premier terme sous la forme d'une intégrale fonctionnelle de la densité jointe f , notée $T(f)$:

$$T(f) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) = \iint \frac{(\int y f(x, y) dy)^2}{(\int f(x, y) dy)^2} f(x, y) dx dy.$$

4.3.2 Procédure d'estimation

Soit $(X_i)_{i=1, \dots, n}$ un échantillon de taille n d'une variable aléatoire d -dimensionnelle X de $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^d)$, de densité f . Laurent (1996) propose un estimateur efficace de fonctionnelles de la forme

$$T(f) = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(f(x), x) dx.$$

Sous certaines hypothèses, l'idée est de développer ϕ à l'aide de la formule de Taylor dans un voisinage de $(\hat{f}(x), x)$ où \hat{f} est un estimateur de f calculé à partir d'une partie de l'échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$, par exemple les n_1 dernières observations ($n_1 < n$). On obtient alors

$$T(f) = \int \phi(\hat{f}(x), x) dx + \int \phi'_1(\hat{f}(x), x)(f - \hat{f})(x) dx + \frac{1}{2} \int \phi''_1(\hat{f}(x), x)(f - \hat{f})^2(x) dx + \Gamma_n$$

où $\phi'_1 = \frac{\partial \phi}{\partial u}(u, v)$, $\phi''_1 = \frac{\partial^2 \phi}{\partial u^2}(u, v)$ et Γ_n est un reste qui est négligeable devant les termes linéaires et quadratiques. On peut alors réécrire ce développement sous la forme

$$T(f) = \int G(\hat{f}, \cdot) + \int H(\hat{f}, \cdot) f + \int K(\hat{f}, \cdot) f^2 + \Gamma_n$$

où

$$\begin{aligned} G(\hat{f}, \cdot) &= \phi(\hat{f}, \cdot) - \phi'_1(\hat{f}, \cdot) \hat{f} + \frac{1}{2} \phi''_1(\hat{f}, \cdot) \hat{f}^2, \\ H(\hat{f}, \cdot) &= \phi'_1(\hat{f}, \cdot) - \hat{f} \phi''_1(\hat{f}, \cdot), \\ K(\hat{f}, \cdot) &= \frac{1}{2} \phi''_1(\hat{f}, \cdot). \end{aligned}$$

Cette écriture permet de faire apparaître les deux types de fonctionnelles qu'il faut estimer :

1. $\int H(\hat{f}, \cdot) f$, qui est une fonctionnelle linéaire de f ;
2. $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$, qui est une fonctionnelle quadratique de f .

Puisque \hat{f} est un estimateur utilisant les n_1 dernières observations comme précisé plus haut, alors $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ et $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ doivent être estimés avec les n_2 premières observations de l'échantillon ($n_1 + n_2 = n$).

Un estimateur empirique raisonnable de $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ est $\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, \cdot)(X_j)$.

L'estimation de $\int K(\hat{f}, \cdot) f^2$ est plus difficile et repose sur un travail préliminaire de recherche d'un estimateur de fonctionnelles quadratiques de la forme

$$\int \psi f^2$$

Nous renvoyons le lecteur à Laurent (1996) pour des détails concernant l'estimation de la fonctionnelle quadratique. Notre objectif est d'étendre le travail de Laurent à des fonctionnelles $\phi(\cdot, \cdot)$ plus générales, telles que celle intervenant dans notre problème.

4.3.3 Extension proposée

On cherche à estimer

$$\begin{aligned} T(f) &= \iint \frac{(\int y f(x, y) dy)^2}{(\int f(x, y) dy)^2} f(x, y) dx dy \\ &= \iint m(x)^2 f(x, y) dx dy \end{aligned}$$

où $m(x) = \frac{\int yf(x,y)dy}{\int f(x,y)dy}$ est l'espérance conditionnelle, à l'aide d'un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1,\dots,n}$ distribué selon la loi jointe f du couple (X, Y) .

En suivant la démarche de Laurent, la première étape est de développer l'opérateur $T(f)$ autour d'un estimateur préliminaire \hat{f} obtenu avec les n_1 dernières observations de l'échantillon. Pour cela, définissons la fonction $F : [0, 1] \mapsto \mathbb{R}$:

$$F(u) = T(uf + (1-u)\hat{f})$$

pour $u \in [0, 1]$, on écrit le développement de Taylor de F à l'ordre 3 entre 0 et 1 :

$$F(1) = F(0) + F'(0) + \frac{1}{2}F''(0) + \frac{1}{6}F'''(\xi)(1-\xi)^3$$

où $\xi \in]0, 1[$. Par la suite on utilisera le théorème de Fubini sans le préciser, toutes les précautions nécessaires à son application étant prises puisque les hypothèses choisies dans les théorèmes qui suivront font que l'on travaille sur des ensembles compacts. On a

$$\begin{aligned} F(0) = T(\hat{f}) &= \iint \frac{\left(\int y\hat{f}(x,y)dy\right)^2}{\left(\int \hat{f}(x,y)dy\right)^2} \hat{f}(x,y) dx dy \\ &= \iint \hat{m}(x)^2 \hat{f}(x,y) dx dy \end{aligned}$$

où $\hat{m}(x) = \frac{\int y\hat{f}(x,y)dy}{\int \hat{f}(x,y)dy}$. Il reste donc calculer les dérivées de F jusqu'à l'ordre 3. On a

$$\begin{aligned} F(u) &= T(uf + (1-u)\hat{f}) \\ &= \int \frac{\left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy\right)^2}{\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy} dx \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} F'(u) &= \iint \frac{1}{(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy)^2} \left[2y \left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right) \right. \\ &\quad \left. \left(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy \right) - \left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right)^2 \right] \\ &\quad (f(x,y) - \hat{f}(x,y)) dx dy \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} F'(0) &= \iint \frac{1}{(\int \hat{f}(x,y)dy)^2} \left[2y \int y\hat{f}(x,y)dy \int \hat{f}(x,y)dy - \left(\int y\hat{f}(x,y)dy \right)^2 \right] \\ &\quad (f(x,y) - \hat{f}(x,y)) dx dy \\ &= \iint [2y\hat{m}(x) - \hat{m}(x)^2] (f(x,y) - \hat{f}(x,y)) dx dy \end{aligned}$$

D'autre part,

$$\begin{aligned}
F''(u) &= \iiint \frac{2}{(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy)^3} \left[yz \left(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - (y+z) \left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right) \left(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy \right) \right] \\
&\quad (f(x,y) - \hat{f}(x,y))(f(x,z) - \hat{f}(x,z))dxdydz
\end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned}
F''(0) &= \iiint \frac{2}{(\int \hat{f}(x,y)dy)^3} \left[yz \left(\int \hat{f}(x,y)dy \right)^2 + \left(\int y\hat{f}(x,y)dy \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - (y+z) \left(\int y\hat{f}(x,y)dy \right) \left(\int \hat{f}(x,y)dy \right) \right] (f(x,y) - \hat{f}(x,y))(f(x,z) - \hat{f}(x,z))dxdydz \\
&= \iiint \frac{2}{(\int \hat{f}(x,y)dy)} [yz + \hat{m}(x)^2 - (y+z)\hat{m}(x)] \\
&\quad (f(x,y) - \hat{f}(x,y))(f(x,z) - \hat{f}(x,z))dxdydz
\end{aligned}$$

Enfin,

$$\begin{aligned}
F'''(u) &= \iiint \frac{2}{(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy)^4} \left[2(y+z+t) \left(\int y[uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right) \right. \\
&\quad \left(\int uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)dy \right) - 3 \left(\int [uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right)^2 \\
&\quad \left. - (yz + yt + zt) \left(\int [uf(x,y) + (1-u)\hat{f}(x,y)]dy \right)^2 \right] \\
&\quad (f(x,y) - \hat{f}(x,y))(f(x,z) - \hat{f}(x,z))(f(x,t) - \hat{f}(x,t))dxdydzdt
\end{aligned}$$

Finalement, en regroupant les termes semblables, on obtient

$$\begin{aligned}
T(f) &= \iint [2y\hat{m}(x) - \hat{m}(x)^2] f(x,y)dxdy \\
&\quad + \iiint \frac{1}{(\int \hat{f}(x,y)dy)} [yz + \hat{m}(x)^2 - (y+z)\hat{m}(x)] f(x,y)f(x,z)dxdydz + \Gamma_n \\
&= \iint H(\hat{f}, x, y)f(x,y)dxdy + \iiint K(\hat{f}, x, y, z)f(x,y)f(x,z)dxdy + \Gamma_n \quad (4.10)
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
H(\hat{f}, x, y) &= 2y\hat{m}(x) - \hat{m}(x)^2, \\
K(\hat{f}, x, y, z) &= \frac{1}{(\int \hat{f}(x,y)dy)} [yz + \hat{m}(x)^2 - (y+z)\hat{m}(x)].
\end{aligned}$$

Le reste dans le développement de Taylor est

$$\Gamma_n = \frac{1}{6} F'''(\xi)(1 - \xi)^3$$

et on montrera plus tard qu'il est négligeable. Le premier terme $\int H(\hat{f}, \cdot) f$ est une fonctionnelle linéaire en f et est donc estimé efficacement avec les n_2 premières observations de l'échantillon par

$$\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j).$$

Le terme de second ordre est quant à lui différent du type de fonctionnelle qui apparaît dans le travail de Laurent, en effet c'est aussi une fonctionnelle quadratique à la différence près que l'on a affaire à un terme croisé de la forme

$$\iiint \psi(x, y_1, y_2) f(x, y_1) f(x, y_2) dx dy_1 dy_2 \quad (4.11)$$

qu'il nous faut donc estimer, où $\psi(x, y_1, y_2) = \psi(x, y_2, y_1)$ pour tout $(x, y_1, y_2) \in \mathbb{R}^3$.

4.3.4 Estimation de fonctionnelles quadratiques

Dans cette section, nous proposons un estimateur efficace de fonctionnelles quadratiques croisées s'exprimant sous la forme (4.11) :

$$\theta = \iiint \psi(x, y_1, y_2) f(x, y_1) f(x, y_2) dx dy_1 dy_2$$

où $f(x, y)$ est la fonction de densité d'un vecteur aléatoire (X, Y) et $\psi : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ vérifie $\psi(x, y_1, y_2) = \psi(x, y_2, y_1)$ pour tout $(x, y_1, y_2) \in \mathbb{R}^3$. Rappelons que l'on travaille sur des ensembles compacts, c'est-à-dire que le support de f est compact. Supposons donc que $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ est un échantillon du vecteur (X, Y) de loi jointe $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$. Ici nous considérons donc une loi absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^2 , notons toutefois que tout notre travail est aussi valable pour toute loi absolument continue par rapport à une mesure μ bornée quelconque. Nous nous sommes limités ici à la mesure de Lebesgue dans un souci de concision des nombreuses formules nécessaires à la preuve des théorèmes de convergence des estimateurs. Soit $(p_i)_{i \in D}$, $p_i(x, y) = \alpha_{i_\alpha}(x) \beta_{i_\beta}(y)$ une base orthonormée tensorisée de $\mathbb{L}^2(dx dy)$, où D est un ensemble dénombrable (*e.g.* la base de Fourier de $\mathbb{L}^2(dx dy)$). Notons aussi $a_i = \int f p_i$ la projection de f sur la i -ième composante p_i de cette base et S_M la projection tronquée sur un sous-ensemble M de D , par exemple $S_M f = \sum_{i \in M} a_i p_i$. De la même manière que Laurent, on cherche à estimer la fonctionnelle quadratique avec un biais égal à

$$\begin{aligned} & - \iiint [S_M f(x, y_1) - f(x, y_1)][S_M f(x, y_2) - f(x, y_2)] \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ & = 2 \iiint S_M f(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ & \quad - \iiint S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ & \quad - \iiint f(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2, \end{aligned} \quad (4.12)$$

autrement dit un biais strictement égal au simple biais de projection. Considérons l'estimateur $\hat{\theta}_n$ défini par

$$\begin{aligned}\hat{\theta}_n &= \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) \psi(X_k, u, Y_k) du \\ &\quad - \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2.\end{aligned}$$

On a alors le lemme suivant :

Lemme 4.8 (Biais de $\hat{\theta}_n$). *L'estimateur $\hat{\theta}_n$ défini ci-dessus estime θ avec un biais égal à*

$$- \iiint [S_M f(x, y_1) - f(x, y_1)] [S_M f(x, y_2) - f(x, y_2)] \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2.$$

Démonstration. Notons $\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_n^1 - \hat{\theta}_n^2$ avec

$$\hat{\theta}_n^1 = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) \psi(X_k, u, Y_k) du$$

et

$$\hat{\theta}_n^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2.$$

Calculons tout d'abord $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n^1)$:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\hat{\theta}_n^1) &= 2 \sum_{i \in M} \iint p_i(x, y) f(x, y) dx dy \iiint p_i(x, y) \psi(x, u, y) f(x, y) dx dy du \\ &= 2 \sum_{i \in M} a_i \iiint p_i(x, y) \psi(x, u, y) f(x, y) dx dy du \\ &= 2 \iiint \left(\sum_{i \in M} a_i p_i(x, y) \right) \psi(x, u, y) f(x, y) dx dy du \\ &= 2 \iiint S_M f(x, y) \psi(x, u, y) f(x, y) dx dy du.\end{aligned}$$

Par ailleurs, on a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\hat{\theta}_n^2) &= \sum_{i, i' \in M} \iint p_i(x, y) f(x, y) dx dy \iint p_{i'}(x, y) f(x, y) dx dy \\ &\quad \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ &= \sum_{i, i' \in M} a_i a_{i'} \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ &= \int \left(\sum_{i \in M} a_i p_i(x, y_1) \right) \left(\sum_{i' \in M} a_{i'} p_{i'}(x, y_2) \right) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ &= \int S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2.\end{aligned}$$

En calculant finalement $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n) - \theta = \mathbb{E}(\hat{\theta}_n^1) - \mathbb{E}(\hat{\theta}_n^2) - \theta$ et en utilisant le résultat (4.12) on retrouve bien le biais recherché. \square

Cet estimateur possède plusieurs propriétés qui nous seront utiles pour l'estimation de $T(f)$ par la suite, elles sont détaillées dans le théorème suivant.

Théorème 4.9. *Soit $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ un échantillon du vecteur (X, Y) de loi jointe $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$. Soit $(p_i)_{i \in D}$ une base orthonormée tensorisée de $\mathbb{L}^2(dx dy)$. On suppose que f est uniformément bornée, à support compact $[a, b] \times [c, d]$ et appartient à l'ellipsoïde $\mathcal{E} = \{\sum_{i \in D} a_i p_i; \sum_{i \in D} |a_i^2 / c_i^2| \leq 1\}$ où $(c_i)_{i \in D}$ est une suite de réels donnée. Supposons que les conditions suivantes sont vérifiées :*

– Pour tout $n \geq 1$, on peut trouver un sous-ensemble M_n de D tel que

$$\left(\sup_{i \notin M_n} |c_i|^2 \right)^2 \approx \frac{|M_n|}{n^2}$$

(voir plus bas pour la définition de ' \approx '),

– $\forall t \in \mathbb{L}^2(dx dy), \int (S_{M_n} t - t)^2 d\mu \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$.

On cherche à estimer

$$\theta = \iiint \psi(x, y_1, y_2) f(x, y_1) f(x, y_2) dx dy_1 dy_2$$

où ψ est une fonction bornée telle que $\psi(x, y_1, y_2) = \psi(x, y_2, y_1)$ pour tout $(x, y_1, y_2) \in \mathbb{R}^3$. Soit

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_n &= \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) \psi(X_k, u, Y_k) du \\ &\quad - \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^n p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2. \end{aligned}$$

$\hat{\theta}_n$ possède les propriétés asymptotiques suivantes pour estimer θ :

(i) Si $|M_n|/n \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$, alors

$$\sqrt{n} (\hat{\theta}_n - \theta) \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi)), \quad (4.13)$$

$$\left| n \mathbb{E} (\hat{\theta}_n - \theta)^2 - \Lambda(f, \psi) \right| \leq \gamma_1 \left[\frac{|M_n|}{n} + \|S_{M_n} f - f\|_2 + \|S_{M_n} g - g\|_2 \right], \quad (4.14)$$

où $g(x, y) = \int f(x, u) \psi(x, y, u) du$ et

$$\Lambda(f, \psi) = 4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right].$$

(ii) *Sinon*

$$\mathbb{E} \left(\hat{\theta}_n - \theta \right)^2 \leq \gamma_2 \frac{|M_n|}{n},$$

où γ_1 et γ_2 sont des constantes qui dépendent seulement de $\|f\|_\infty$, $\|\psi\|_\infty$ et Δ_Y (avec $\Delta_Y = d - c$). De plus, ces constantes sont des fonctions croissantes de ces quantités.

La notation $A_n \approx B_n$ utilisée dans le théorème 4.9 signifie que $\lambda_1 \leq A_n/B_n \leq \lambda_2$ où λ_1 et λ_2 sont des constantes strictement positives. Nous avons repris ici cette hypothèse telle qu'elle est présentée par Laurent (1996), notons cependant que seule la majoration sera utilisée dans la preuve qui suit.

Démonstration. On écrira M au lieu de M_n pour la lisibilité des preuves et on notera $m = |M|$. Rappelons que $p_i(x, y) = \alpha_{i_\alpha}(x)\beta_{i_\beta}(y)$. On veut majorer la précision de l'estimateur $\hat{\theta}_n$. On commence par écrire la décomposition classique :

$$\mathbb{E} \left(\hat{\theta}_n - \iiint \psi(x, y_1, y_2) f(x, y_1) f(x, y_2) dx dy_1 dy_2 \right)^2 = \text{Biais}^2(\hat{\theta}_n) + \text{Var}(\hat{\theta}_n).$$

Le premier terme de cette décomposition se majore facilement, car $\hat{\theta}_n$ a justement été construit pour atteindre un biais égal à

$$\text{Biais}(\hat{\theta}_n) = - \iiint [S_M f(x, y_1) - f(x, y_1)][S_M f(x, y_2) - f(x, y_2)] \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2$$

On en déduit alors le lemme suivant :

Lemme 4.10 (Majoration de Biais($\hat{\theta}_n$)). *Sous les hypothèses du théorème (4.9), on a*

$$|\text{Biais}(\hat{\theta}_n)| \leq \Delta_Y \|\psi\|_\infty \sup_{i \notin M} |c_i|^2.$$

Démonstration. Il suffit d'écrire que

$$\begin{aligned} |\text{Biais}(\hat{\theta}_n)| &\leq \|\psi\|_\infty \int \left(\int |S_M f(x, y_1) - f(x, y_1)| dy_1 \right) \\ &\quad \left(\int |S_M f(x, y_2) - f(x, y_2)| dy_2 \right) dx \\ &\leq \|\psi\|_\infty \int \left(\int |S_M f(x, y) - f(x, y)| dy \right)^2 dx \\ &\leq \Delta_Y \|\psi\|_\infty \iint (S_M f(x, y) - f(x, y))^2 dx dy \\ &\leq \Delta_Y \|\psi\|_\infty \sum_{i \notin M} |a_i|^2 \\ &\leq \Delta_Y \|\psi\|_\infty \sup_{i \notin M} |c_i|^2 \end{aligned}$$

car $f \in \mathcal{E}$. □

La difficulté repose sur la majoration de la variance de l'estimateur.

Soient A et B les vecteurs $m \times 1$ composés des éléments

$$a_i = \iint f(x, y) p_i(x, y) dx dy \quad i = 1, \dots, m$$

$$b_i = \iiint p_i(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 = \iint g(x, y) p_i(x, y) dx dy \quad i = 1, \dots, m$$

où $g(x, y) = \int f(x, u) \psi(x, y, u) du$ pour chaque élément i de l'ensemble M . a_i et b_i sont donc les projections des fonctions f et g sur le i -ième élément de la base. Soient Q et R les vecteurs $m \times 1$ des fonctions centrées

$$\begin{aligned} q_i(x, y) &= p_i(x, y) - a_i \quad i = 1, \dots, m \\ r_i(x, y) &= \int p_i(x, u) \psi(x, u, y) du - b_i \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

Soit C la matrice $m \times m$ des constantes

$$c_{ii'} = \iiint p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \quad i, i' = 1, \dots, m.$$

On notera U_n le processus défini par $U_n h = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{j \neq k=1}^n h(X_j, Y_j, X_k, Y_k)$ et P_n la mesure empirique $P_n f = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f(X_j, Y_j)$. En utilisant les notations précédentes, on peut alors écrire $\hat{\theta}_n$ sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_n &= \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^n [q_i(X_j, Y_j) + a_i] [r_i(X_j, Y_j) + b_i] \\ &\quad - \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^n [q_i(X_j, Y_j) + a_i] [q_{i'}(X_k, Y_k) + a_{i'}] c_{ii'} \\ &= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{j \neq k=1}^n [2^t Q(X_j, Y_j) R(X_k, Y_k) - {}^t Q(X_j, Y_j) C Q(X_k, Y_k)] \\ &\quad + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n [2^t A R(X_j, Y_j) + 2^t B Q(X_j, Y_j) - 2^t A C Q(X_j, Y_j)] \\ &\quad + 2^t A B - {}^t A C A, \end{aligned}$$

soit

$$\hat{\theta}_n = U_n K + P_n L + 2^t A B - {}^t A C A \quad (4.15)$$

où

$$\begin{aligned} K(x_1, y_1, x_2, y_2) &= 2^t Q(x_1, y_1) R(x_2, y_2) - {}^t Q(x_1, y_1) C Q(x_2, y_2), \\ L(x_1, y_1) &= 2^t A R(x_1, y_1) + 2^t B Q(x_1, y_1) - 2^t A C Q(x_1, y_1). \end{aligned}$$

Remarquons que $\hat{\theta}_n$ est une U-statistique et que sa décomposition de Hoeffding (voir la section 2.2.3 ou Serfling (1980)) coïncide exactement à la décomposition (4.15) : le terme $U_n K$ correspond à la projection sur l'espace engendré par les fonctions de deux variables, $P_n L$ est la projection sur l'espace engendré par les fonctions d'une variable orthogonal à l'espace précédent, et $2^t AB - {}^t ACA$ est l'espérance de $\hat{\theta}_n$.

On a donc $\text{Var}(\hat{\theta}_n) = \text{Var}(U_n K) + \text{Var}(P_n L) + 2 \text{Cov}(U_n K, P_n L)$. Il suffit de majorer chacune de ces quantités pour majorer la variance de $\hat{\theta}_n$: c'est la démarche que nous adoptons dans les trois lemmes qui suivent.

Lemme 4.11 (Majoration de $\text{Var}(U_n K)$). *Sous les hypothèses du théorème (4.9), on a*

$$\text{Var}(U_n K) \leq \frac{20}{n(n-1)} \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 (m+1).$$

Démonstration. $U_n K$ est centré, donc

$$\begin{aligned} \text{Var}(U_n K) &= \mathbb{E}[(U_n K)^2] \\ &= \mathbb{E} \left(\frac{1}{(n(n-1))^2} \sum_{j \neq k=1}^n \sum_{j' \neq k'=1}^n K(X_j, Y_j, X_k, Y_k) K(X_{j'}, Y_{j'}, X_{k'}, Y_{k'}) \right) \\ &= \frac{1}{n(n-1)} \mathbb{E}(K^2(X_1, Y_1, X_2, Y_2) + K(X_1, Y_1, X_2, Y_2) K(X_2, Y_2, X_1, Y_1)). \end{aligned}$$

En effet dès que $(j', k') \neq (j, k)$ ou $(j', k') \neq (k, j)$, $K(X_j, Y_j, X_k, Y_k)$ et $K(X_{j'}, Y_{j'}, X_{k'}, Y_{k'})$ sont décorrélés et le terme correspondant dans la somme vaut 0, puisque Q et R sont centrés. En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a alors

$$\text{Var}(U_n K) \leq \frac{2}{n(n-1)} \mathbb{E}(K^2(X_1, Y_1, X_2, Y_2)).$$

De plus, en utilisant l'inégalité $2|\mathbb{E}(XY)| \leq \mathbb{E}(X^2) + \mathbb{E}(Y^2)$, on a

$$\mathbb{E}(K^2(X_1, Y_1, X_2, Y_2)) \leq 2 \left[\mathbb{E}((2Q'(X_1, Y_1)R(X_2, Y_2))^2) + \mathbb{E}((Q'(X_1, Y_1)CQ(X_2, Y_2))^2) \right].$$

Il reste à majorer ces deux termes. On peut écrire le premier terme sous la forme :

$$\mathbb{E}((2Q'(X_1, Y_1)R(X_2, Y_2))^2) = 4(W_1 - W_2 - W_3 + W_4)$$

où

$$\begin{aligned} W_1 &= \iiint \iiint \sum_{i, i'} p_i(x, y) p_{i'}(x, y) p_i(x', u) p_{i'}(x', v) \\ &\quad \psi(x', u, y') \psi(x', v, y') f(x, y) f(x', y') du dv dx dy dx' dy' \\ W_2 &= \iint \sum_{i, i'} b_i b_{i'} p_i(x, y) p_{i'}(x, y) f(x, y) dx dy \\ W_3 &= \iiint \sum_{i, i'} a_i a_{i'} p_i(x, u) p_{i'}(x, v) \psi(x, u, y) \psi(x, v, y) f(x, y) dx dy \\ W_4 &= \sum_{i, i'} a_i a_{i'} b_i b_{i'}. \end{aligned}$$

On a

$$W_2 = \iint \left(\sum_i b_i p_i(x, y) \right)^2 f(x, y) dx dy \geq 0$$

et

$$\begin{aligned} W_3 &= \iint \sum_{i, i'} a_i a_{i'} \left(\int p_i(x, u) \psi(x, u, y) du \right) \left(\int p_{i'}(x, v) \psi(x, v, y) dv \right) f(x, y) dx dy \\ &= \iint \left(\sum_i a_i \int p_i(x, u) \psi(x, u, y) du \right)^2 f(x, y) dx dy \geq 0 \end{aligned}$$

d'où

$$\mathbb{E} \left((2Q'(X_1, Y_1)R(X_2, Y_2))^2 \right) \leq 4(W_1 + W_4).$$

Or

$$\begin{aligned} W_1 &= \iiint \sum_{i, i'} p_i(x, y) p_{i'}(x, y) \int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \int p_{i'}(x', v) \psi(x', v, y') dv \\ &\quad f(x, y) f(x', y') dx dy dx' dy' \\ &\leq \iiint \left(\sum_i p_i(x, y) \int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right)^2 f(x, y) f(x', y') dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \iiint \left(\sum_i p_i(x, y) \int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right)^2 dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \iiint \sum_{i, i'} p_i(x, y) p_{i'}(x, y) \int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \int p_{i'}(x', v) \psi(x', v, y') dv \\ &\quad dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \sum_{i, i'} \iint p_i(x, y) p_{i'}(x, y) dx dy \\ &\quad \iint \left(\int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right) \left(\int p_{i'}(x', v) \psi(x', v, y') dv \right) dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \sum_i \iint \left(\int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right)^2 dx' dy' \end{aligned}$$

en utilisant l'orthogonalité des p_i . Or

$$\begin{aligned} \left(\int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right)^2 &\leq \left(\int p_i(x', u)^2 du \right) \left(\int \psi(x', u, y')^2 du \right) \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \Delta_Y \int p_i(x', u)^2 du, \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \iint \left(\int p_i(x', u) \psi(x', u, y') du \right)^2 dx' dy' &\leq \|\psi\|_\infty^2 \Delta_Y \iiint p_i(x', u)^2 dudx' dy' \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \Delta_Y^2 \iint p_i(x', u)^2 dudx \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \Delta_Y^2. \end{aligned}$$

Finalement,

$$W_1 \leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 m.$$

De plus,

$$W_4 = \left(\sum_i a_i b_i \right)^2 \leq \sum_i a_i^2 \sum_i b_i^2 \leq \|f\|_2^2 \|g\|_2^2 \leq \|f\|_\infty \|g\|_2^2.$$

Or

$$g(x, y) = \int f(x, u) \psi_1(x) \psi_2(y) \psi_3(u) du$$

et donc par Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} g(x, y)^2 &\leq \Delta_Y \int f(x, u)^2 \psi_1(x)^2 \psi_2(y)^2 \psi_3(u)^2 du \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty \Delta_Y \int f(x, u) du. \end{aligned}$$

D'où, en intégrant

$$\begin{aligned} \|g\|_2^2 &= \iint g(x, y)^2 dx dy \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty \Delta_Y \iiint f(x, u) dudx dy \\ &\leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty \Delta_Y^2, \end{aligned}$$

soit finalement

$$W_4 \leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2.$$

On a alors

$$\mathbb{E} \left((2Q'(X_1, Y_1)R(X_2, Y_2))^2 \right) \leq 4\|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 (m+1).$$

Majorons maintenant le second terme de $\mathbb{E} \left((2Q'(X_1, Y_1)R(X_2, Y_2))^2 \right)$:

$$\mathbb{E} \left((Q'(X_1, Y_1)CQ(X_2, Y_2))^2 \right) = W_5 - 2W_6 + W_7$$

avec

$$W_5 = \iiint \sum_{i,i'} \sum_{i_1,i'_1} c_{ii'} c_{i_1 i'_1} p_i(x,y) p_{i_1}(x,y) p_{i'}(x',y') p_{i'_1}(x',y') f(x,y) f(x',y') dx dy dx' dy'$$

$$W_6 = \sum_{i,i'} \sum_{i_1,i'_1} \iint c_{ii'} c_{i_1 i'_1} a_i a_{i_1} p_{i'}(x,y) p_{i'_1}(x,y) f(x,y) dx dy$$

$$W_7 = \sum_{i,i'} \sum_{i_1,i'_1} c_{ii'} c_{i_1 i'_1} a_i a_{i_1} a_{i'} a_{i'_1}.$$

Or

$$\begin{aligned} W_6 &= \iint \sum_{i',i'_1} \left(\iiint S_M f(u, z_1) \psi(u, z_1, z_2) p_{i'}(u, z_2) du dz_1 dz_2 \right) \\ &\quad \left(\iiint S_M f(v, t_1) \psi(v, t_1, t_2) p_{i'}(v, t_2) dv dt_1 dt_2 \right) p_{i'}(x, y) p_{i'_1}(x, y) f(x, y) dx dy \\ &= \iint \left(\sum_i \left(\iiint S_M f(u, z_1) \psi(u, z_1, z_2) p_i(u, z_2) du dz_1 dz_2 \right) p_i(x, y) \right)^2 f(x, y) dx dy \geq 0 \end{aligned}$$

d'où

$$\mathbb{E} \left((Q'(X_1, Y_1) C Q(X_2, Y_2))^2 \right) \leq W_5 + W_7.$$

De plus, on a

$$\begin{aligned} W_5 &= \iiint \left(\sum_{i,i'} c_{ii'} p_i(x,y) p_{i'}(x',y') \right)^2 f(x,y) f(x',y') dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \iiint \left(\sum_{i,i'} c_{ii'} p_i(x,y) p_{i'}(x',y') \right)^2 dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \sum_{i,i'} \sum_{i_1,i'_1} c_{ii'} c_{i_1 i'_1} \iiint p_i(x,y) p_{i_1}(x,y) p_{i'}(x',y') p_{i'_1}(x',y') dx dy dx' dy' \\ &\leq \|f\|_\infty^2 \sum_{i,i'} c_{ii'}^2 \end{aligned}$$

en utilisant l'orthogonalité des p_i . Mais on a

$$\begin{aligned} c_{ii'} &= \iiint \alpha_{i_\alpha}(x) \beta_{i_\beta}(y_1) \alpha_{i'_\alpha}(x) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ &= \int \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i'_\alpha}(x) \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) dx, \end{aligned}$$

donc

$$c_{ii'}^2 = \iint \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i'_\alpha}(x) \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) \\ \alpha_{i_\alpha}(x') \alpha_{i'_\alpha}(x') \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x', y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) dx dx'$$

et

$$\sum_{i, i'} c_{ii'}^2 = \iint \sum_{i_\alpha, i'_\alpha} \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i'_\alpha}(x) \alpha_{i_\alpha}(x') \alpha_{i'_\alpha}(x') \sum_{i_\beta, i'_\beta} \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) \\ \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x', y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) dx dx' \\ = \iint \left(\sum_{i_\alpha} \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i_\alpha}(x') \right)^2 \sum_{i_\beta, i'_\beta} \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) \\ \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x', y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) dx dx'.$$

Mais

$$\sum_{i_\beta, i'_\beta} \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) \left(\iint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x', y_1, y_2) dy_1 dy_2 \right) \\ = \sum_{i_\beta, i'_\beta} \iiint \beta_{i_\beta}(y_1) \beta_{i'_\beta}(y_2) \psi(x, y_1, y_2) \beta_{i_\beta}(y'_1) \beta_{i'_\beta}(y'_2) \psi(x', y'_1, y'_2) dy_1 dy_2 dy'_1 dy'_2 \\ = \iint \sum_{i_\beta} \left(\int \beta_{i_\beta}(y_1) \psi(x, y_1, y_2) dy_1 \right) \beta_{i_\beta}(y'_1) \sum_{i'_\beta} \left(\int \beta_{i'_\beta}(y'_2) \psi(x', y'_1, y'_2) dy'_2 \right) \beta_{i'_\beta}(y'_2) dy'_1 dy_2 \\ = \iint \psi(x, y'_1, y_2) \psi(x', y'_1, y_2) dy'_1 dy_2 \\ \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2$$

en utilisant le fait que les β_i sont des projecteurs. Ainsi,

$$\sum_{i, i'} c_{ii'}^2 \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \iint \left(\sum_{i_\alpha} \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i_\alpha}(x') \right)^2 dx dx' \\ \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \iint \sum_{i_\alpha, i'_\alpha} \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i'_\alpha}(x) \alpha_{i_\alpha}(x') \alpha_{i'_\alpha}(x') dx dx' \\ \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \sum_{i_\alpha, i'_\alpha} \left(\int \alpha_{i_\alpha}(x) \alpha_{i'_\alpha}(x) dx \right)^2 \\ \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \sum_{i_\alpha} \left(\int \alpha_{i_\alpha}(x)^2 dx \right)^2 \\ \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 m$$

en utilisant l'orthogonalité des α_i . Soit finalement

$$W_5 \leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 m.$$

On a aussi

$$W_7 = \left(\sum_{i,i'} c_{ii'} a_i a_{i'} \right)^2.$$

Or

$$\begin{aligned} \sum_{i,i'} c_{ii'} a_i a_{i'} &= \sum_{i,i'} \iiint p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) a_i a_{i'} dx dy_1 dy_2 \\ &= \iiint S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \\ \left| \sum_{i,i'} c_{ii'} a_i a_{i'} \right| &\leq \|\psi\|_\infty \iiint |S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2)| dx dy_1 dy_2 \\ &\leq \|\psi\|_\infty \iint \left(\int |S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2)| dx \right) dy_1 dy_2. \end{aligned}$$

En utilisant Cauchy-Schwarz deux fois, on a alors

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i,i'} c_{ii'} a_i a_{i'} \right)^2 &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \iint \left(\int |S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2)| dx \right)^2 dy_1 dy_2 \\ &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \iint \left(\int S_M f(u, y_1)^2 du \right) \left(\int S_M f(v, y_2)^2 dv \right) dy_1 dy_2 \\ &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \iiint S_M f(u, y_1)^2 S_M f(v, y_2)^2 dudv dy_1 dy_2 \\ &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \left(\iint S_M f(x, y)^2 dx dy \right)^2 \\ &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2. \end{aligned}$$

On a alors finalement

$$\mathbb{E}((Q'(X_1, Y_1)CQ(X_2, Y_2))^2) \leq \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 (m+1).$$

En mettant bout à bout ces inégalités, on en déduit alors que

$$\text{Var}(U_n K) \leq \frac{20}{n(n-1)} \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2 (m+1).$$

□

Occupons-nous maintenant du second terme de la décomposition de Hoeffding de $\hat{\theta}_n$:

Lemme 4.12 (Majoration de $\text{Var}(P_n L)$). *Sous les hypothèses du théorème (4.9), on a*

$$\text{Var}(P_n L) \leq \frac{36}{n} \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2.$$

Démonstration. On a

$$\text{Var}(P_n L) = \frac{1}{n} \text{Var}(L(X_1, Y_1))$$

et on peut écrire $L(X_1, Y_1)$ sous la forme

$$\begin{aligned} L(X_1, Y_1) &= 2A'R(X_1, Y_1) + 2B'Q(X_1, Y_1) - 2A'CQ(X_1, Y_1) \\ &= 2 \sum_i a_i \left(\int p_i(X_1, u) \psi(X_1, u, Y_1) du - b_i \right) + 2 \sum_i b_i (p_i(X_1, Y_1) - a_i) \\ &\quad - 2 \sum_{i, i'} c_{ii'} a_{i'} (p_i(X_1, Y_1) - a_i) \\ &= 2 \int \sum_i a_i p_i(X_1, u) \psi(X_1, u, Y_1) du + 2 \sum_i b_i p_i(X_1, Y_1) - 2 \sum_{i, i'} c_{ii'} a_{i'} p_i(X_1, Y_1) \\ &\quad - 4A'B + 2A'CA \\ &= 2 \int S_M f(X_1, u) \psi(X_1, u, Y_1) du + 2S_M g(X_1, Y_1) - 2 \sum_{i, i'} c_{ii'} a_{i'} p_i(X_1, Y_1) \\ &\quad - 4A'B + 2A'CA. \end{aligned}$$

En posant $h(x, y) = \int S_M f(x, u) \psi(x, u, y) du$, on a alors

$$\begin{aligned} S_M h(z, t) &= \sum_i \left(\iint h(x, y) p_i(x, y) dx dy \right) p_i(z, t) \\ &= \sum_i \left(\iiint S_M f(x, u) \psi(x, u, y) p_i(x, y) du dx dy \right) p_i(z, t) \\ &= \sum_{i, i'} \left(\iiint a_{i'} p_{i'}(x, u) \psi(x, u, y) p_i(x, y) du dx dy \right) p_i(z, t) \\ &= \sum_{i, i'} c_{ii'} a_{i'} p_i(z, t) \end{aligned}$$

et on peut alors écrire

$$L(X_1, Y_1) = 2h(X_1, Y_1) + 2S_M g(X_1, Y_1) - 2S_M h(X_1, Y_1) - 4A'B + 2A'CA.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \text{Var}(L(X_1, Y_1)) &= 4\text{Var}[h(X_1, Y_1) + S_M g(X_1, Y_1) - S_M h(X_1, Y_1)] \\ &\leq 4\mathbb{E}[(h(X_1, Y_1) + S_M g(X_1, Y_1) - S_M h(X_1, Y_1))^2] \\ &\leq 12\mathbb{E}[(h(X_1, Y_1))^2 + (S_M g(X_1, Y_1))^2 + (S_M h(X_1, Y_1))^2]. \end{aligned}$$

Il reste maintenant à majorer ces trois termes :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}((h(X_1, Y_1))^2) &= \iint \left(\int S_M f(x, u) \psi(x, u, y) du \right)^2 f(x, y) dx dy \\
&\leq \Delta_Y \iiint S_M f(x, u)^2 \psi(x, u, y)^2 f(x, y) dx dy du \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty \|\psi\|_\infty^2 \iint S_M f(x, u)^2 dx du \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty \|\psi\|_\infty^2 \|S_M f\|_2^2 \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_2^2 \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}((S_M g(X_1, Y_1))^2) &= \iint S_M g(x, y)^2 f(x, y) dx dy \\
&\leq \|f\|_\infty \|S_M g\|_2^2 \\
&\leq \|f\|_\infty \|g\|_2^2 \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2
\end{aligned}$$

d'après les calculs précédents. Enfin,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}((S_M h(X_1, Y_1))^2) &= \iint S_M h(x, y)^2 f(x, y) dx dy \\
&\leq \|f\|_\infty \|S_M h\|_2^2 \\
&\leq \|f\|_\infty \|h\|_2^2 \\
&\leq \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2
\end{aligned}$$

d'après les calculs précédents.

Finalement,

$$\text{Var}(L(X_1, Y_1)) \leq 36 \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2.$$

□

Il nous reste maintenant à calculer la covariance des termes de la décomposition de Hoeffding :

Lemme 4.13 (Majoration de $\text{Cov}(U_n K, P_n L)$). *Sous les hypothèses du théorème (4.9), on a*

$$\text{Cov}(U_n K, P_n L) = 0.$$

Démonstration. Comme $U_n K$ et $P_n L$ sont centrés, on a

$$\begin{aligned} \text{Cov}(U_n K, P_n L) &= \mathbb{E}(U_n K P_n L) \\ &= \mathbb{E} \left[\frac{1}{n^2(n-1)} \sum_{j \neq k=1}^n K(X_j, Y_j, X_k, Y_k) \sum_{i=1}^n L(X_i, Y_i) \right] \\ &= \frac{1}{n} \mathbb{E}(K(X_1, Y_1, X_2, Y_2)(L(X_1, Y_1) + L(X_2, Y_2))) \\ &= 0 \end{aligned}$$

car K , L , Q et R sont centrés. \square

On déduit alors des quatre lemmes précédents le résultat sur la précision de l'estimateur $\hat{\theta}_n$:

Lemme 4.14 (Majoration de $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2$). *Sous les hypothèses du théorème (4.9), on a :*

– Si $m/n \rightarrow 0$,

$$\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 = O\left(\frac{1}{n}\right),$$

– Sinon,

$$\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 \leq \gamma_2(m/n^2)$$

où γ_2 ne dépend que de $\|f\|_\infty$, $\|\psi\|_\infty$ et Δ_Y .

Démonstration. Les lemmes 4.11, 4.12 et 4.13 impliquent la majoration

$$\text{Var}(\hat{\theta}_n) \leq \frac{20}{n(n-1)} \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2 (m+1) + \frac{36}{n} \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2.$$

Finalement, pour n assez grand et une constante $\gamma \in \mathbb{R}$,

$$\text{Var}(\hat{\theta}_n) \leq \gamma \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2 \left(\frac{m}{n^2} + \frac{1}{n} \right).$$

Le lemme 4.10 implique quant à lui que

$$\text{Biais}^2(\hat{\theta}_n) \leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \left(\sup_{i \notin M} |c_i|^2 \right)^2$$

et par hypothèse $(\sup_{i \notin M} |c_i|^2)^2 \approx m/n^2$. Si $m/n \rightarrow 0$, alors $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 = O(\frac{1}{n})$, sinon $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 \leq \gamma_2(m/n^2)$ où γ_2 ne dépend que de $\|f\|_\infty$, $\|\psi\|_\infty$ et Δ_Y . \square

Le lemme que nous venons de démontrer donne le résultat du théorème 4.9 quand m/n ne tend pas vers 0. Etudions maintenant plus précisément le cas semi-paramétrique, c'est-à-dire le cas où $\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 = O(\frac{1}{n})$ pour prouver la normalité asymptotique (4.13) et la majoration de la précision (4.14). On a

$$\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta) = \sqrt{n}(U_n K) + \sqrt{n}(P_n L) + \sqrt{n}(2A'B - A'CA).$$

On va étudier le comportement limite de chacun de ses trois termes. Le premier terme s'étudie aisément :

Lemme 4.15 (Comportement limite de $\sqrt{n}(U_n K)$). *Sous les hypothèses du théorème 4.9,*

$$\sqrt{n}U_n K \rightarrow 0$$

en probabilité quand $n \rightarrow \infty$ si $m/n \rightarrow 0$.

Démonstration. Comme $\text{Var}(\sqrt{n}U_n K) \leq \frac{20}{(n-1)} \|\psi\|_\infty^2 \|f\|_\infty^2 \Delta_Y^2(m+1)$, alors $\sqrt{n}U_n K$ tend vers 0 en probabilité quand $n \rightarrow \infty$ si $m/n \rightarrow 0$. \square

Le processus empirique $P_n L$ sera le terme important pour le théorème centrale limite. Avant d'étudier la normalité asymptotique, nous aurons besoin du lemme suivant concernant la variance de $\sqrt{n}(P_n L)$:

Lemme 4.16 (Variance limite de $\sqrt{n}(P_n L)$). *Sous les hypothèses du théorème 4.9,*

$$n \text{Var}(P_n L) \rightarrow \Lambda(f, \psi)$$

où

$$\Lambda(f, \psi) = 4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right].$$

Démonstration. On a vu précédemment dans le lemme 4.12 que

$$\begin{aligned} \text{Var}(L(X_1, Y_1)) &= 4 \text{Var}[h(X_1, Y_1) + S_M g(X_1, Y_1) - S_M h(X_1, Y_1)] \\ &= 4 \text{Var}[A_1 + A_2 + A_3] \\ &= 4 \sum_{i,j=1}^3 \text{Cov}(A_i, A_j). \end{aligned}$$

On va montrer que $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}^2$, on a

$$\begin{aligned} &\left| \text{Cov}(A_i, A_j) - \epsilon_{ij} \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right] \right| \\ &\leq \gamma [\|S_M f - f\|_2 + \|S_M g - g\|_2] \end{aligned} \quad (4.16)$$

où $\epsilon_{ij} = -1$ si $i = 3$ ou $j = 3$ et $i \neq j$ et $\epsilon_{ij} = 1$ sinon, et où γ dépend seulement de $\|f\|_\infty$, $\|\psi\|_\infty$ et Δ_Y .

On détaille seulement le calcul pour $i = j = 3$ puisque les calculs sont en tout point similaire pour les autres cas :

$$\text{Var}(A_3) = \iint S_M^2[h(x, y)] f(x, y) dx dy - \left(\iint S_M[h(x, y)] f(x, y) dx dy \right)^2$$

Le calcul s'effectue en deux temps, on majore d'abord la quantité

$$\left| \iint S_M^2[h(x, y)] f(x, y) dx dy - \iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy \right|,$$

celle-ci étant majorée par

$$\begin{aligned} & \iint |S_M^2[h(x, y)]f(x, y) - S_M^2[g(x, y)]f(x, y)| dx dy + \iint |S_M^2[g(x, y)]f(x, y) - g(x, y)^2 f(x, y)| dx dy \\ & \leq \|f\|_\infty \|S_M h + S_M g\|_2 \|S_M h - S_M g\|_2 + \|f\|_\infty \|S_M g + g\|_2 \|S_M g - g\|_2. \end{aligned}$$

En utilisant le fait que S_M est une projection, cette somme est majorée par

$$\begin{aligned} & \|f\|_\infty \|h + g\|_2 \|h - g\|_2 + 2\|f\|_\infty \|g\|_2 \|S_M g - g\|_2 \\ & \leq \|f\|_\infty (\|h\|_2 + \|g\|_2) \|h - g\|_2 + 2\|f\|_\infty \|g\|_2 \|S_M g - g\|_2. \end{aligned}$$

On a vu précédemment que

$$- \|g\|_2 \leq \Delta_Y \|f\|_\infty^{1/2} \|\psi\|_\infty;$$

$$- \|h\|_2 \leq \Delta_Y \|f\|_\infty^{1/2} \|\psi\|_\infty.$$

Donc la somme est majorée par

$$2\Delta_Y \|f\|_\infty^{3/2} \|\psi\|_\infty \|h - g\|_2 + 2\Delta_Y \|f\|_\infty^{3/2} \|\psi\|_\infty \|S_M g - g\|_2$$

Il reste donc uniquement le terme $\|h - g\|_2$ à majorer :

$$\begin{aligned} \|h - g\|_2^2 &= \iint \left(\int (S_M f(x, u) - f(x, u)) \psi(x, u, y) du \right)^2 dx dy \\ &\leq \iint \left(\int (S_M f(x, u) - f(x, u))^2 du \right) \left(\int \psi(x, u, y)^2 du \right) dx dy \\ &\leq \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \|S_M f - f\|_2^2. \end{aligned}$$

Finalement la somme est bornée par

$$2\Delta_Y \|f\|_\infty^{3/2} \|\psi\|_\infty (\Delta_Y \|\psi\|_\infty \|S_M f - f\|_2 + \|S_M g - g\|_2)$$

Occupons-nous maintenant de la majoration du second terme, à savoir :

$$\left| \left(\iint S_M[h(x, y)]f(x, y) dx dy \right)^2 - \left(\iint g(x, y)f(x, y) dx dy \right)^2 \right|.$$

Ce terme est égal à

$$\left| \left(\iint (S_M[h(x, y)] + g(x, y))f(x, y) dx dy \right) \left(\iint (S_M[h(x, y)] - g(x, y))f(x, y) dx dy \right) \right|$$

et par Cauchy-Schwarz est borné par

$$\begin{aligned} & \|f\|_2 \|S_M h + g\|_2 \|f\|_2 \|S_M h - g\|_2 \\ & \leq \|f\|_2^2 (\|h\|_2 + \|g\|_2) (\|S_M h - S_M g\|_2 + \|S_M g - g\|_2) \\ & \leq 2\Delta_Y \|f\|_\infty^{3/2} \|\psi\|_\infty (\|h - g\|_2 + \|S_M g - g\|_2) \\ & \leq 2\Delta_Y \|f\|_\infty^{3/2} \|\psi\|_\infty (\Delta_Y \|\psi\|_\infty \|S_M f - f\|_2 + \|S_M g - g\|_2) \end{aligned}$$

en utilisant les majorations précédentes.

Il suffit alors de collecter les deux inégalités pour retrouver (4.16) pour $i = j = 3$.

Finalement, puisque par hypothèse $\forall t \in \mathbb{L}^2(d\mu)$, $\|S_M t - t\|_2 \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$, une conséquence de (4.16) est que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Var}(L(X_1, Y_1)) = 4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right] = \Lambda(f, \psi).$$

On conclut alors en notant que $\text{Var}(\sqrt{n}(P_n L)) = \text{Var}(L(X_1, Y_1))$. \square

On veut maintenant étudier la convergence en loi de $\sqrt{n}(P_n L)$, elle est donnée par le lemme suivant :

Lemme 4.17 (Normalité asymptotique de $\sqrt{n}(P_n L)$). *Sous les hypothèses du théorème 4.9,*

$$\sqrt{n} P_n L \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi)).$$

Démonstration. Nous savons déjà que

$$\sqrt{n} \left(P_n(2g) - 2 \iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi))$$

où $g(x, y) = \int \psi(x, y, u) f(x, u) du$.

Il suffit donc de montrer que l'espérance du carré de

$$R = \sqrt{n} \left[P_n L - \left(P_n(2g) - 2 \iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right) \right]$$

tend vers 0 :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(R^2) &= \text{Var}(R) \\ &= n \text{Var}(P_n L) + n \text{Var}(P_n(2g)) - 2n \text{Cov}(P_n L, P_n(2g)) \end{aligned}$$

Or on sait que $n \text{Var}(P_n(2g)) \rightarrow \Lambda(f, \psi)$ et le lemme 4.16 montre que $n \text{Var}(P_n L) \rightarrow \Lambda(f, \psi)$, il reste donc à montrer que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \text{Cov}(P_n L, P_n(2g)) = \Lambda(f, \psi).$$

On a

$$n \text{Cov}(P_n L, P_n(2g)) = \mathbb{E}(2L(X_1, Y_1)g(X_1, Y_1))$$

car L est centré. Mais

$$L(X_1, Y_1) = 2h(X_1, Y_1) + 2S_M g(X_1, Y_1) - 2S_M h(X_1, Y_1) - 4A'B + 2A'CA$$

ce qui implique que

$$\begin{aligned} n \text{Cov}(P_n L, P_n(2g)) &= 4 \iint h(x, y) g(x, y) f(x, y) dx dy + 4 \iint S_M g(x, y) g(x, y) f(x, y) dx dy \\ &\quad - 4 \iint S_M h(x, y) g(x, y) f(x, y) dx dy - 8 \sum_i a_i b_i \iint g(x, y) f(x, y) dx dy \\ &\quad + 4A'CA \iint g(x, y) f(x, y) dx dy \end{aligned}$$

qui converge vers $4 \left[\iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint g(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right] = \Lambda(f, \psi)$.

On en déduit que

$$\sqrt{n} P_n L \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi))$$

en loi. □

Pour obtenir la normalité asymptotique de $\hat{\theta}_n$, il ne reste plus qu'à contrôler le dernier terme de la décomposition de Hoeffding :

Lemme 4.18 (Comportement asymptotique de $\sqrt{n}(2A'B - A'CA)$). *Sous les hypothèses du théorème 4.9,*

$$\sqrt{n}(2A'B - A'CA - \theta) \rightarrow 0.$$

Démonstration. $\sqrt{n}(2A'B - A'CA - \theta) \rightarrow 0$ est égal à

$$\sqrt{n} \left[2 \iint g(x, y) S_M f(x, y) dx dy - \iiint S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right. \\ \left. - \iiint f(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right]$$

soit en remplaçant g par son expression

$$\sqrt{n} \left[2 \iiint S_M f(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 - \iiint S_M f(x, y_1) S_M f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right. \\ \left. - \iiint f(x, y_1) f(x, y_2) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right]$$

En regroupant les intégrales astucieusement cette quantité vaut alors

$$\sqrt{n} \left[\iiint S_M f(x, y_1) (f(x, y_2) - S_M f(x, y_2)) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right. \\ \left. - \iiint f(x, y_2) (S_M f(x, y_1) - f(x, y_1)) \psi(x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \right] \\ \leq \sqrt{n} \Delta_Y \|\psi\|_\infty (\|S_M f\|_2 \|S_M f - f\|_2 + \|f\|_2 \|S_M f - f\|_2) \\ \leq 2\sqrt{n} \Delta_Y \|f\|_2 \|\psi\|_\infty \|S_M f - f\|_2 \\ \leq 2\sqrt{n} \Delta_Y \|f\|_2 \|\psi\|_\infty \left(\sup_{i \notin M} |c_i|^2 \right)^{1/2} \\ \approx 2\Delta_Y \|f\|_2 \|\psi\|_\infty \sqrt{\frac{m}{n}},$$

qui tend vers 0 quand $n \rightarrow \infty$ puisque $m/n \rightarrow 0$. □

Les lemmes 4.15, 4.16 et 4.18 impliquent alors (4.13) puisque

$$\sqrt{n} (\hat{\theta}_n - \theta) \rightarrow \mathcal{N}(0, \Lambda(f, \psi))$$

en loi. Il reste à prouver (4.14). On a

$$\begin{aligned} n\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 &= n\text{Biais}^2(\hat{\theta}_n) + n\text{Var}(\hat{\theta}_n) \\ &= n\text{Biais}^2(\hat{\theta}_n) + n\text{Var}(U_n K) + n\text{Var}(P_n L) \end{aligned}$$

De plus on a montré que

$$\begin{aligned} n\text{Biais}^2(\hat{\theta}_n) &\leq \lambda \Delta_Y^2 \|\psi\|_\infty^2 \frac{m}{n} \text{ pour un certain } \lambda \in \mathbb{R}, \\ n\text{Var}(U_n K) &\leq \mu \Delta_Y^2 \|f\|_\infty^2 \|\psi\|_\infty^2 \frac{m}{n} \text{ pour un certain } \mu \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Enfin, il s'ensuit de (4.16) que

$$|n\text{Var}(P_n L) - \Lambda(f, \psi)| \leq \gamma [\|S_M f - f\|_2 + \|S_M g - g\|_2],$$

où γ est une fonction croissante de $\|f\|_\infty, \|\psi\|_\infty$ et Δ_Y . On en déduit donc (4.14) ce qui termine la preuve du théorème 4.9. \square

Remarque 4.19. Comme dans le travail de Laurent, la propriété (4.14) implique que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta)^2 = \Lambda(f, \psi).$$

Mais étant donné que l'on veut utiliser ce résultat plus tard pour $T(f)$ dans lequel ψ est une fonction aléatoire qui dépend de n , il est nécessaire d'avoir des bornes qui dépendent explicitement de ψ .

Remarque 4.20. On trouvera dans Laurent (1996) un exemple basé sur les ondelettes où les conditions sur f et M_n du théorème 4.9 sont vérifiées si f et les ondelettes sont suffisamment régulières.

Finalement, les propriétés asymptotiques de $\hat{\theta}_n$ que nous venons d'exhiber dans le théorème 4.9 sont particulièrement intéressantes, dans le sens où elles sont optimales. En effet, on a le théorème suivant :

Théorème 4.21 (Borne de Cramér-Rao semi-paramétrique). *Considérons le problème de l'estimation de*

$$\theta = \theta(f) = \iiint \psi(x, y, z) f(x, y) f(x, z) dx dy dz$$

pour $f \in \mathcal{E}$ où ψ est une fonction bornée telle que $\psi(x, y, z) = \psi(x, z, y)$ pour tous $x, y, z \in \mathbb{R}$. Soit $f_0 \in \mathcal{E}$ une densité vérifiant les hypothèses du théorème 4.9. Alors pour tout estimateur $\hat{\theta}_n$ de $\theta(f)$ et toute famille $\mathcal{V}(f_0)$ de voisinages de f_0 , on a

$$\inf_{\{\mathcal{V}(f_0)\}} \liminf_{n \rightarrow \infty} \sup_{f \in \mathcal{V}(f_0)} n\mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta(f_0))^2 \geq \Lambda(f_0, \psi)$$

Autrement dit, la variance optimale pour l'estimation de θ est $\Lambda(f_0, \psi)$.

Démonstration. Pour prouver l'inégalité du théorème, nous allons utiliser les travaux de Ibragimov and Khas'minskii (1991) sur l'estimation efficace. La première étape est le calcul de la dérivée de Fréchet de la fonctionnelle $\theta(f)$ en un point f_0 appartenant à l'ensemble des densités retenu pour l'estimation. Pour cela, on écrit que

$$\begin{aligned}
\theta(f) - \theta(f_0) &= \iiint \psi(x, y, z) f(x, y) f(x, z) dx dy dz \\
&\quad - \iiint \psi(x, y, z) f_0(x, y) f_0(x, z) dx dy dz \\
&= \iiint \psi(x, y, z) [f(x, y) f(x, z) - f_0(x, y) f_0(x, z)] dx dy dz \\
&= \iint \left[\int \psi(x, y, z) f(x, z) dz + \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] f(x, y) dx dy \\
&\quad - \iint \left[\int \psi(x, y, z) f(x, z) dz + \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] f_0(x, y) dx dy \\
&= \iint \left[\int \psi(x, y, z) f(x, z) dz + \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] \\
&\quad (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy \\
&= \iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy \\
&\quad + \iint \left[\int \psi(x, y, z) (f(x, y) - f_0(x, y)) dz \right] (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy.
\end{aligned}$$

Or le second terme est en valeur absolue inférieur à

$$\begin{aligned}
&\|\psi\|_\infty \iiint |f(x, y) - f_0(x, y)| |f(x, z) - f_0(x, z)| dx dy dz \\
&\leq \|\psi\|_\infty \int \left(\int |f(x, y) - f_0(x, y)| dy \right)^2 dx \\
&\leq \|\psi\|_\infty \Delta_Y \iint (f(x, y) - f_0(x, y))^2 dx dy.
\end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned}
\theta(f) - \theta(f_0) &= \iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy \\
&\quad + O \left(\iint (f(x, y) - f_0(x, y))^2 dx dy \right).
\end{aligned}$$

On déduit alors que la dérivée de $\theta(f)$ au point f_0 est donnée par

$$\theta'(f_0) \cdot h = \left\langle 2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz, h \right\rangle,$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire dans $L^2(dx dy)$.

Nous pouvons maintenant utiliser les résultats de Ibragimov and Khas'minskii (1991).

Notons $H(f_0)$ l'ensemble des fonctions de $\mathbb{L}^2(dxdy)$ orthogonales à $\sqrt{f_0}$:

$$H(f_0) = \left\{ h \in \mathbb{L}^2(dxdy), \iint h(x, y) \sqrt{f_0(x, y)} dxdy = 0 \right\}$$

et $\text{Proj}_{H(f_0)}$ la projection sur $H(f_0)$, $A_n(t) = (\sqrt{f_0})t/\sqrt{n}$ et $P_{f_0}^{(n)}$ la loi jointe de (X_1, \dots, X_n) sous f_0 . Puisque dans notre problème X_1, \dots, X_n sont supposés i.i.d., la famille $\{P_f^{(n)}, f \in \mathcal{E}\}$ est localement asymptotiquement normale en tout point $f_0 \in \mathcal{E}$ dans la direction $H(f_0)$ avec facteur de normalisation $A_n(f_0)$. Sous ces conditions, Ibragimov et Khas'minskii ont montré qu'en posant $K_n = B_n \theta'(f_0) A_n \text{Proj}_{H(f_0)}$ avec $B_n(h) = \sqrt{n}h$, si $K_n \rightarrow K$ faiblement et si $K(h) = \langle t, h \rangle$, alors pour tout estimateur $\hat{\theta}_n$ de $\theta(f)$ et pour toute famille $\mathcal{V}(f_0)$ de voisinages de f_0 , on a

$$\inf_{\{\mathcal{V}(f_0)\}} \liminf_{n \rightarrow \infty} \sup_{f \in \mathcal{V}(f_0)} n \mathbb{E}(\hat{\theta}_n - \theta(f_0))^2 \geq \|t\|_{\mathbb{L}^2(dxdy)}^2.$$

Ici

$$\begin{aligned} K_n(h) &= \sqrt{n} \theta'(f_0) \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{f_0} \text{Proj}_{H(f_0)}(h) \\ &= \theta'(f_0) \cdot \left(\sqrt{f_0} \left(h - \sqrt{f_0} \int h \sqrt{f_0} \right) \right) \\ &= K(h) \end{aligned}$$

ne dépend pas de n , et

$$\begin{aligned} K(h) &= \iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] \sqrt{f_0(x, y)} \left(h(x, y) - \sqrt{f_0(x, y)} \int h \sqrt{f_0} \right) dxdy \\ &= \iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] \sqrt{f_0(x, y)} h(x, y) dxdy \\ &\quad - \iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] f_0(x, y) dxdy \int h \sqrt{f_0} \\ &= \langle t, h \rangle \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} t(x, y) &= \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] \sqrt{f_0(x, y)} \\ &\quad - \left(\iint \left[2 \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] f_0(x, y) dxdy \right) \sqrt{f_0(x, y)}. \end{aligned}$$

La borne de Cramér-Rao semi-paramétrique pour notre problème est égale à $\|t\|_{\mathbb{L}^2(dxdy)}^2$:

$$\begin{aligned} \|t\|_{\mathbb{L}^2(dxdy)}^2 &= 4 \iint \left[\int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right]^2 f_0(x, y) dxdy \\ &\quad - 4 \left(\iint \left[\int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz \right] f_0(x, y) dxdy \right)^2 \\ &= 4 \iint g_0(x, y)^2 f_0(x, y) dxdy - 4 \left(\iint g_0(x, y) f_0(x, y) \right)^2 \end{aligned}$$

en notant $g_0(x, y) = \int \psi(x, y, z) f_0(x, z) dz$ de la même manière que dans le théorème 4.9. Finalement, on reconnaît l'expression de $\Lambda(f_0, \psi)$ définie dans le théorème 4.9. \square

4.3.5 Estimation des indices de sensibilité de premier ordre

Nous venons d'exhiber un estimateur efficace de fonctionnelles quadratiques de la forme (4.11). Il nous est donc possible d'estimer efficacement (conditionnellement à \hat{f}) le terme de second ordre du développement de Taylor (4.10) :

$$\iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x, y) f(x, z) dx dy$$

où

$$K(\hat{f}, x, y, z) = \frac{1}{\left(\int \hat{f}(x, y) dy\right)^3} \left[yz \left(\int \hat{f}(x, y) dy\right)^2 + \left(\int y \hat{f}(x, y) dy\right)^2 - (y+z) \left(\int y \hat{f}(x, y) dy\right) \left(\int \hat{f}(x, y) dy\right) \right].$$

Il est alors naturel de proposer l'estimateur suivant pour $T(f)$:

$$\begin{aligned} \hat{T}_n &= \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j) \\ &+ \frac{2}{n_2(n_2-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) K(\hat{f}, X_k, u, Y_k) du \\ &- \frac{1}{n_2(n_2-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \\ &\int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) K(\hat{f}, x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \end{aligned}$$

et d'étudier ses propriétés. Nous avons choisi la démarche proposée dans Laurent (1996) pour faire cette étude. Dans ces travaux il est démontré que la partie principale pour la variance asymptotique de \hat{T}_n est issue de la partie linéaire, car les variances des autres termes sont soit asymptotiquement nulles (comme c'est le cas pour le reste Γ_n), soit se compensent. Lors de notre étude, nous avons cependant noté une simplification majeure par rapport au problème traité par Laurent. En effet dans le cas des indices de sensibilité, non seulement le reste Γ_n est négligeable, mais la partie quadratique a une variance négligeable par rapport à $1/n$. Ce phénomène au premier abord inattendu est spécifique aux fonctionnelles de moments conditionnels, comme nous le montrerons dans la section suivante.

Revenons à l'étude des propriétés asymptotiques de \hat{T}_n . Nous donnons tout d'abord quelques hypothèses sur la densité f et l'estimateur préliminaire \hat{f} :

A1. $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ avec Ω compact de \mathbb{R}^2 et $\forall (x, y) \in \Omega, \alpha \leq f(x, y) \leq \beta$ où $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$

A2. On peut trouver un estimateur préliminaire \hat{f} de f construit à l'aide de $n_1 \approx n / \log(n)$ observations, tel que

$$\forall (x, y) \in \Omega, \alpha - \epsilon \leq \hat{f}(x, y) \leq \beta + \epsilon.$$

De plus,

$$\forall 2 \leq q < +\infty, \forall l \in \mathbb{N}^*, \mathbb{E}_f \|\hat{f} - f\|_g^l \leq C(q, l) n_1^{-l\lambda}$$

pour un $\lambda > 1/6$ et pour une constante $C(q, l)$ indépendante de f appartenant à l'ellipsoïde \mathcal{E} .

Les propriétés de \hat{T}_n sont résumées dans le théorème suivant.

Théorème 4.22. Soit $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ un échantillon du vecteur (X, Y) de loi jointe $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$. Soit $(p_i)_{i \in D}$ une base orthonormée tensorisée de $\mathbb{L}^2(dx dy)$. On suppose que f est uniformément bornée, à support compact Ω et appartient à l'ellipsoïde

$$\mathcal{E} = \left\{ \sum_{i \in D} a_i p_i; \sum_{i \in D} |a_i^2 / c_i^2| \leq 1 \right\}.$$

On suppose que les hypothèses A1 et A2 sont vérifiées. Supposons que les conditions suivantes sont aussi vérifiées :

– Pour tout $n \leq 1$ on peut trouver un sous-ensemble M_n de D tel que

$$\left(\sup_{i \notin M_n} |c_i|^2 \right)^2 \approx \frac{|M_n|}{n^2},$$

– $\forall t \in \mathbb{L}^2(dx dy), \int (S_{M_n} t - t)^2 d\mu \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$.

On cherche à estimer

$$T(f) = \iint \frac{(\int y f(x, y) dy)^2}{(\int f(x, y) dy)^2} f(x, y) dx dy.$$

Soit

$$\begin{aligned} \hat{T}_n &= \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j) \\ &+ \frac{2}{n_2(n_2 - 1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) K(\hat{f}, X_k, u, Y_k) du \\ &- \frac{1}{n_2(n_2 - 1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) K(\hat{f}, x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2 \end{aligned}$$

où $H(\hat{f}, \cdot, \cdot)$ et $K(\hat{f}, \cdot, \cdot, \cdot)$ ont été définies dans la section 4.3.3. Alors \hat{T}_n a les propriétés suivantes pour estimer $T(f)$: si $\frac{|M_n|}{n} \rightarrow 0$, alors

$$\sqrt{n} \left(\hat{T}_n - T(f) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, C(f)), \quad (4.17)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\hat{T}_n - T(f) \right)^2 = C(f), \quad (4.18)$$

où $C(f) = 4\mathbb{E} \left(\text{Var}(Y|X)\mathbb{E}(Y|X)^2 \right) + \text{Var} \left(\mathbb{E}(Y|X) \right)$.

Démonstration. On va d'abord contrôler le reste Γ_n :

$$\Gamma_n = \frac{1}{6} F'''(\xi)(1 - \xi)^3.$$

Rappelons que

$$\begin{aligned} F'''(u) &= \iiint \frac{2}{(\int u f(x, y) + (1 - u) \hat{f}(x, y) dy)^4} \\ &\quad \left[2(y + z + t) \left(\int y [u f(x, y) + (1 - u) \hat{f}(x, y)] dy \right) \right. \\ &\quad \left(\int u f(x, y) + (1 - u) \hat{f}(x, y) dy \right) - 3 \left(\int [u f(x, y) + (1 - u) \hat{f}(x, y)] dy \right)^2 \\ &\quad \left. - (yz + yt + zt) \left(\int [u f(x, y) + (1 - u) \hat{f}(x, y)] dy \right)^2 \right] \\ &\quad (f(x, y) - \hat{f}(x, y))(f(x, z) - \hat{f}(x, z))(f(x, t) - \hat{f}(x, t)) dx dy dz dt \end{aligned}$$

En supposant que les hypothèses A1 et A2 sont vérifiées, la première partie de l'intégrande est majorée par une constante μ et donc :

$$\begin{aligned} \Gamma_n &\leq \frac{1}{6} \mu \iiint |f(x, y) - \hat{f}(x, y)| |f(x, z) - \hat{f}(x, z)| |f(x, t) - \hat{f}(x, t)| dx dy dz dt \\ &\leq \frac{1}{6} \mu \int \left(\int |f(x, y) - \hat{f}(x, y)| dy \right)^3 dx \\ &\leq \frac{1}{6} \mu \Delta_Y^2 \iint |f(x, y) - \hat{f}(x, y)|^3 dx dy \end{aligned}$$

en utilisant l'inégalité de Hölder. Donc $\mathbb{E}(\Gamma_n^2) = O(\mathbb{E}[(\int |f - \hat{f}|^3)^2]) = O(\mathbb{E}[\|f - \hat{f}\|_3^6])$. Comme \hat{f} vérifie la condition A2, cette quantité est d'ordre $O(n_1^{-6\lambda})$, et en ajoutant les hypothèses $n_1 \approx n/\log(n)$ et $\lambda > 1/6$, on a

$$E(\Gamma_n^2) = o\left(\frac{1}{n}\right)$$

ce qui prouve que le reste Γ_n est négligeable.

On va montrer dans un premier temps que $\sqrt{n} \left(\hat{T}_n - T(f) \right)$ et

$$Z_n = \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(f, X_j, Y_j) - \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy$$

ont le même comportement asymptotique. En effet on a directement un théorème centrale limite pour Z_n avec comme variance asymptotique

$$C(f) = \iint H(f, x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right)^2$$

ce qui implique à la fois (4.22) et (4.23) (on montrera à la fin de la démonstration que $C(f)$ s'exprime sous la forme donnée dans le théorème). Donc pour montrer que $\sqrt{n} (\hat{T}_n - T(f))$ et Z_n ont même comportement asymptotique, il suffit de montrer que

$$R = \sqrt{n} \left[\hat{T}_n - T(f) - \left(\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(f, X_j, Y_j) - \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right) \right]$$

a un moment d'ordre 2 qui tend vers 0. On peut remarquer que $R = R_1 + R_2$ où

$$\begin{aligned} R_1 &= \sqrt{n} \left[\hat{T}_n - T(f) - \left(\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j) - \iint H(\hat{f}, x, y) f(x, y) dx dy \right) \right], \\ R_2 &= \sqrt{n} \left[\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} \left(H(\hat{f}, X_j, Y_j) - \iint H(\hat{f}, x, y) f(x, y) dx dy \right) \right] \\ &\quad - \sqrt{n} \left[\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} \left(H(f, X_j, Y_j) - \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right) \right], \end{aligned}$$

il nous suffit donc de prouver que $\mathbb{E}(R_1^2)$ et $\mathbb{E}(R_2^2)$ tendent vers 0. On peut réécrire R_1 sous la forme

$$R_1 = -\sqrt{n} \left[\hat{Q}' - Q' + \Gamma_n \right]$$

où $Q' = \iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x, y) f(x, z)$ et \hat{Q}' est l'estimateur correspondant. Puisque $\mathbb{E}(\Gamma_n^2) = o(1/n)$, il suffit de contrôler l'espérance du carré de $\sqrt{n} [\hat{Q}' - Q']$:

Lemme 4.23 (Comportement limite de $\sqrt{n} (\hat{Q}' - Q')$). *Sous les hypothèses du théorème 4.22, on a*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\hat{Q}' - Q' \right)^2 = 0.$$

Démonstration. D'après (4.14) quand $|M_n|/n \rightarrow 0$ on a

$$\begin{aligned} & \left| n \mathbb{E} \left[\left(\hat{Q}' - Q' \right)^2 \mid \hat{f} \right] - 4 \left[\iint \hat{g}(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint \hat{g}(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right] \right| \\ & \leq \gamma_1 (\|f\|_\infty, \|\psi\|_\infty, \Delta_Y) \left[\frac{|M_n|}{n} + \|S_M f - f\|_2 + \|S_M \hat{g} - \hat{g}\|_2 \right] \end{aligned}$$

où $\hat{g}(x, y) = \int K(\hat{f}, x, y, z)f(x, z)dz$. Ainsi, en déconditionnant :

$$\begin{aligned} & \left| n\mathbb{E} \left[\left(\hat{Q}' - Q' \right)^2 \right] - 4\mathbb{E} \left[\iint \hat{g}(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint \hat{g}(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2 \right] \right| \\ & \leq \gamma_1 (\|f\|_\infty, \|\psi\|_\infty, \Delta_Y) \left[\frac{|M_n|}{n} + \|S_M f - f\|_2 + \mathbb{E} (\|S_M \hat{g} - \hat{g}\|_2) \right]. \end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned} \mathbb{E} (\|S_M \hat{g} - \hat{g}\|_2) &= \mathbb{E} (\|S_M \hat{g} - S_M g\|_2) + \mathbb{E} (\|S_M g - g\|_2) \\ &\leq \mathbb{E} (\|\hat{g} - g\|_2) + \mathbb{E} (\|S_M g - g\|_2) \end{aligned}$$

où $g(x, y) = \int K(f, x, y, z)f(x, z)dz$. Le second terme tend vers 0 car $g \in \mathbb{L}^2(dx dy)$ et $\forall t \in \mathbb{L}^2(dx dy)$, $\int (S_M t - t)^2 d\mu \rightarrow 0$. D'autre part

$$\begin{aligned} \|\hat{g} - g\|_2^2 &= \iint [\hat{g}(x, y) - g(x, y)]^2 f(x, y) dx dy \\ &= \iint \left[\int \left(K(\hat{f}, x, y, z) - K(f, x, y, z) \right) f(x, z) dz \right]^2 f(x, y) dx dy \\ &\leq \iint \left[\int \left(K(\hat{f}, x, y, z) - K(f, x, y, z) \right)^2 dz \right] \left[\int f(x, z)^2 dz \right]^2 f(x, y) dx dy. \end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité des accroissements finis pour $K(f, x, y, z) - K(\hat{f}, x, y, z)$ et en utilisant des majorations similaires à celles faites pour $F'''(\cdot)$ (conséquences de l'hypothèse A2), on obtient $\mathbb{E} (\|\hat{g} - g\|_2) \rightarrow 0$. Montrons maintenant que l'espérance de

$$\iint \hat{g}(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint \hat{g}(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2$$

tend vers 0. Nous ne développons la preuve que pour le premier terme :

$$\begin{aligned} & \left| \iint \hat{g}(x, y)^2 f(x, y) dx dy - \iint g(x, y)^2 f(x, y) dx dy \right| \\ & \leq \iint |\hat{g}(x, y)^2 - g(x, y)^2| f(x, y) dx dy \\ & \leq \lambda \iint (\hat{g}(x, y) - g(x, y))^2 dx dy \\ & \leq \lambda \|\hat{g} - g\|_2^2. \end{aligned}$$

En passant à l'espérance il suffit de montrer que $\mathbb{E} (\|\hat{g} - g\|_2^2) \rightarrow 0$, ce qui s'effectue par accroissements finis comme précédemment. Par ailleurs on peut vérifier facilement que

$$\begin{aligned} g(x, y) &= \int K(f, x, y, z)f(x, z)dz \\ &= ym(x) + m(x)^2 - ym(x) - m(x)^2 \\ &= 0, \end{aligned}$$

ce qui montre que l'espérance de $\iint \hat{g}(x, y)^2 f(x, y) dx dy$ tend vers 0. Des manipulations similaires montrent que l'espérance du second terme $\left(\iint \hat{g}(x, y) f(x, y) dx dy \right)^2$ tend aussi vers 0. Ainsi, on a finalement

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\hat{Q}' - Q' \right)^2 = 0.$$

□

Le lemme 4.23 prouve alors que $\mathbb{E}(R_1^2) \rightarrow 0$. Il reste à prouver que $\mathbb{E}(R_2^2) \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(R_2^2) &= \frac{n}{n_2} \mathbb{E} \left[\iint \left(H(f, x, y) - H(\hat{f}, x, y) \right)^2 f(x, y) dx dy \right] \\ &\quad - \frac{n}{n_2} \mathbb{E} \left[\iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy - \iint H(\hat{f}, x, y) f(x, y) dx dy \right]^2. \end{aligned}$$

Comme précédemment les accroissements finis et des majorations impliquées par l'hypothèse A2 montrent facilement que $\mathbb{E}(R_2^2) \rightarrow 0$.

Enfin, nous pouvons expliciter plus clairement la variance asymptotique :

$$C(f) = \iint H(f, x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right)^2.$$

En effet on a

$$H(f, x, y) = 2ym(x) - m(x)^2$$

d'où l'on tire

$$\begin{aligned} \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy &= 2 \iint ym(x) f(x, y) dx dy - \iint m(x)^2 f(x, y) dx dy \\ &= 2 \iint m(x)^2 f(x, y) dx dy - \iint m(x)^2 f(x, y) dx dy \\ &= \iint m(x)^2 f(x, y) dx dy \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2) \end{aligned} \tag{4.19}$$

après quelques manipulations d'intégrales élémentaires. Le second terme se traite de manière tout à fait semblable. En effet on a

$$H(f, x, y)^2 = 4y^2 m(x)^2 + m(x)^4 - 4ym(x)^3$$

d'où

$$\begin{aligned}
\iint H(f, x, y)^2 f(x, y) dx dy &= 4 \iint y^2 m(x)^2 f(x, y) dx dy + \iint m(x)^4 f(x, y) dx dy \\
&\quad - 4 \iint y m(x)^3 f(x, y) dx dy \\
&= 4 \iint v(x) m(x)^2 f(x, y) dx dy + \iint m(x)^4 f(x, y) dx dy \\
&\quad - 4 \iint m(x)^4 f(x, y) dx dy \\
&= 4 \iint [v(x) - m(x)^2] m(x)^2 f(x, y) dx dy \\
&\quad + \iint m(x)^4 f(x, y) dx dy \\
&= 4\mathbb{E}([v(X) - m(X)^2] m(X)^2) + \mathbb{E}(m(X)^4) \\
&= 4\mathbb{E}([\mathbb{E}(Y^2|X) - \mathbb{E}(Y|X)^2] \mathbb{E}(Y|X)^2) + \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^4)
\end{aligned}$$

où l'on note $v(x) = \frac{\int y^2 f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy}$. Ce résultat et (4.19) donnent le résultat final

$$C(f) = 4\mathbb{E}(\text{Var}(Y|X)\mathbb{E}(Y|X)^2) + \text{Var}(\mathbb{E}(Y|X)^2),$$

ce qui termine la preuve du théorème 4.22. \square

Enonçons maintenant le résultat central de cette section, à savoir que la variance asymptotique $C(f)$ est optimale.

Théorème 4.24 (Borne de Cramér-Rao semi-paramétrique). *Considérons le problème de l'estimation de*

$$T(f) = \iint \left(\frac{\int y f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy} \right)^2 f(x, y) dx dy = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2)$$

pour (X, Y) de loi jointe $f \in \mathcal{E}$. Soit $f_0 \in \mathcal{E}$ une densité vérifiant les hypothèses du théorème 4.22. Alors pour tout estimateur \hat{T}_n de $T(f)$ et toute famille $\mathcal{V}(f_0)$ de voisinages de f_0 , on a

$$\inf_{\{\mathcal{V}(f_0)\}} \liminf_{n \rightarrow \infty} \sup_{f \in \mathcal{V}(f_0)} n \mathbb{E}(\hat{T}_n - T(f_0))^2 \geq C(f_0)$$

Autrement dit, la variance optimale pour l'estimation de $T(f)$ est $C(f_0)$.

Démonstration. Nous reprenons les grandes lignes de la démonstration du théorème 4.21.

On commence par écrire la différence $T(f) - T(f_0)$:

$$\begin{aligned} & \iint \frac{1}{\left(\int f_0(x, y) dy\right)^2} \left[2y \int y f_0(x, y) dy \int f_0(x, y) dy - \left(\int y f_0(x, y) dy \right)^2 \right] \\ & (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy + \iiint \frac{2}{\left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy\right)^3} \\ & \left[yz \left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy \right)^2 + \left(\int y[\xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y)] dy \right)^2 \right. \\ & \left. - (y + z) \left(\int y[\xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y)] dy \right) \left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy \right) \right] \\ & (f(x, y) - f_0(x, y))(f(x, z) - f_0(x, z)) dx dy dz \end{aligned}$$

où $\xi \in]0, 1[$, c'est-à-dire que $\epsilon_1 \leq \xi \leq 1 - \epsilon_2$ avec $\epsilon_1 > 0, \epsilon_2 > 0$.

Montrons que le second terme de ce développement est un $O(\int (f - f_0)^2)$. Puisque f_0 vérifie l'hypothèse A1, elle est minorée par un réel α , ce qui implique que

$$\epsilon_2 \alpha \leq (1 - \xi) f_0(x, y) \leq \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y).$$

D'autre part, f_0 est définie sur un compact $[a, b] \times [c, d] \subset \mathbb{R}^2$, donc

$$\epsilon_2 \alpha (d - c) = \int \epsilon_2 \alpha dy \leq \int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy,$$

ce qui implique que

$$\frac{1}{\left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy\right)^3} \leq \frac{1}{(\epsilon_2 \alpha (d - c))^3}.$$

La quantité

$$\begin{aligned} & \left[yz \left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy \right)^2 + \left(\int y[\xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y)] dy \right)^2 \right. \\ & \left. - (y + z) \left(\int y[\xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y)] dy \right) \left(\int \xi f(x, y) + (1 - \xi) f_0(x, y) dy \right) \right] \end{aligned}$$

se majore quant à elle facilement, puisque f_0 vérifie l'hypothèse A1. Finalement, le second terme est majoré en valeur absolue par

$$\begin{aligned} & \mu \iiint |f(x, y) - f_0(x, y)| |f(x, z) - f_0(x, z)| dx dy dz \\ & = \mu \int \left(\int |f(x, y) - f_0(x, y)| dy \right)^2 dx \\ & \leq \mu (d - c) \iint (f(x, y) - f_0(x, y))^2 dx dy \end{aligned}$$

où μ est une constante, ce qui montre que le second terme est bien un $O(f(f - f_0)^2)$. On a donc

$$T(f) - T(f_0) = \iint \frac{1}{(\int f_0(x, y) dy)^2} \left[2y \int y f_0(x, y) dy \int f_0(x, y) dy - \left(\int y f_0(x, y) dy \right)^2 \right] (f(x, y) - f_0(x, y)) dx dy + O\left(\int (f - f_0)^2\right).$$

Ce résultat implique que la dérivée de Fréchet de $T(f)$ au point f_0 est

$$T'(f_0) \cdot h = \langle H(f_0, \cdot), h \rangle.$$

où

$$H(f_0, x, y) = \frac{1}{(\int f_0(x, y) dy)^2} \left[2y \int y f_0(x, y) dy \int f_0(x, y) dy - \left(\int y f_0(x, y) dy \right)^2 \right]$$

en reprenant la notation du théorème 4.22. On en déduit alors

$$\begin{aligned} K(h) &= T'(f_0) \cdot \left(\sqrt{f_0} \left(h - \sqrt{f_0} \int h \sqrt{f_0} \right) \right) \\ &= \int H(f_0, \cdot) \sqrt{f_0} h - \int H(f_0, \cdot) \sqrt{f_0} \int h \sqrt{f_0} \\ &= \langle t, h \rangle \end{aligned}$$

avec

$$t = H(f_0, \cdot) \sqrt{f_0} - \left(\int H(f_0, \cdot) f_0 \right) \sqrt{f_0}$$

La borne de Cramér-Rao semi-paramétrique pour notre problème est donc

$$\begin{aligned} \|t\|_{\mathbb{L}^2(dx dy)}^2 &= \int H(f_0, \cdot)^2 f_0 - \left(\int H(f_0, \cdot) f_0 \right)^2 \\ &= C(f_0) \end{aligned}$$

où l'on reconnaît l'expression de $C(f_0)$ du théorème 4.22, ce qui termine la démonstration. \square

4.3.6 Généralisation aux fonctionnelles de moments conditionnels

Nous venons de proposer un estimateur efficace pour les indices de sensibilité de premier ordre, plus précisément pour

$$\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2)$$

où (X, Y) est un vecteur aléatoire. Or il est possible d'étendre la démarche présentée à la section précédente à des fonctionnelles conditionnelles plus générales de la forme

$$\mathbb{E}[\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X))] \tag{4.20}$$

où ψ et ϕ sont des fonctions suffisamment régulières, plus précisément il suffit de supposer que ψ est trois fois dérivable et que ϕ est continue. On peut vérifier par exemple que l'on retrouve les indices de sensibilité pour $\psi(x) = x^2$ et $\phi(x) = x$.

Estimation efficace

Pour ce faire, nous écrivons d'abord la fonctionnelle (4.20) sous forme intégrale

$$\begin{aligned} T(f) &= \iint \psi \left(\frac{\int \phi(y)f(x,y)dy}{\int f(x,y)dy} \right) f(x,y)dx dy \\ &= \iint \psi(m(x)) f(x,y)dx dy \end{aligned}$$

où l'on note $m(x) = \frac{\int \phi(y)f(x,y)dy}{\int f(x,y)dy}$ l'espérance conditionnelle. Comme dans la section précédente, on effectue un développement de Taylor de l'opérateur $T(f)$ autour d'un estimateur préliminaire \hat{f} . Soit $F : [0, 1] \mapsto \mathbb{R}$ la fonction définie par :

$$F(u) = T(uf + (1-u)\hat{f})$$

pour $u \in [0, 1]$, on écrit le développement de Taylor de F à l'ordre 3 entre 0 et 1 :

$$F(1) = F(0) + F'(0) + \frac{1}{2}F''(0) + \frac{1}{6}F'''(\xi)(1-\xi)^3$$

où $\xi \in]0, 1[$. On a

$$\begin{aligned} F(0) &= T(\hat{f}) = \iint \psi \left(\frac{\int y\hat{f}(x,y)dy}{\int \hat{f}(x,y)dy} \right) \hat{f}(x,y)dx y \\ &= \iint \psi(\hat{m}(x))\hat{f}(x,y)dx dy \end{aligned}$$

où $\hat{m}(x) = \frac{\int \phi(y)\hat{f}(x,y)dy}{\int \hat{f}(x,y)dy}$. On peut vérifier que les dérivées première et seconde de F ont les expressions suivantes en 0 :

$$F'(0) = \iint \left([\phi(y) - \hat{m}(x)] \dot{\psi}(\hat{m}(x)) + \psi(\hat{m}(x)) \right) \left(f(x,y) - \hat{f}(x,y) \right) dx dy,$$

$$\begin{aligned} F''(0) &= \iiint \frac{\ddot{\psi}(\hat{m}(x))}{\int \hat{f}(x,y)dy} \left(\phi(y)\phi(z) + \hat{m}(x)^2 - (\phi(y) + \phi(z))\hat{m}(x) \right) \\ &\quad \left(f(x,y) - \hat{f}(x,y) \right) \left(f(x,z) - \hat{f}(x,z) \right) dx dy dz \end{aligned}$$

où $\dot{\psi}(\cdot)$ et $\ddot{\psi}(\cdot)$ sont respectivement les dérivées première et seconde de ψ . Finalement, nous obtenons

$$\begin{aligned} T(f) &= \iint \left([\phi(y) - \hat{m}(x)] \dot{\psi}(\hat{m}(x)) + \psi(\hat{m}(x)) \right) f(x,y)dx dy \\ &\quad + \frac{1}{2} \iiint \frac{\ddot{\psi}(\hat{m}(x))}{\int \hat{f}(x,y)dy} \left(\phi(y)\phi(z) + \hat{m}(x)^2 - (\phi(y) + \phi(z))\hat{m}(x) \right) f(x,y)f(x,z)dx dy dz \\ &\quad + \Gamma_n \\ &= \iint H(\hat{f}, x, y) f(x,y)dx dy + \iiint K(\hat{f}, x, y, z) f(x,y)f(x,z)dx dy dz + \Gamma_n \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
 H(\hat{f}, x, y) &= [\phi(y) - \hat{m}(x)] \dot{\psi}(\hat{m}(x)) + \psi(\hat{m}(x)), \\
 K(\hat{f}, x, y, z) &= \frac{1}{2} \frac{\ddot{\psi}(\hat{m}(x))}{\int \hat{f}(x, y) dy} (\phi(y)\phi(z) + \hat{m}(x)^2 - (\phi(y) + \phi(z))\hat{m}(x)), \\
 \Gamma_n &= \frac{1}{6} F'''(\xi)(1 - \xi)^3.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Il apparaît clairement que $T(f)$ est une fonctionnelle dont la forme est la même que celle étudiée dans la section précédente : on propose donc le même estimateur \hat{T}_n où l'on remplace simplement $H(\hat{f}, \cdot, \cdot)$ et $K(\hat{f}, \cdot, \cdot, \cdot)$ par leurs nouvelles expressions. On peut espérer que les propriétés asymptotiques et l'efficacité seront conservées étant donné la forme tout à fait semblable de l'estimateur. En réalité, on garde l'efficacité à condition de pouvoir contrôler $H(\hat{f}, \cdot, \cdot)$ et $K(\hat{f}, \cdot, \cdot, \cdot)$ comme précédemment. Puisque l'on travaille sur des compacts, il nous suffit de contrôler la régularité des fonctions ψ et ϕ , ce qui se fait à travers l'hypothèse supplémentaire :

A3. $\psi \in C^3(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ et $\phi \in C^0(\mathbb{R}, \mathbb{R})$.

On peut alors énoncer le théorème concernant les propriétés asymptotiques de \hat{T}_n .

Théorème 4.25. *Soit $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ un échantillon du vecteur (X, Y) de loi jointe $f \in \mathbb{L}^2(dx dy)$. Soit $(p_i)_{i \in D}$ une base orthonormée tensorisée de $\mathbb{L}^2(dx dy)$. On suppose que f est uniformément bornée, à support compact Ω et appartient à l'ellipsoïde*

$$\mathcal{E} = \left\{ \sum_{i \in D} a_i p_i; \sum_{i \in D} |a_i^2 / c_i^2| \leq 1 \right\}.$$

On suppose que les hypothèses A1, A2 et A3 sont vérifiées. Supposons que les conditions suivantes sont aussi vérifiées :

– Pour tout $n \geq 1$ on peut trouver un sous-ensemble M_n de D tel que

$$\left(\sup_{i \notin M_n} |c_i|^2 \right)^2 \approx \frac{|M_n|}{n^2},$$

– $\forall t \in \mathbb{L}^2(dx dy), \int (S_{M_n} t - t)^2 d\mu \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$.

On cherche à estimer

$$T(f) = \iint \psi \left(\frac{\int \phi(y) f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy} \right) f(x, y) dx dy.$$

Soit

$$\begin{aligned}\hat{T}_n &= \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(\hat{f}, X_j, Y_j) \\ &+ \frac{2}{n_2(n_2-1)} \sum_{i \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) \int p_i(X_k, u) K(\hat{f}, X_k, u, Y_k) du \\ &- \frac{1}{n_2(n_2-1)} \sum_{i, i' \in M} \sum_{j \neq k=1}^{n_2} p_i(X_j, Y_j) p_{i'}(X_k, Y_k) \\ &\int p_i(x, y_1) p_{i'}(x, y_2) K(\hat{f}, x, y_1, y_2) dx dy_1 dy_2\end{aligned}$$

où $H(\hat{f}, \cdot, \cdot)$ et $K(\hat{f}, \cdot, \cdot, \cdot)$ sont définies en (4.21). Alors \hat{T}_n a les propriétés suivantes pour estimer $T(f)$: si $\frac{|M_n|}{n} \rightarrow 0$, alors

$$\sqrt{n} \left(\hat{T}_n - T(f) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, C(f)), \quad (4.22)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \mathbb{E} \left(\hat{T}_n - T(f) \right)^2 = C(f), \quad (4.23)$$

où $C(f) = \mathbb{E} \left(\text{Var}(\phi(Y)|X) \left[\psi \left(\mathbb{E}(Y|X) \right) \right]^2 \right) + \text{Var}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)))$.

Démonstration. On suit exactement la même approche que pour la preuve du théorème 4.22. On montre tout d'abord aisément que le reste Γ_n est négligeable à l'aide des hypothèses A1, A2 et A3.

Ensuite, on montre que $\sqrt{n} \left(\hat{T}_n - T(f) \right)$ et

$$Z_n = \frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(f, X_j, Y_j) - \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy$$

ont le même comportement asymptotique en montrant que $\mathbb{E}(R^2) \rightarrow 0$ où

$$R = \sqrt{n} \left[\hat{T}_n - T(f) - \left(\frac{1}{n_2} \sum_{j=1}^{n_2} H(f, X_j, Y_j) - \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right) \right]$$

En effet $R = R_1 + R_2$ et on a directement avec les hypothèses A1, A2 et A3 que $\mathbb{E}(R_2^2) \rightarrow 0$.

Quant à R_1 , la même démonstration est toujours valable, puisque l'on peut encore utiliser les accroissements finis pour $K(f, x, y, z) - K(\hat{f}, x, y, z)$ qui permettent de conclure avec les

hypothèses A1, A2 et A3. On montre aussi facilement que $g(x, y) = \int K(f, x, y, z) f(x, z) dz =$

0 ce qui implique que $\mathbb{E}(R_1^2) \rightarrow 0$.

Enfin, comme on a un théorème central limite pour Z_n avec pour variance asymptotique

$$C(f) = \iint H(f, x, y)^2 f(x, y) dx dy - \left(\iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy \right)^2,$$

il reste juste à prouver que $C(f) = \mathbb{E} \left(\text{Var}(\phi(Y)|X) \left[\dot{\psi}(\mathbb{E}(Y|X)) \right]^2 \right) + \text{Var}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)))$.

On a tout d'abord

$$\begin{aligned}
& \iint H(f, x, y) f(x, y) dx dy & (4.24) \\
&= \iint \left([\phi(y) - m(x)] \dot{\psi}(m(x)) + \psi(m(x)) \right) f(x, y) dx dy \\
&= \iint m(x) \dot{\psi}(m(x)) f(x, y) dx dy \\
&\quad - \iint m(x) \dot{\psi}(m(x)) f(x, y) dx dy + \iint \psi(m(x)) f(x, y) dx dy \\
&= \mathbb{E}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X))). & (4.25)
\end{aligned}$$

De plus

$$\begin{aligned}
H(f, x, y)^2 &= [\phi(y) - m(x)]^2 \dot{\psi}(m(x))^2 + \psi(m(x))^2 + 2[\phi(y) - m(x)] \dot{\psi}(m(x)) \psi(m(x)) \\
&= \phi(y)^2 \dot{\psi}(m(x))^2 + m(x)^2 \dot{\psi}(m(x))^2 - 2\phi(y)m(x) \dot{\psi}(m(x))^2 + \psi(m(x))^2 \\
&\quad + 2[\phi(y) - m(x)] \dot{\psi}(m(x)) \psi(m(x)).
\end{aligned}$$

On peut donc écrire $\iint H(f, x, y)^2 f(x, y) dx dy$ sous la forme

$$\begin{aligned}
& \iint \phi(y)^2 \dot{\psi}(m(x))^2 f(x, y) dx dy + \iint m(x)^2 \dot{\psi}(m(x))^2 f(x, y) dx dy \\
& - 2 \iint \phi(y)m(x) \dot{\psi}(m(x))^2 f(x, y) dx dy + \iint \psi(m(x))^2 f(x, y) dx dy \\
& + 2 \iint \phi(y) \dot{\psi}(m(x)) \psi(m(x)) f(x, y) dx dy - 2 \iint m(x) \dot{\psi}(m(x)) \psi(m(x)) f(x, y) dx dy \\
&= \iint v(x) \dot{\psi}(m(x))^2 f(x, y) dx dy - \iint m(x)^2 \dot{\psi}(m(x)) f(x, y) dx dy \\
& + \iint \psi(m(x))^2 f(x, y) dx dy \\
&= \iint \left([v(x) - m(x)^2] \dot{\psi}(m(x))^2 + \psi(m(x))^2 \right) f(x, y) dx dy \\
&= \mathbb{E} \left([v(X) - m(X)^2] \dot{\psi}(m(X))^2 \right) + \mathbb{E}(\psi(m(X))^2) \\
&= \mathbb{E} \left([\mathbb{E}(\phi(Y)^2|X) - \mathbb{E}(\phi(Y)|X)^2] \left[\dot{\psi}(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)) \right]^2 \right) + \mathbb{E}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X))^2) \\
&= \mathbb{E} \left(\text{Var}(\phi(Y)|X) \left[\dot{\psi}(\mathbb{E}(Y|X)) \right]^2 \right) + \mathbb{E}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X))^2)
\end{aligned}$$

où on a noté $v(x) = \frac{\int \phi(y)^2 f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy}$, ce qui conjointement avec (4.25) démontre le résultat recherché pour $C(f)$ et termine la preuve du théorème 4.25. \square

La démonstration de l'optimalité de la constante $C(f)$ est exactement la même que dans le théorème 4.24, c'est la raison pour laquelle nous ne la détaillons pas ici. La seule précaution

à prendre concerne la majoration du second terme du développement de $T(f)$ au point f_0 , qui est assurée par l'hypothèse A1 et la régularité des fonctions ψ et ϕ .

Propriétés des fonctionnelles de moments conditionnels

Nous avons remarqué dans les théorèmes 4.22 et 4.25 que l'efficacité des estimateurs proposés est atteinte principalement par le fait que la variance asymptotique de l'estimateur du terme quadratique est nulle. Ce phénomène remarquable, qui ne se produit pas dans le travail de Laurent (1996), est intrinsèquement lié aux moments conditionnels. Nous proposons d'étudier cette propriété d'un point de vue fonctionnel, en considérant des opérateurs agissant sur des fonctions de $\mathbb{L}^2(dxdy)$.

Plaçons nous comme dans les sections précédentes sur un compact Ω de \mathbb{R}^2 . Soit H l'opérateur agissant sur les fonctions de densité $f \in \mathbb{L}^2(dxdy)$ et associant à toute densité f l'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(\phi(Y|X))$ où (X, Y) est un vecteur aléatoire de loi jointe f . Alors de manière usuelle $H(f)$ vérifie la relation

$$\forall g(x), \langle H(f), gf \rangle = \langle \phi(y), gf \rangle$$

pour toute fonction g fonction de la variable x uniquement. On note ici $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire usuel sur $\mathbb{L}^2(dxdy)$.

Il est possible d'étendre la définition de H et la relation précédente à des fonctions de $\mathbb{L}^2(dxdy)$ qui ne sont pas des densités, sous couvert de positivité. En effet soit $t \geq 0$ un réel positif et $h \in \mathbb{L}^2(dxdy)$, alors H est un opérateur agissant sur les fonctions positives de $\mathbb{L}^2(dxdy)$ vérifiant la relation

$$\forall g(x), \langle H(f + th), g(f + th) \rangle = \langle \phi(y), g(f + th) \rangle \quad (4.26)$$

Rappelons que l'on s'intéresse à l'opérateur $T(f)$ défini par

$$T(f) = \iint \psi \left(\frac{\int \phi(y) f(x, y) dy}{\int f(x, y) dy} \right) f(x, y) dxdy,$$

qui peut se réécrire sous la forme

$$T(f) = \langle \psi(H(f)), f \rangle$$

Pour exhiber l'estimateur \hat{T}_n , on a précédemment développé $T(f)$ autour d'un estimateur préliminaire \hat{f} et la nullité de la variance asymptotique provenait de la nullité de la dérivée seconde quand \hat{f} tend vers f . Ici, h joue le rôle de \hat{f} et développer $T(f)$ autour de h revient à développer la fonction $G(t) = T(f + th)$ autour de $t = 0$. Une fois obtenu ce développement, on montrera que la dérivée seconde tend vers 0 quand h tend vers f .

Ecrivons donc le développement de Taylor de G autour de 0 :

$$G(t) = G(0) + G'(0)t + \frac{1}{2}G''(0)t^2 + o(t^2). \quad (4.27)$$

On a directement que $G(0) = T(f)$. Pour calculer les dérivées de G , il faut calculer les dérivées $\frac{d}{dt}T(f + th)|_0$ et $\frac{d^2}{dt^2}T(f + th)|_0$. Ces dernières vont faire intervenir les dérivées

de l'opérateur H , qui sont obtenues en dérivant (4.26) : $\forall g(x)$,

$$\langle H(f + th), g(f + th) \rangle = \langle \phi(y), g(f + th) \rangle,$$

d'où

$$\left\langle \frac{d}{dt} H(f + th), g(f + th) \right\rangle + \langle H(f + th), gh \rangle = \langle \phi(y), gh \rangle,$$

soit en $t = 0$

$$\left\langle \frac{d}{dt} H(f + th)|_0, gf \right\rangle = \langle \phi(y), gh \rangle - \langle H(f), gh \rangle \quad (4.28)$$

qui tend vers 0 quand $h \rightarrow f$ d'après (4.26).

En dérivant une seconde fois, on trouve

$$\left\langle \frac{d^2}{dt^2} H(f + th)|_0, gf \right\rangle = -2 \left\langle \frac{d}{dt} H(f + th)|_0, gf \right\rangle \quad (4.29)$$

qui tend vers 0 quand $h \rightarrow f$ d'après (4.28).

Calculons maintenant les dérivées de l'opérateur $T(f)$:

$$T(f + th) = \langle \psi(H(f + th)), f + th \rangle$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} T(f + th) &= \langle \psi(H(f + th)), h \rangle + \left\langle \frac{d}{dt} \psi(H(f + th)), f + th \right\rangle \\ &= \langle \psi(H(f + th)), h \rangle + \left\langle \frac{d}{dt} H(f + th) \dot{\psi}(H(f + th)), f + th \right\rangle \\ \frac{d}{dt} T(f + th)|_0 &= \langle \psi(H(f)), h \rangle + \left\langle \frac{d}{dt} H(f + th)|_0, \dot{\psi}(H(f))f \right\rangle \end{aligned}$$

par commutativité du produit scalaire. Or $\dot{\psi}(H(f))$ est une fonction de x uniquement, donc on peut traiter le second terme avec (4.28) :

$$\frac{d}{dt} T(f + th)|_0 = \langle \psi(H(f)), h \rangle + \langle \phi(y), \dot{\psi}(H(f))h \rangle - \langle \psi(H(f)), \dot{\psi}(H(f))h \rangle.$$

On a donc

$$\frac{d}{dt} T(f + th)|_0 \rightarrow T(f) \text{ quand } h \rightarrow f.$$

En dérivant une seconde fois, on trouve

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} T(f + th) &= 2 \left\langle \frac{d}{dt} H(f + th) \dot{\psi}(H(f + th)), h \right\rangle + \left\langle \frac{d^2}{dt^2} H(f + th) \dot{\psi}(H(f + th)), f + th \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \left(\frac{d}{dt} H(f + th) \right)^2 \ddot{\psi}(H(f + th)), f + th \right\rangle, \end{aligned}$$

soit en $t = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} T(f + th)|_0 &= 2 \left\langle \frac{d}{dt} H(f + th)|_0, \dot{\psi}(H(f))h \right\rangle + \left\langle \frac{d^2}{dt^2} H(f + th)|_0, \dot{\psi}(H(f))f \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \left(\frac{d}{dt} H(f + th)|_0 \right)^2, \ddot{\psi}(H(f))f \right\rangle. \end{aligned}$$

Par (4.28) et (4.29) les deux premiers termes tendent vers 0 quand $h \rightarrow f$. D'autre part le dernier terme peut s'écrire

$$\left\langle \frac{d}{dt}H(f+th)|_0, \frac{d}{dt}H(f+th)|_0 \ddot{\psi}(H(f))f \right\rangle$$

qui tend aussi vers 0 quand $h \rightarrow f$ d'après (4.28) en remarquant que $\frac{d}{dt}H(f+th)|_0$ est une fonction de x uniquement. Finalement, on a

$$\frac{d^2}{dt^2}T(f+th)|_0 \rightarrow 0 \text{ quand } h \rightarrow f.$$

En revenant au développement (4.27) de la fonction G , on a alors

$$\begin{aligned} T(f+th) &= T(f) + \frac{d}{dt}T(f+th)|_0 t + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2}T(f+th)|_0 t^2 + o(t^2) \\ &\rightarrow (1+t)T(f) + o(t^2) \end{aligned}$$

quand $h \rightarrow f$. Le terme quadratique disparaît donc bien quand h tend vers f .

4.3.7 Quelle est la meilleure procédure pour estimer les indices de sensibilité ?

Dans cette section au titre volontairement un peu provocant, nous proposons de nous interroger sur la meilleure démarche à suivre pour estimer les indices de sensibilité. En effet, nous venons de présenter un estimateur qui atteint asymptotiquement la vitesse de convergence optimale pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2)$ à partir d'un échantillon $(X_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ où (X, Y) est un couple de variables aléatoires.

Or en analyse de sensibilité, on dispose d'un échantillon $(\mathbf{X}_i)_{i=1, \dots, n}$ des d facteurs X^1, \dots, X^d et d'un échantillon $(Y_i)_{i=1, \dots, n}$ de la sortie Y . Si l'on se fixe un facteur X^j , pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$ notre démarche propose de considérer uniquement l'échantillon $(X_i^j, Y_i)_{i=1, \dots, n}$. Autrement dit, toutes les réalisations des facteurs autres que le facteur j ne sont pas utilisées pour estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$. Remarquons que nous avons adopté la même philosophie dans notre approche par polynômes locaux. Une question naturelle s'impose alors : est-ce que le fait d'avoir observé d'autres variables X^k pour $k = 1, \dots, d$ et $k \neq j$ permet d'obtenir une meilleure estimation de $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$?

Avant de tenter de répondre à cette question, il est important de préciser en termes mathématiques ce que nous entendons par "meilleure estimation". De la même manière que précédemment, nous nous placerons dans le cadre de la théorie asymptotique de l'estimation semi-paramétrique. Ainsi, nous considérerons qu'un estimateur est efficace s'il atteint asymptotiquement la borne de Cramér-Rao semi-paramétrique. Pour calculer cette borne, détaillons tout d'abord le modèle statistique qui nous intéresse ici.

Nous considérons donc un vecteur aléatoire $(X^1, \dots, X^d, Y) = (\mathbf{X}, Y)$ de loi jointe $f \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^{d+1})$, dont on possède un échantillon $(X_i^1, \dots, X_i^d, Y_i)_{i=1, \dots, n}$. Soit j un entier compris entre 1 et d , on veut estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$. Par souci de clarté dans la présentation, nous noterons $X \equiv X^j$ la variable par rapport à laquelle on conditionne et $\mathbf{Z} \equiv (X^1, \dots, X^{j-1}, X^{j+1}, \dots, X^d)$ le vecteur aléatoire composé de toutes les variables X^k pour $k = 1, \dots, d$ et $k \neq j$. Ainsi, avec ces notations, notre problème est le suivant :

Estimer $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2)$ à partir d'un échantillon $(X_i, \mathbf{Z}_i, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ du vecteur aléatoire (X, \mathbf{Z}, Y) de loi jointe $f(x, \mathbf{z}, y) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^{d+1})$.

Il est donc naturel de rechercher maintenant la borne de Cramér-Rao semi-paramétrique associée à ce problème. Elle est donnée par le théorème suivant :

Théorème 4.26 (Borne de Cramér-Rao semi-paramétrique). *Considérons le problème de l'estimation de*

$$T(f) = \iint \left(\frac{\int y f(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy}{\int f(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy} \right)^2 f(x, \mathbf{z}, y) dx d\mathbf{z} dy = \mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X)^2)$$

pour (X, \mathbf{Z}, Y) de loi jointe $f \in \mathcal{E}$. Soit $f_0 \in \mathcal{E}$ une densité vérifiant les hypothèses du théorème 4.22. Alors pour tout estimateur \hat{T}_n de $T(f)$ et toute famille $\mathcal{V}(f_0)$ de voisinages de f_0 , on a

$$\inf_{\{\mathcal{V}(f_0)\}} \liminf_{n \rightarrow \infty} \sup_{f \in \mathcal{V}(f_0)} n \mathbb{E}(\hat{T}_n - T(f_0))^2 \geq C(f_0)$$

Autrement dit, la variance optimale pour l'estimation de $T(f)$ est $C(f_0)$.

Démonstration. Nous reprenons la démonstration du théorème 4.24. On peut écrire $T(f) - T(f_0)$ sous la forme

$$\iint \frac{1}{(\int f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy)^2} \left[2y \int y f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy \int f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy - \left(\int y f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy \right)^2 \right] (f(x, \mathbf{z}, y) - f_0(x, \mathbf{z}, y)) dx d\mathbf{z} dy + O \left(\iint (f(x, \mathbf{z}, y) - f_0(x, \mathbf{z}, y))^2 dx d\mathbf{z} dy \right),$$

ce qui implique que la dérivée de Fréchet $T'(f_0)$ de l'opérateur $T(f)$ au point f_0 est donnée par

$$T'(f_0) \cdot h = \langle H(f_0, \cdot), h \rangle$$

où

$$H(f_0, x, \mathbf{z}, y) = \frac{2y \int y f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy \int f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy - (\int y f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy)^2}{(\int f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy)^2}.$$

Remarquons que la fonction $H(f_0, x, \mathbf{z}, y)$ ne dépend pas de \mathbf{z} . En utilisant le fait que

$$\begin{aligned} \int f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy &= \int f(x, y) dy, \\ \int y f_0(x, \mathbf{z}, y) d\mathbf{z} dy &= \int y f(x, y) dy, \end{aligned}$$

où $f(x, y)$ est la densité marginale du couple (X, Y) , la fonction H se simplifie donc :

$$H(f_0, x, \mathbf{z}, y) = \frac{2y \int y f_0(x, y) dy \int f_0(x, y) dy - (\int y f_0(x, y) dy)^2}{(\int f_0(x, y) dy)^2}.$$

On constate alors que $H(f_0, x, \mathbf{z}, y)$ est égale à $H(f_0, x, y)$, la fonction intervenant dans la dérivée de $T(f)$ quand on ne considère qu'un couple (X, Y) pour estimer $T(f)$. Ainsi, la borne de Cramér-Rao semi-paramétrique est égale à celle calculée dans le théorème 4.24, c'est-à-dire $C(f_0)$. \square

Le théorème 4.26 que nous venons de démontrer répond parfaitement à la question que nous nous posons. En effet, la borne de Cramér-Rao en considérant un couple (X, \mathbf{Z}, Y) est la même que celle associée au problème avec le couple (X, Y) . Or l'estimateur \hat{T}_n que nous avons proposé atteint asymptotiquement cette borne : c'est donc le meilleur estimateur possible (au sens de l'efficacité) des indices de sensibilité. Autrement dit, la prise en compte des réalisations d'un vecteur \mathbf{Z} supplémentaire n'améliore pas l'estimation de l'indice de sensibilité $\text{Var}(\mathbb{E}(Y|X))$ (que \mathbf{Z} soit d'ailleurs indépendant ou pas de X et Y). Ce résultat justifie donc en un sens l'idée de travailler seulement sur les échantillons marginaux $(X_i^j, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ comme nous l'avons fait avec les polynômes locaux ou l'estimateur \hat{T}_n . Enfin, précisons que l'on peut toutefois nuancer ce résultat, dans le sens où il ne se base que sur des considérations asymptotiques. Il est possible qu'en pratique, en cas de connaissance plus importante du modèle, l'utilisation des réalisations de \mathbf{Z} puisse améliorer l'estimation des indices de sensibilité, cependant nous ne sommes pour l'instant pas capables de fournir un résultat théorique valable à taille d'échantillon n finie.

4.3.8 Tests numériques sur des modèles analytiques

Nous proposons dans cette section de valider numériquement l'estimateur \hat{T}_n que nous venons d'étudier sur quelques modèles analytiques.

Dans tous les exemples qui suivent, nous estimerons $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$ pour $j = 1, \dots, d$ à partir d'un échantillon $(X_i^j, Y_i)_{i=1, \dots, n}$ de taille $n = 100$ ou $n = 10000$ pour illustrer l'influence de la taille de l'échantillon sur l'estimation. Pour respecter les hypothèses du théorème 4.22, nous construisons notre estimateur préliminaire à partir de $n_1 = \lceil \log(n)/n \rceil$ observations : si $n = 100$, $n_1 = 21$ et si $n = 10000$, $n_1 = 1085$. Cet estimateur est un estimateur à noyau à support borné. Enfin, la taille du sous-ensemble M_n est choisie égale à 10 si $n = 100$ et à 100 si $n = 10000$ (plus précisément on prend $|M_n| = \sqrt{n}$).

Modèle 1

$$Y = \sum_{j=1}^d X^j,$$

où $d = 3$, les X_j suivent une loi uniforme $\mathcal{U}(\bar{x}_j - \sigma_j, \bar{x}_j + \sigma_j)$ et sont indépendants, $\bar{x}_j = 3^{j-1}$, et $\sigma_j = 0.5\bar{x}_j$. Nous renvoyons le lecteur à la section 4.2.3 pour une description plus complète de ce modèle et pour une interprétation des indices de sensibilité.

Nous générons 500 échantillons $(X_i^1, X_i^2, Y_i)_{i=1, \dots, n}$. Pour chacun de ces échantillons, nous calculons les estimateurs \hat{T}_n^j de $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$ pour $j = 1, 2$. La moyenne de \hat{T}_n^1 et \hat{T}_n^2 sur ces 500 échantillons est donnée dans le tableau 4.4.

Les résultats présentés dans ce tableau illustrent le bon comportement de \hat{T}_n : lorsque $n = 100$, l'estimation est correcte, dans le sens où les facteurs sont classés dans le bon ordre d'importance. Lorsque $n = 10000$, la précision de \hat{T}_n est excellente : l'erreur maximale est inférieure à 0.05%.

Par ailleurs, en utilisant l'échantillon centré réduit $(X_i^j, (Y_i - \bar{Y})/\hat{\sigma}(Y))_{i=1, \dots, n}$ où \bar{Y} et $\hat{\sigma}(Y)$ sont la moyenne et l'écart-type de Y estimés à partir de l'échantillon, \hat{T}_n^j estime

Facteurs	Calcul analytique de $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y X^j)^2)$	\hat{T}_n $n = 100$	\hat{T}_n $n = 10000$
X^1	169.08	167.65	169.04
X^2	169.75	171.05	169.75
X^3	175.75	177.02	175.72

TAB. 4.4 – Moments conditionnels pour le modèle 1.

directement l'indice de sensibilité S^j . On peut donc comparer \hat{T}_n^j avec les estimateurs basés sur les polynômes locaux. Le tableau 4.5 utilise les résultats obtenus dans la section 4.2.3 pour cette comparaison avec $n = 10000$.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{S}^1 (Poly. loc.)	\hat{T}_n (Est. eff)
X^1	0.01	0.01	0.0098
X^2	0.1	0.1027	0.1021
X^3	0.89	0.8873	0.8931

TAB. 4.5 – Comparaison polynômes locaux / estimateur efficace pour le modèle 1.

La comparaison entre l'estimation par polynômes locaux et l'estimateur efficace montre que les deux approches donnent des résultats tout à fait équivalents lorsque $n = 10000$.

Modèle 2

$$Y = X^1 + (X^2)^4,$$

où trois configurations (a), (b) et (c) sont considérées :

(a) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 1)$, $j = 1, 2$;

(b) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 3)$, $j = 1, 2$;

(c) $X^j \sim \mathcal{U}(0, 5)$, $j = 1, 2$.

Dans toutes les configurations les facteurs sont supposés indépendants.

Comme précédemment, nous générons 500 échantillons de taille n des facteurs, la moyenne des estimateurs \hat{T}_n^j pour $j = 1, \dots, 3$ est donnée dans le tableau 4.6.

De plus, si l'on compare l'estimateur par polynômes locaux à l'estimateur asymptotique efficace, on a par exemple les résultats du tableau 4.7.

Une fois de plus, l'estimateur efficace fournit une très bonne approximation de $\mathbb{E}(\mathbb{E}(Y|X^j)^2)$ dans toutes les configurations, plus particulièrement lorsque $n = 10000$. Par ailleurs, choisir $n = 100$ dans la configuration (a) permet déjà d'obtenir une bonne approximation des indices de sensibilité comme le montre le tableau 4.7.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{T}_n $n = 100$	\hat{T}_n $n = 10000$
Configuration (a)			
X^1	0.5733	0.5894	0.5729
X^2	0.5611	0.5468	0.5611
Configuration (b)			
X^1	314.04	305.98	318.27
X^2	779.85	814.04	787.82
Configuration (c)			
X^1	16258	18414	16897
X^2	44034	47667	44473

TAB. 4.6 – Moments conditionnels pour le modèle 2.

Facteurs	Calcul analytique	\hat{S}^1 (Poly. loc.) $n = 10000$	\hat{T}_n (Est. eff) $n = 100$	\hat{T}_n (Est. eff) $n = 10000$
Configuration (a)				
X^1	0.54	0.5398	0.5278	0.5392
X^2	0.46	0.4602	0.4232	0.4582

TAB. 4.7 – Comparaison polynômes locaux / estimateur efficace pour le modèle 2.

Comparaison des méthodes proposées avec les méthodes existantes

Nous proposons maintenant de comparer les deux méthodes que nous avons développées à la méthode de Oakley et O'Hagan présentée dans le chapitre 2. En effet, l'approche bayésienne qu'ils ont mise en place est actuellement une des méthodes de référence pour le calcul des indices de sensibilité. Nous avons décidé de confronter ces trois méthodes sur deux exemples analytiques complémentaires.

Le premier modèle que nous étudions s'exprime sous la forme

$$Y = 0.2 \exp(X^1 - 3) + 2.2|X^2| + 1.3(X^2)^6 - 2(X^2)^2 - 0.5(X^2)^4 - 0.5(X^1)^4 + 2.5(X^1)^2 + 0.7(X^1)^3 + \frac{3}{(8X^1 - 2)^2 + (5X^2 - 3)^2 + 1} + \sin(5X^1) \cos(3(X^1)^2)$$

où X^1 et X^2 sont deux variables aléatoires indépendantes distribuées selon une loi uniforme sur $[0, 1]$. Ce modèle, dont l'expression est quelque peu complexe à première vue, est régulièrement utilisé à l'IFP pour tester des surfaces de réponse. En effet, le graphe de la fonction donnée ici est constitué de pics et de creux : une bonne surface de réponse sera par exemple capable de détecter ces phénomènes. Le graphe est donné dans la figure 4.2.

Ce modèle nous permet ainsi de tester si la modélisation par processus gaussiens et l'approximation par polynômes locaux fournissent de bonnes approximations de la fonction ou des espérances conditionnelles. Nous nous plaçons dans le cas où l'on dispose d'un échantillon $(X_i^1, X_i^2, Y)_{i=1, \dots, n}$ de taille $n = 100$ à partir duquel on construit les différents estimateurs des indices de sensibilité. Précisons que pour l'approche par polynômes locaux, nous utilisons un échantillon supplémentaire des facteurs X^1 et X^2 de taille $n' = 5000$. En ce qui concerne la méthode de Oakley et O'Hagan, les intégrales multiples sont calculées analytiquement. Enfin, l'estimateur efficace est calculé en utilisant $n_1 = 21$ observations pour construire l'estimateur préliminaire \hat{f} et $|M_n| = 10$. Les résultats sont donnés dans le tableau 4.8.

Sensibilités	Calcul analytique	Oakley-O'Hagan	Poly. loc.	Est. eff
$\text{Var}(\mathbb{E}(Y X^1))$	1.0932	1.0539	1.0643	1.1701
$\text{Var}(\mathbb{E}(Y X^2))$	0.0729	0.1121	0.0527	0.0939

TAB. 4.8 – Comparaison Oakley-O'Hagan/polynômes locaux/estimateur efficace pour le modèle 1 du chapitre 4.

Les trois méthodes fournissent une bonne approximation des indices de sensibilité. Globalement, c'est l'approche par polynôme locaux qui donne la meilleure précision. Si on la compare à la méthode de Oakley et O'Hagan, l'explication est simple : la fonction de régression est plus difficile à approcher dans \mathbb{R}^2 (voir figure 4.2) que ne le sont ses marginales (autrement dit les moments conditionnels). Quant à l'estimateur asymptotiquement efficace, il se comporte mieux sur le second facteur que sur le premier, contrairement à la méthode de Oakley et O'Hagan.

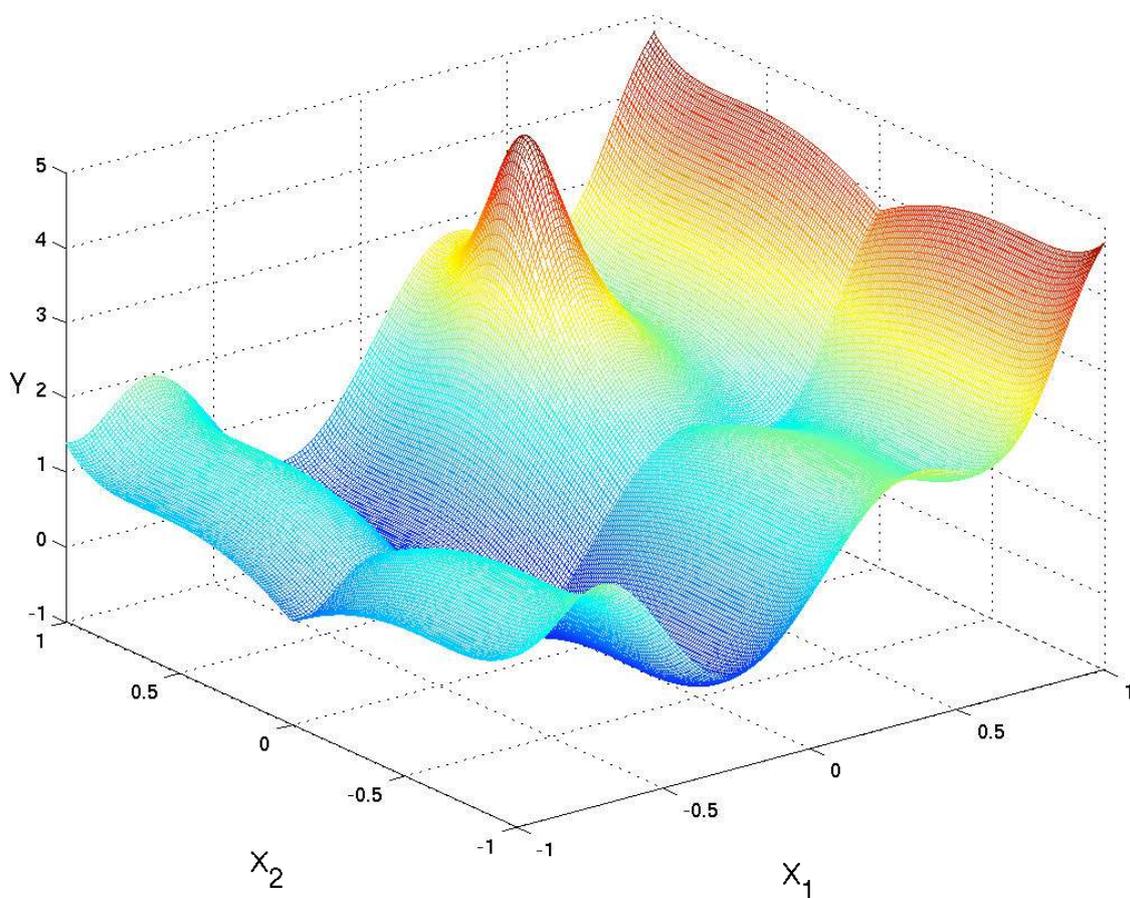


FIG. 4.2 – Graphe de la fonction du modèle 1 du chapitre 4.

4.3.9 Perspectives

L'estimateur efficace proposé pour l'estimation des indices de sensibilité est à la fois intéressant d'un point de vue théorique et d'un point de vue pratique. D'un point de vue théorique d'une part, puisqu'il atteint la borne de Cramér-Rao semi-paramétrique, ce qui en fait le meilleur estimateur possible pour les indices de sensibilité vis-à-vis de la convergence. D'un point de vue pratique d'autre part, car les résultats sur les modèles analytiques de la section précédente montrent une bonne précision, y compris avec des échantillons de taille n modérée ($n = 100$ par exemple).

Cependant, les propriétés théoriques que nous avons exhibées ne sont qu'asymptotiques. Cette constatation amène deux questions pertinentes : est-il possible d'obtenir des bornes pour la précision de l'estimateur valables à taille d'échantillon n finie ? De telles bornes permettent-elles alors une estimation adaptative ? Ces deux questions sont liées, dans le sens où le travail théorique qu'elles impliquent se base sur des inégalités de concentration pour les U-statistiques (Houdré and Reynaud 2002). Laurent (2005) a par exemple étudié ces questions dans le cadre de l'estimation de $\int f^2$ où une procédure d'estimation adaptative par sélection de modèle est proposée. Nous pensons qu'il est possible d'étendre ces résultats à l'estimation adaptative des fonctionnelles de moments conditionnels $\mathbb{E}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)))$ au prix d'un investissement conséquent dans le traitement des inégalités pour les U-statistiques et des calculs théoriques nécessaires.

Par ailleurs, nous avons appliqué ici l'estimateur efficace de fonctionnelles générales de la forme $\mathbb{E}(\psi(\mathbb{E}(\phi(Y)|X)))$ au seul problème de l'analyse de sensibilité, à savoir le cas particulier $\psi(x) = x^2$ et $\phi(x) = x$. Or, les conditions requises sur ψ et ϕ sont peu contraignantes, ce qui nous laisse penser que notre estimateur pourrait s'appliquer avec succès à d'autres problèmes. Une des perspectives que nous envisageons est par exemple l'étude de l'utilisation de cet estimateur aux tests d'adéquation pour les moments conditionnels, déjà étudiés dans un cadre non-paramétrique par Ferrigno (2004).



Conclusions et perspectives

Contributions

Le travail que nous avons présenté dans ce mémoire s'articule autour de deux thèmes fondamentaux dans l'étude de tout phénomène à travers un modèle qui le caractérise, l'analyse d'incertitudes et l'analyse de sensibilité. Les méthodes classiquement mises en oeuvre pour mener ces analyses souffrent de limitations qui nous ont interdit de les appliquer aux modèles de cinétique chimique qui ont cours à l'IFP.

En effet, dans le cadre probabiliste pour l'analyse d'incertitudes, on suppose soit que la loi des facteurs est connue, soit qu'il est facile d'en obtenir un échantillon. Ce n'est pas le cas des estimateurs des paramètres d'un modèle de cinétique chimique qui sont donnés comme solutions d'un problème de minimisation. Par ailleurs, les méthodes usuelles pour l'estimation des indices de sensibilité requièrent des facteurs indépendants. Ce n'est pas le cas des estimateurs des paramètres cinétiques, qui sont intrinsèquement corrélés entre eux.

Notre premier objectif était de fournir une procédure permettant de générer un échantillon de la loi d'un estimateur obtenu par maximum de vraisemblance, ceci avec un temps de calcul aussi faible que possible.

Nous nous sommes particulièrement intéressés à la technique du bootstrap, qui permet, sous certaines hypothèses, d'obtenir une approximation de la loi d'un estimateur du maximum de vraisemblance. Nous avons testé cette méthode sur deux modèles de cinétique chimique et montré qu'elle fournissait une solution au problème posé. En revanche, nous avons souligné le fait que c'est une procédure coûteuse en temps de calcul. Elle ne peut donc être envisagée que sur des modèles avec peu de paramètres.

Pour limiter ce temps de calcul, nous avons développé deux méthodes particulièrement originales qui permettent d'approcher la distribution bootstrap d'un estimateur, et par conséquent la distribution de l'estimateur considéré. Elles sont basées sur l'idée naturelle

consistant à considérer un estimateur bootstrap comme une fonction des résidus rééchantillonnés, et d'approcher ensuite cette fonction complexe par une surface de réponse. Le développement en polynômes de chaos et la régression à vecteurs de support sont les deux surfaces de réponse que nous avons étudiées et explicitées dans notre travail. Nous avons ainsi réduit le temps de calcul d'un facteur de l'ordre de 10. Cette procédure d'approximation a fourni d'excellents résultats sur le modèle simplifié d'hydrodésulfuration et sur le modèle d'isomérisation du n-butane, dans le sens où la distribution bootstrap est approchée très précisément en réduisant de manière considérable le coût calculatoire.

Par suite, nous avons encore amélioré cette méthode si les dérivées du modèle que l'on étudie sont connues ou calculables numériquement. En effet, en utilisant l'information supplémentaire sur les dérivées, nous avons montré qu'il est possible de réduire de manière drastique le temps de calcul, d'un facteur de l'ordre de 100. Nous avons testé cette idée sur tous les modèles de cinétique chimique du chapitre 1, et les résultats se sont avérés excellents.

Notons aussi que nous avons en premier lieu proposé une méthode basée sur l'algorithme de Métropolis en écrivant la loi de l'estimateur à l'aide du formalisme bayésien. Nous avons montré cependant que son inconvénient majeur est relié à la convergence des chaînes de Markov : il n'existe pas à notre connaissance de diagnostic suffisamment fiable pour juger d'une telle convergence quand l'espace d'état est non-dénombrable.

Notre deuxième objectif consistait à développer une méthode permettant d'estimer les indices de sensibilité dans le cas où les facteurs ne sont pas indépendants.

La première méthode que nous avons proposée est basée sur l'estimation des moments conditionnels par polynômes locaux. A partir de cette estimation, une méthode de plug-in est ensuite utilisée pour estimer les indices de sensibilité. Nous avons montré que cette approche fournit des estimateurs consistants d'un point de vue théorique. D'un point de vue pratique, nous avons également démontré leur précision sur des modèles analytiques et sur le modèle d'isomérisation du n-butane. Nous l'avons aussi comparé à l'une des méthodes de référence, celle de Oakley et O'Hagan. Cette comparaison a souligné que les deux méthodes se basent sur les mêmes idées de surface de réponse et partagent donc l'avantage de ne requérir qu'un faible nombre d'observations pour construire la surface. Mais notre méthode ne souffre pas pour sa part du fléau de la dimension, ce qui rend son champ d'application plus large que celle de Oakley et O'Hagan.

Une grande partie de notre travail a aussi été consacrée à l'étude du meilleur estimateur possible des indices de sensibilité, au sens de l'efficacité asymptotique. Cette étude théorique particulièrement complète nous a amené à proposer un estimateur asymptotiquement efficace pour les indices de sensibilité, c'est-à-dire un estimateur qui converge avec la meilleure vitesse possible (borne de Cramér-Rao semi-paramétrique). C'est un résultat important, puisqu'il indique que d'un point de vue théorique il n'est pas possible de trouver un estimateur meilleur que celui que nous avons proposé. En ce qui concerne son comportement en pratique, nous l'avons comparé à l'estimateur par polynômes locaux et à l'estimateur de Oakley et O'Hagan. Nous avons montré qu'il atteint une précision comparable à ces deux méthodes. Par ailleurs, un travail théorique supplémentaire a permis de généraliser cet estimateur à des fonctionnelles de moments conditionnels plus générales que les indices de sensibilité.

Perspectives

L'idée d'approcher la distribution bootstrap d'un estimateur par surfaces de réponse a été étudiée d'un point de vue empirique dans notre travail, dans le sens où elle n'a pas été validée théoriquement. Nous pensons qu'il est possible de combiner les bornes de l'erreur d'approximation du bootstrap (Mammen 1992) et les bornes de généralisation de la régression à vecteurs de support (Vapnik 1998) dans le but de fournir des bornes de l'erreur d'approximation de notre méthodologie. Si l'on obtient de plus des bornes non-asymptotiques, un tel résultat permettrait de contrôler cette erreur en fonction du nombre de minimisations bootstrap à effectuer. Ainsi, un compromis entre temps de calcul et précision pourrait être envisagé en pratique.

Par ailleurs, l'introduction des dérivées en régression à vecteurs de support est récente. Il serait pertinent de comparer de manière exhaustive les différentes approches qui ont été proposées. Ainsi, la méthode la plus adaptée au problème d'approximation de la distribution bootstrap d'un estimateur pourrait être exhibée et étudiée plus en détails que ce que nous avons proposé dans notre travail.

Nous pensons de plus qu'il serait pertinent d'approfondir les méthodes numériques de résolution des systèmes linéaires qui apparaissent en SVR dans le but de traiter des problèmes de grande dimension avec les dérivées. En effet, dans de tels cas les matrices à traiter sont de dimension élevée (plusieurs milliers) et à nos yeux l'utilisation d'approches d'algèbre relativement fines sont à envisager.

Enfin, il nous semble intéressant de construire une méthode d'estimation adaptative pour l'estimateur efficace des indices de sensibilité. L'investissement théorique pour y arriver est conséquent, cependant, son intérêt est réel pour guider l'utilisation de cet estimateur. Par ailleurs, le résultat que nous avons obtenu sur des fonctionnelles plus générales de moments conditionnels pourrait s'avérer utile pour d'autres applications, notamment certains tests d'hypothèses.



Bibliographie

- Abramowitz, M. and Stegun, I. A. (1964), *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, New York : Dover.
- Aizerman, M. A., Braverman, E. M. and Rozonoér, L. I. (1964), ‘Theoretical foundations of the potential function method in pattern recognition learning’, *Automation and Remote Control* **25**, 821–837.
- Antoniadis, A., Berruyer, J. and Carmona, R. (1992), *Régression non linéaire et applications*, Collection Economie et Statistiques Avancées, Paris : Economica.
- Aronszajn, N. (1950), ‘Theory of reproducing kernels’, *Transactions of the American Mathematical Society* **68**, 337–404.
- Aubin, J. P. (2000), *Applied Functional Analysis*, 2nd edn, New York : Wiley-Interscience.
- Bishop, C. M. (1995), *Neural Networks for Pattern Recognition*, Clarendon Press, Oxford.
- Bochner, S. (1959), *Lectures on Fourier Integrals*, Princeton University Press.
- Boutahar, J. (2004), Méthodes de Réduction et de Propagation d’Incertitudes, PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Brieman, L. and Friedman, J. H. (1985), ‘Estimating optimal transformations for multiple regression and correlation’, *JASA* **80**, 580–598.
- Brooks, S. P. (1996), Quantitative convergence diagnosis for mcmc via cusums, Technical report, University of Bristol.
- Brooks, S. P., Dellaportas, P. and Roberts, G. O. (1997), ‘An approach to diagnosing total variation convergence of mcmc algorithms’, *Journal of Computational and Graphical Statistics* **6**, 251–265.
- Brooks, S. P. and Gelman, A. (1998), ‘General methods for monitoring convergence of iterative simulations’, *Journal of Computational and Graphical Statistics* **7**, 434–455.

- Brooks, S. P. and Roberts, G. O. (1998), 'Assessing convergence of markov chain monte carlo algorithms', *Statistics and Computing* **8**, 319–335.
- Brémaud, P., ed. (1999), *Markov Chains : Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation and Queues*, New York : Springer-Verlag.
- Bühlmann, P. (1997), 'Sieve bootstrap for time series', *Bernoulli* **3**, 123–148.
- Cameron, R. H. and Martin, W. T. (1947), 'The orthogonal development of non-linear functionals in series of fourier-hermite functionals', *Annals of Mathematics* **48**, 385–392.
- Canty, A. (1995), A System to Test for Convergence of the Gibbs Sampler, PhD thesis, University of Toronto.
- Chapelle, O. (2004), Support Vector Machines : Principes d'induction, Réglage automatique et Connaissances a priori, PhD thesis, Université Paris VI.
- Corliss, G., Faure, C., Griewank, A., Hascoet, L. and Naumann, U., eds (2000), *Automatic Differentiation of Algorithms : From Simulation to Optimization*, New York : Springer-Verlag.
- Cover, T. M. and Thomas, J. A., eds (1991), *Elements of Information Theory*, New York : Wiley.
- Cowles, M. K. and Carlin, B. P. (1996), 'Markov chain monte carlo convergence diagnostics : A comparative review', *Journal of the American Statistical Association* **91**, 883–904.
- Cukier, R. I., Fortuin, C. M., Shuler, K. E., Petschek, A. G. and Schaibly, J. H. (1973), 'Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory', *The Journal of Chemical Physics* **59**, 3873–3878.
- Debusschere, B., Najm, H., Knio, P. P. O., Ghanem, R. and Le Maître, O. (2004), 'Numerical challenges in the use of polynomial chaos representations for stochastic processes', *SIAM Journal of Scientific Computing* **26**, 698–719.
- Devictor, N. (1996), Fiabilité mécanique : méthodes FORM/SORM et couplages avec des codes éléments finis par des surfaces de réponse adaptatives, PhD thesis, Université Blaise Pascal.
- Devroye, L. (1986), *Non-Uniform Random Variate Generation*, New York : Springer-Verlag.
- Diaconis, P. (1996), The cutoff phenomenon in finite markov chains, in 'Proceedings of National Academy of Sciences of the United States of America', Vol. 93, pp. 1659–1664.
- Efron, B. (1979), 'Bootstrap methods : Another look at the jackknife', *Annals of Statistics* **7**, 1–26.
- Fan, J. and Gijbels, I. (1996), *Local Polynomial Modelling and its Applications*, London : Chapman and Hall.
- Fan, J., Gijbels, I., Hu, T. C. and Huang, L. S. (1996), 'An asymptotic study of variable bandwidth selection for local polynomial regression', *Statistica Sinica* **6**, 113–127.
- Fan, J. and Yao, Q. (1998), 'Efficient estimation of conditional variance functions in stochastic regression', *Biometrika* **85**, 645–660.

- Ferrigno, S. (2004), Un test d'adéquation global pour la fonction de répartition conditionnelle, PhD thesis, Université de Montpellier.
- Filliben, J. J. (1975), 'The probability plot correlation coefficient test for normality', *Technometrics* **17**, 111–117.
- Franke, J., Kreiss, J. P. and Mammen, E. (2002), 'Bootstrap of kernel smoothing in non-linear time series', *Bernoulli* **8**, 1–37.
- Gao, J. B., Gunn, S. R., Harris, C. J. and Brown, M. (2002), 'A probabilistic framework for svm regression and error bar estimation', *Machine Learning* **46**, 71–89.
- Garren, S. and Smith, R. L. (1995), Estimating the second largest eigenvalue of a markov transition matrix, Technical report, University of Cambridge.
- Gelman, A. and Rubin, D. (1992), 'Inference from iterative simulation using multiple sequences', *Statistical Science* **7**, 457–511.
- Geweke, J. (1992), Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments, in J. M. Bernardo, A. F. M. Smith, A. P. Dawid and J. O. Berger, eds, 'Bayesian Statistics 4', New York : Oxford University Press, pp. 169–193.
- Ghanem, R. and Spanos, P. (1991), *Stochastic Finite Elements : a Spectral Approach*, Springer-Verlag.
- Härdle, W., Horowitz, J. L. and Kreiss, J. P. (2003), 'Bootstrap methods for time series', *International Statistical Review* **71**, 435–459.
- Hirsch, F. and Lacombes, G. (1999), *Éléments d'analyse fonctionnelle*, Dunod, Paris.
- Hjorth, U. and Vadeby, A. (2003), The empirical kl-measure of mcmc convergence, in 'Vadeby, A. (2003). Computer based Statistical Treatment in Models with Incidental Parameters, inspired by crash data. Dissertation 814, Linköping studies in Science and Engineering'.
- Hjorth, U. and Vadeby, A. (2005), 'Subsample distribution distance and mcmc convergence', *Scandinavian Journal of Statistics* **32**, 313–326.
- Hoeffding, W. (1948), 'A class of statistics with asymptotically normal distribution', *Annals of Mathematical Statistics* **19**, 293–325.
- Horowitz, J. L. (1997), 'Bootstrap methods in econometrics : theory and numerical performance, in d.m. kreps and k.f. wallis, eds. *advances in economics and econometrics : theory and applications*'.
- Houdré, C. and Reynaud, P. (2002), Stochastic inequalities and applications, in 'Euroconference on Stochastic inequalities and applications', Birkhauser.
- Ibragimov, I. A. and Khas'minskii, R. Z. (1991), 'Asymptotically normal families of distributions and efficient estimation', *The Annals of Statistics* **19**, 1681–1724.
- Isukapalli, S. S. (1999), Uncertainty Analysis of Transport-Transformation Models, PhD thesis, New Brunswick.
- Jacques, J., Lavergne, C. and Devictor, N. (2004), Sensitivity analysis in presence of model uncertainty and correlated inputs, in 'Proceedings of SAMO2004'.
- Johnson, V. E. (1996), 'Studying convergence of markov chain monte carlo algorithms using coupled sample paths', *Journal of the American Statistical Association* **91**, 154–166.

- Jones, M. C., Marron, J. S. and Sheather, S. J. (1996), 'A brief survey of bandwidth selection for density estimation', *Journal of the American Statistical Association* **91**, 401–407.
- Karush, W. (1939), Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Constraints, PhD thesis, Department of Mathematics, University of Chicago.
- Kennedy, M. C. and O'Hagan, A. (2001), 'Bayesian calibration of computer models (with discussion)', *Journal of the Royal Statistical Society Series B* **63**, 425–464.
- Kimeldorf, G. and Wahba, G. (1971), 'Some results on tchebycheffian spline functions', *Journal of Mathematical Analysis and Applications* **33**, 82–95.
- Kuhn, H. W. and Tucker, A. W. (1951), Nonlinear programming, in '2nd Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probabilistics', University of California Press, pp. 481–492.
- Lahiri, S. N. (2003), *Resampling Methods for Dependent data*, New York : Springer-Verlag.
- Laurent, B. (1996), 'Efficient estimation of integral functionals of a density', *The Annals of Statistics* **24**, 659–681.
- Laurent, B. (2005), 'Adaptive estimation of a quadratic functional of a density by model selection', *ESAIM : Probability and Statistics* **9**, 1–19.
- Lázaro, M., Santamaría, I., Pérez-Cruz, F. and Artés-Rodríguez, A. (2003), Support vector machine for the simultaneous approximation of a function and its derivative, in '2003 IEEE 13th Workshop on Neural Networks for Signal Processing, NNSP'03', pp. 189–198.
- Lázaro, M., Santamaría, I., Pérez-Cruz, F. and Artés-Rodríguez, A. (2005), 'Support vector machine for the simultaneous approximation of a function and its derivatives', *Neurocomputing* **69**, 42–61.
- Lin, Z. (1992), 'On the increments of partial sums of a ϕ -mixing sequence', *Theory of Probability and its Applications* **36**, 316–326.
- Liu, C., Liu, J. and Rubin, D. B. (1993), A control variable for assessment of the convergence of the gibbs sampler, in 'Proceedings of the Statistical Computing Section of the American Statistical Association', pp. 74–78.
- Mammen, E. (1992), *When Does Bootstrap Work? Asymptotic Results and Simulations*, New York : Springer-Verlag.
- Mason, D. and Newton, M. A. (1992), 'A rank statistic approach to the consistency of a general bootstrap', *The Annals of Statistics* **20**, 1611–1624.
- McKay, M. D. (1995), Evaluating prediction uncertainty, Technical Report NUREG/CR-6311, U.S. Nuclear Regulatory Commission and Los Alamos National Laboratory.
- McKay, M. D. (1996), Application of variance-based methods to NUREG-1150 uncertainty analyses, Technical Report NUREG-1150, U.S. Nuclear Regulatory Commission and Los Alamos National Laboratory.
- McKay, M. D., Beckman, R. J. and Conover, W. J. (1979), 'A comparison of three methods of selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code', *Technometrics* **21**, 239–245.

- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. and Teller, E. (1953), 'Equation of state calculations by fast computing machines', *Journal of Chemical Physics* **21**, 1087–1092.
- Morris, M. D. (1991), 'Factorial sampling plans for preliminary computational experiments', *Technometrics* **33**, 161–174.
- Mykland, P., Tierney, L. and Yu, B. (1995), 'Regeneration in markov chain samplers', *Journal of the American Statistical Association* **90**, 233–241.
- Neal, R. M. (1993), Probabilistic inference using markov chain monte carlo methods, Technical Report CRG-TR-93-1, Department of Computer Science, University of Toronto.
- Nilsson, N. J. (1965), *Learning Machines : Foundations of Trainable Pattern-Classifying Systems*, New York : McGraw-Hill.
- Oakley, J. E. and O'Hagan, A. (2004), 'Probabilistic sensitivity analysis of complex models : a bayesian approach', *Journal of the Royal Statistical Society Series B* **66**, 751–769.
- O'Hagan, A. (1994), Bayesian inference, in 'Kendall's Advanced Theory of Statistics', Vol. 2B, London : Arnold.
- Ong, C. S., Smola, A. J. and Williamson, R. C. (2005), 'Learning the kernel with hyperkernels', *Journal of Machine Learning Research* **6**, 1043–1071.
- Owen, A. B. (2005), Multidimensional variation for quasi-monte carlo, in 'Fan, J. and Li, G., editors, International Conference on Statistics in honour of Professor Kai-Tai Fang's 65th birthday.'
- Peccati, G. (2004), 'Hoeffding-anova decompositions for symmetric statistics of exchangeable observations', *The Annals of Probability* **32**, 1796–1829.
- Pérez-Cruz, F., Alarcón-Diana, P. L. and Artés-Rodríguez, A. (2000), An irwls procedure for svr, in 'EUSIPCO'00'.
- Pérez-Cruz, F., Alarcón-Diana, P. L. and Artés-Rodríguez, A. (2004), Multidimensional svm to include the samples of the derivative in the reconstruction of a function, in 'EUSIPCO'04'.
- Propp, J. G. and Wilson, D. B. (1996), 'Exact sampling with coupled markov chains and applications', *Random Structures and Algorithms* **9**, 223–252.
- Raftery, A. E. and Lewis, S. M. (1992), How many iterations in the gibbs sampler ?, in J. M. Bernardo, A. F. M. Smith, A. P. Dawid and J. O. Berger, eds, 'Bayesian Statistics 4', New York : Oxford University Press, pp. 169–193.
- Ratto, M., Tarantola, S. and Saltelli, A. (2001), Estimation of importance indicators for correlated inputs, in 'Proceedings of ESREL2001'.
- Ritter, C. and Tanner, M. A. (1992), 'Facilitating the gibbs sampler : The gibbs stopper and the griddy-gibbs sampler', *Journal of the American Statistical Association* **87**, 861–868.
- Robert, C. P. (1996), 'Convergence assessments for markov chain monte carlo methods', *Statistical Science* **10**, 231–253.
- Roberts, G. O. and Polson, N. G. (1994), 'On the geometric convergence of the gibbs sampler', *Journal of the Royal Statistical Society, Series B* **56**, 377–384.

- Ruppert, D. (1997), 'Empirical-bias bandwidths for local polynomial nonparametric regression and density estimation', *Journal of the American Statistical Association* **92**, 1049–1062.
- Ruppert, D., Wand, M. P. and Carroll, R. J. (2003), *Semiparametric Regression*, Cambridge : Cambridge University Press.
- Ruppert, D., Wand, M. P., Holst, U. and Hössjer, O. (1997), 'Local polynomial variance function estimation', *Technometrics* **39**, 262–273.
- Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J. and Wynn, H. P. (1989), 'Design and analysis of computer experiments', *Statistical Science* **4**, 409–435.
- Saltelli, A., Chan, K. and Scott, E. M. (2000), *Sensitivity Analysis*, Chichester : Wiley Series in Probability and Statistics.
- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F. and Ratto, M. (2004), *Sensitivity Analysis in Practice*, Chichester : Wiley.
- Santner, T. J., Williams, B. J. and Notz, W. I. (2003), *The Design and Analysis of Computer Experiments*, New York : Springer-Verlag.
- Schoutens, W. (2000), *Stochastic Processes and Orthogonal Polynomials*, New York : Springer-Verlag.
- Schuëller, G. I., Pradlwarter, H. J. and Koutsourelakis, P. S. (2003), A comparative study of reliability estimation procedures for high dimensions using fe analysis, in 'Electronic Proceedings of the 16th ASCE Engineering Mechanics Conference'.
- Schwarz, G. (1978), 'Estimating the density of a model', *The Annals of Statistics* **6**, 461–464.
- Scott, D. W. (1992), *Multivariate Density Estimation : Theory, Practice, and Visualization*, Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics.
- Seeger, M. (2004), 'Gaussian processes for machine learning', *International Journal of Neural Systems* **14(2)**, 69–106.
- Serfling, R. J. (1980), *Approximation Theorems of Mathematical Statistics*, Wiley Series in Probability and Statistics.
- Shafer, G. (1976), *A Mathematical Theory of Evidence*, Princeton University Press.
- Shölkopf, B., Herbrich, R. and Smola, A. (2001), Lecture notes in computer science, in 'Fourteenth Annual Conference on Computational Learning Theory', Vol. 2111, London : Springer, pp. 416–426.
- Smith, A. F. M. and Gelfand, A. E. (1992), 'Bayesian statistics without tears : A sampling-resampling perspective', *The American Statistician* **46**, 84–88.
- Smola, A. J. (1998), Learning with Kernels, PhD thesis, Technische Universität Berlin.
- Smola, A. J. and Schölkopf, B. (2004), 'A tutorial on support vector regression', *Statistics and Computing* **14**, 199–222.
- Sobol', I. M. (1993), 'Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models', *MMCE* **1**, 407–414.
- Stute, W., Gonzalez Manteiga, W. and Presedo Quindimil, M. (1998), 'Bootstrap approximations in models checks for regression', *Journal of the American Statistical Association* **93**, 141–149.

- Surla, K., Casanave, D., Duchene, P. and Joly, J. F. (2004), C5/C6 paraffins isomerization : New insights in reaction mechanisms, *in* '13th ICC International Congress on Catalysis'. Poster.
- Tatang, M. A. (1995), Direct Incorporation of Uncertainty in Chemical and Environmental Engineering Systems, PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology.
- Tikhonov, A. N. and Arsenin, V. Y. (1977), *Solutions of Ill-posed Problems*, Scripta Series in Mathematics, Winston and Sons, John Wiley and Sons.
- Turanyi, T. (1990), 'Sensitivity analysis of complex kinetic systems', *Journal of Mathematical Chemistry* **5**, 203–248.
- Van Der Vaart, A. W. (1998), *Asymptotic Statistics*, Cambridge : Cambridge University Press.
- Van Gestel, T., Espinoza, M., Baesens, B., Suykens, J. A. K., Brasseur, C. and De Moor, B. (2006), 'A bayesian nonlinear support vector machine error correction model', *Journal of Forecasting* **25**, 77–100.
- Vapnik, V. (1995), *The Nature of Statistical Learning*, New York : Springer.
- Vapnik, V. (1998), *Statistical Learning Theory*, New York : John Wiley and Sons.
- Vapnik, V., Golowich, S. and Smola, A. J. (1997), Support vector method for function approximation, regression estimation, and signal processing, *in* M. J. M. Mozer and T. Petsche, eds, 'Advances in Neural Information Processing Systems 9', MIT Press, pp. 281–287.
- Vapnik, V. N. (1982), *Estimation of Dependences Based on Empirical Data*, Berlin : Springer.
- Vasquez, E. (2005), Modélisation Comportementale de Systèmes Non-linéaires Multivariables par Méthodes à Noyaux et Applications, PhD thesis, Université Paris XI.
- Vasquez, E. and Walter, E. (2003), Multi-output support vector regression, *in* '13th IFAC Symposium on System Identification, SYSID 2003', IFAC, pp. 1820–1825.
- Vasquez, E. and Walter, E. (2005), Estimating derivatives and integrals with Kriging, *in* '44th IEEE CDC and ECC', pp. 8156–8161.
- Vilar-Fernández, J. M. and Francisco-Fernández, M. (2002), 'Local polynomial regression smoothers with AR-error structure', *TEST* **11**, 439–464.
- Wahba, G. (1990), *Spline Models for Observational Data*, Vol. 59 of *CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics*, SIAM, Philadelphia.
- Wahba, G. (1998), Support vector machines, reproducing kernel hilbert spaces, and randomized gacv, *in* B. Schölkopf, C. J. C. Burges and A. J. Smola, eds, 'Advances in Kernel Methods : Support Vector Learning', MIT Press, pp. 69–87.
- Wand, M. and Jones, M. (1994), *Kernel Smoothing*, London : Chapman and Hall.
- Wiener, N. (1938), 'The homogeneous chaos', *Amer. J. Math.* **60**, 897–936.
- Ycart, B. (1999), 'Cutoff for samples of markov chains', *ESAIM : Probability and Statistics* **3**, 89–106.
- Yu, B. (1995), Estimating L^1 error of kernel estimator : Monitoring convergence of markov samplers, Technical report, Department of Statistics, University of California, Berkeley.

- Yu, B. and Mykland, P. (1998), 'Looking at markov samplers through cusum path plots : A simple diagnostic idea', *Statistics and Computing* **8**, 275–286.
- Zellner, A. and Min, C. (1995), 'Gibbs sampler convergence criteria', *Journal of the American Statistical Association* **90**, 921–927.
- Zwald, L. (2005), Performances Statistiques d'Algorithme d'Apprentissage : "Kernel Projection Machine" et Analyse en Composantes Principales à Noyau, PhD thesis, Université Paris XI.